

# PtAu表面の分子吸着挙動に関する第一原理計算

大阪大学工学研究科ビジネスエンジニアリング専攻博士後期課程3年 景山悟

## 研究目的

Ptナノ粒子は燃料電池電極触媒として広く研究されている。  
実用上問題となるのは、駆動中のPtの酸化・溶出による触媒劣化である。  
これを抑制するために、Ptに他元素を添加して劣化への耐久性を付与す研究が近年盛んである。  
本研究では、PtにAuを添加した場合、Ptの酸化プロセスにどう影響するか第一原理計算に基づき明らかにする。

## 内容

第一原理計算コードSTATE-Senri(平面波基底、ウルトラソフト擬ポテンシャル)を用いて、以下の計算を構造を計算し、分子吸着エネルギーを求めた。

Pt fcc (111) 4層スラブ、 $2 \times 2$ ユニットセル

1、2層目のPtをAuで置換

hollowサイト、あるいは2層目にO原子

利用計算機 SX-8R、SX-9

## 結果

Pt表面上に、あるいはアドアトムとしてAu原子が配置することで、O分子吸着エネルギーが低くなることを確認した。

