

グラフェン被覆NiMo電極における 水素発生反応の第一原理計算

大阪大学 基礎工学研究科 大戸 達彦

目的 酸性水分解電極としての白金を代替する合金の開発が盛んに行われており、その中でNiMoは白金に近い水素発生能力を持つが、強酸に溶けてしまうという欠点がある。NiMoをグラフェンで被覆することで、その欠点を克服した電極材料の開発を目指す。

結果 穴あきグラフェンで被覆したNiMo表面と無被覆のNiMo表面において水素原子が吸着する際の自由エネルギー変化を計算した。

利用した計算機	VCC
ノード時間	17500時間
パッケージ	VASP
使用メモリ	120GB
並列化	40並列

