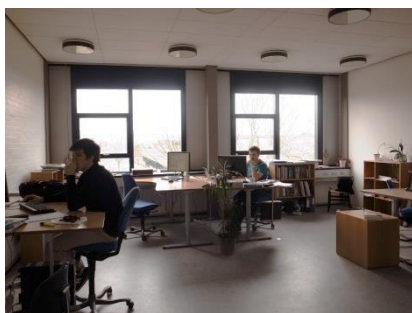


MERIT 長期海外派遣レポート

化学システム工学専攻
博士課程 1 年
渡部絵里子

2014 年 1 月～3 月にかけての 3 ヶ月間、Technical University of Denmark (DTU), Department of Physics の Center for Atomic-scale Materials Design (CAMD) に滞在した。第一原理計算を用いた電極触媒反応の研究で知られる Prof. Jan Rossmeisl の下で、遷移金属酸化物表面における電気二重層に関する理論的研究を取り進めた。

DTU はデンマーク首都のコペンハーゲンから北に 15km 程の Lyngby という町にある北欧随一の大学である。私の滞在した CAMD は高性能なスパコンを用いた第一原理計算による材料探索や理論の開発を行う拠点である。博士課程の学生および研究員から構成され、多様な国籍の人が在籍している。CAMD 内には”Theoretical electrochemistry (J. Rossmeisl), “Shape and functionality of nanoparticles” (J. Schiøtz), “Quantum transport and excitations” (K. S. Thygesen), “Atomic-scale materials design” (K. W. Jacobsen) の 4 つの理論系のグループがある。ご指導頂いた Prof. J. Rossmeisl は燃料電池などの電極触媒の理論計算において顕著な業績を上げており、この分野の第一人者である。4 つのグループは積極的に共同研究するなど垣根なく交流しており、私もグループや立場に関係なく様々な人と互いに刺激しあい、CAMD の合同ミーティングをはじめ、論文紹介やワークショップにも積極的に参加した。



滞在先の居室



滞在中使用したスーパーコンピュータ

<http://www.fysik.dtu.dk/english/Research/CAMD>

研究課題名：遷移金属酸化物表面における電気二重層に関する理論的研究

電極表面の触媒/溶液界面の構造や電位分布は、電極反応に大きな影響を与えていると考えられている。近年、第一原理計算を用いた界面構造や電位分布の研究が進んでおり、実験と計算の双方から触媒/溶液界面の構造・反応を明らかにする試みがされている。本研究は、酸素生成反応などで高い活性を示すことが報告されている RuO₂ 表面について、界面の水の構造の解明を目的としており、特に pH・電圧などの実験条件に対応した計算を目指し

ている。今回の滞在先の supervisor である Prof. J. Rossmeisl は電位・pH の条件に対応する Pt/水界面の構造を理論計算によって初めて報告しており¹、この手法を取り入れることで実験条件に対応する RuO₂ 表面の水の配向を求めることができた。

計算は、DTU で開発がすすめられている GPAW² というソフトウェアを CAMD のスーパーコンピュータ上で使用して、CAMD の研究員と協力して行った。その結果、RuO₂ 上の水の水の配向は酸塩基条件下でまったく異なることを、第一原理計算から初めて求めることができた。この結果は実験結果とも良好な一致を示した。滞在の最後に行われた CAMD のミーティングでの発表においても、活発に議論を交わした。この研究成果は論文として報告する予定である。



CAMD のミーティングにおける発表

なお留学中は DTU キャンパス内の Campus Village (短期滞在用の外国人留学生向け寮)に滞在した。最大 9 人居住可能なコンテナ内は、国籍・研究分野の異なる人々が生活空間を共有する場所でもあり、出身国の文化や教育・政治についても会話を交わした。このような環境に身を置くことで、互いに出身国について客観的に考え直すきっかけとなり、研究以外にも得ることの多い滞在となった。



滞在先の Campus Village

謝辞

このような機会を与えて下さった MERIT に感謝致します。また、滞在の準備段階から様々な手助けをして下さった指導教官の山下先生・牛山先生にも感謝致します。滞在を受け入れて下さった CAMD、また滞在中ご指導いただいた Prof. Jan Rossmeisl に特に謝意を表します。

参考文献

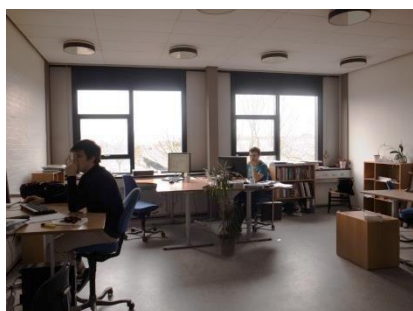
1. J. Rossmeisl, K. Chan, R. Ahmed, V. Tripkovic and M. E. Björketun, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2013, **15**, 10321
2. J. J. Mortensen, L. B. Hansen, and K. W. Jacobsen, *Physical Review B*, 2005, **71**, 035109

Report of MERIT course Long-Term Overseas Dispatch

Department of Chemical System Engineering,
Eriko WATANABE

I stayed Technical University of Denmark (DTU), Department of Physics, Center for Atomic-scale Materials Design (CAMD) from January to March in 2014. During my stay, I studied interface structure of transition metal oxide and water for the purpose of revealing the electronic double layer under the supervision of Prof. Jan Rossmeisl.

DTU is one of the foremost technical Universities in Europe, which is located in Lyngby, 15 km north of Copenhagen. CAMD is the center developing new theories and methods, applying them to atomic-scale systems and designing materials based on first principle calculations using a high-performance supercomputer called Niflheim. It has an enrollment of Ph. D students and researchers of various nationalities and is composed of four theoretical research groups, "Theoretical electrochemistry" (J. Rossmeisl), "Shape and functionality of nanoparticles" (J. Schiøtz), "Quantum transport and excitations" (K. S. Thygesen) and "Atomic-scale materials design" (K. W. Jacobsen). Prof. J. Rossmeisl is a group leader aiming at electrochemical energy conversion and has made remarkable achievements in the research field of first principle calculations of electrochemistry. All four groups often discuss and work together. In such an environment, I communicated with people in CAMD regardless of research groups or positions and attended the joint meeting of CAMD, the workshop with Copenhagen University and Journal club.



Office



Supercomputer in CAMD

<http://www.fysik.dtu.dk/english/Resear>

Research subject : Theoretical study on the electronic double layer of transition metal oxide and water interface

Interface structure of electrocatalysts and water plays important role on electrochemical reaction. Attempts to reveal interface structure and distribution of potentials have been made both

theoretically and experimentally, however they are still challenges because of the complicated system of electrochemistry. Our research interest lies in an interface structure of RuO₂/water as an electrocatalysts for oxygen evolution reaction under typical pH and electrode potential. Prof. J. Rossmeisl has first reported the method to address electrochemical interfaces and applied it to the system of Pt/water interface at a given pH and electrode potential¹. Therefore, we applied this method to the system of RuO₂/water as well.

All the calculations were performed with GPAW Software² developed by DTU, using supercomputer in CAMD and the structure and orientation of RuO₂/water interface can be examined. The results demonstrated that water orientation is different between acid and base conditions. These results are in good agreement with experimental ones. Our study was presented at CAMD meeting and we had a fruitful discussion.



Presentation at the CAMD meeting

During the days, I stayed so called "Campus Village" in DTU campus for the short-term international students. Each "container" has a maximum capacity of nine and students share the living space. We talked about, for example, cultures, educations and politics of our countries. Such an experience gave us a chance to think over about our home countries in an objective way and I spent a fulfilling days of research and mutual communication.



Campus Village

Acknowledgement

I appreciate MERIT program about the financial support for Long-Term Overseas Dispatch. I also appreciate my supervisors Prof. Koichi Yamashita and Prof. Hiroshi Ushiyama about enormous help and encouragement. I would also like to express my gratitude to Prof. J. Rossmeisl for his support and fruitful discussion.

Reference

1. J. Rossmeisl et al, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2013, **15**, 10321
2. J. J. Mortensen, L. B. Hansen , and K. W. Jacobsen, *Physical Review B*, 2005, **71**, 035109