

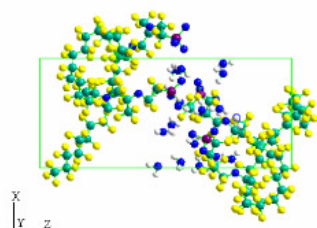
## 3E04

### 高分子電解質ナフィオン中でのプロトン移動の 第一原理分子動力学シミュレーション

(産総研・豊田中研・JST-CREST) ○崔隆基・土田英二・池庄司民夫・山川俊輔・兵頭志明

【序】高分子電解質型燃料電池は燃料電池のひとつであり、用いられている高分子膜としては現在パーフルオロスルホン酸ポリマーのひとつであるナフィオンがよく知られている。ナフィオンはテフロン骨格にスルホン酸基を末端につけた側鎖がぶら下がった構造をもつ。ナフィオンは化学的、機械的安定性が優れていることと高いプロトン伝導度などの理由により、長い間高分子膜として用いられているが、さらに優れた物理、化学的性質をもちより低コストで製造できる高分子の開発に向けて様々な研究が行われている。新しい高分子の開発をトライ&エラーから合理的設計にするためには、ナフィオン中でのプロトン移動の詳細を分子レベルで理解するのが不可欠である。我々はナフィオン中のプロトン及び水の運動の詳細を得るため第一原理分子動力学シミュレーションを行ったので報告する。

(a)



(b)

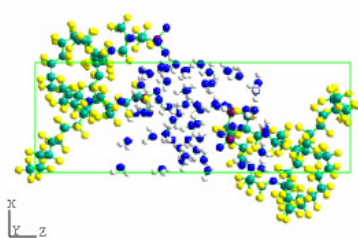


Fig.1 Snapshots of the simulated final configurations of (a) dry and (b) wet model.

切れているが、Wet な系はバルクの水のような構造を持っている。このような水の構造の違いは、プロトンの伝導性に影響を与えている。実際に平均 2 乗変位をシミュレーション時間に関してプロットすると Fig. 2 のようになりプロトンの拡散が Wet な系で早いのが分かる。これは発達した

【方法】ナフィオン中でのプロトン伝導度はナフィオン中の水の量に依存するため、我々は水の量が少ない (Dry) 系と多い (Wet) 系、二つの系に関して計算を行い比較を行った。Dry な系は含水率 (スルホン酸と水の比) を 4.1 に、Wet な系は 12.7 にした。第一原理計算の前に古典分子動力学計算を行い第一原理計算の初期構造を作った。古典分子動力学計算は Fujitsu Materials Explorer 3.0 を用いて行った。第一原理分子動力学計算は PBE 汎関数を用いて 80°C で行った。第一原理計算は著者のひとりによって開発されている *FEMTECK*<sup>1</sup> を用いた。

【結果】Fig. 1 に Dry と Wet な系のスナップショットを示す。Dry な系は水の水素結合ネットワークが

<sup>1</sup> [http://staff.aist.go.jp/eiji.tsuchida/jp\\_femteck.htm](http://staff.aist.go.jp/eiji.tsuchida/jp_femteck.htm)

水素結合ネットワークにより Grötthuss 機構による拡散が顕著に起きているためだと考えられる。我々はシミュレーションの結果から、水の拡散、電気浸透係数らをも計算した。これらの物理量

と含水率及びナフィオン中の水の構造との関係は当日報告する予定である。

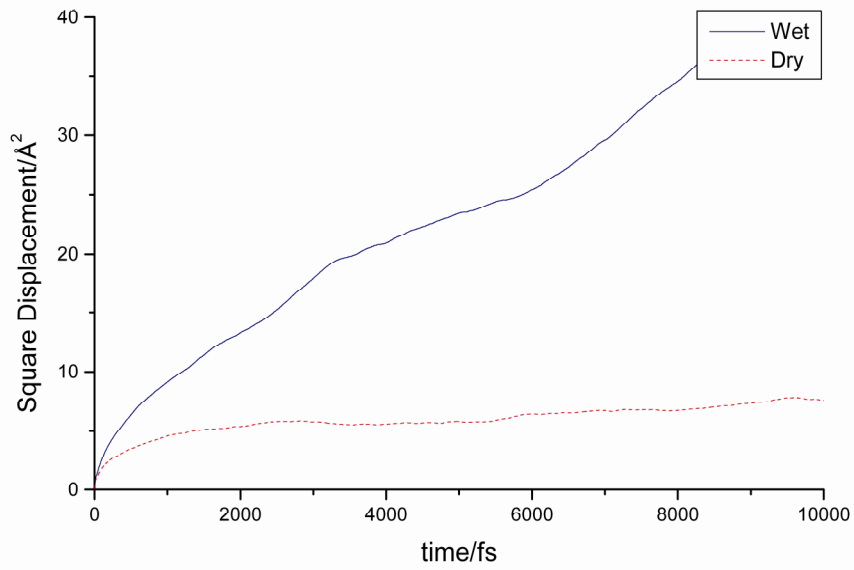


Fig. 2 Comparison of mean square displacement of proton