

■ Pt(111)表面の初期条件

- ・分子間相互作用による挙動可
- ・熱運動有 (表面温度 $T = 350$ K※)

※固体高分子形燃料電池の定常動作温度は350 K

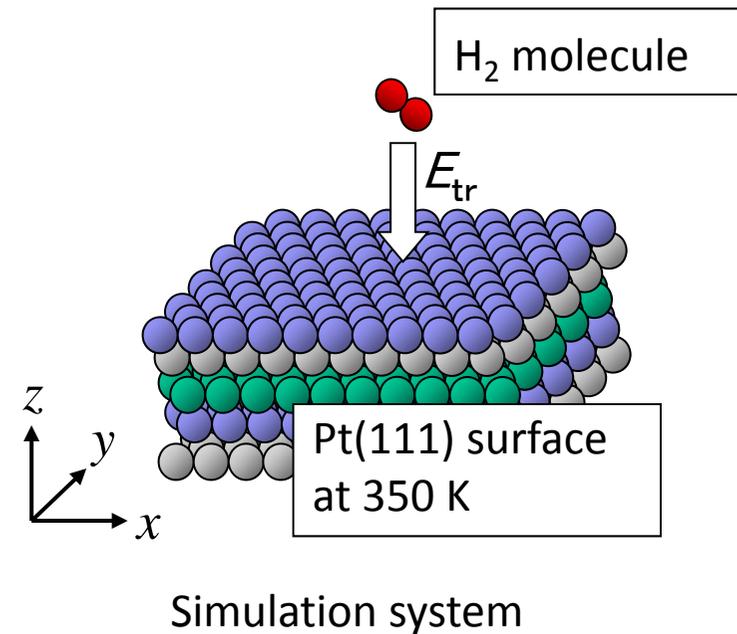
初期配置: 温度制御, 表面緩和を行った状態

■ H₂の初期条件

- ・重心位置(x,y): **brg**, **top**, または**fcc** サイト
- ・重心位置(z), Pt表面から5.0 Å
- ・Pt(111)表面に対する結合軸の位相: ランダム
- ・並進エネルギー, E_{tr} , Pt表面に垂直な下方向

■ シミュレーション

- ・時間刻み: 0.1 fs/step
- ・時間ステップ: $E_{tr} < 0.1$ eV : 40000, $E_{tr} \geq 0.1$ eV : 10000
- ・化学吸着層に到達したことの判定基準: H₂分子に0.6 eV/Å以上の斥力が作用したとき
- ・解離判定基準: H原子間距離が3.5 Åに到達したとき, H₂分子は『解離した』とみなす



Pt表面の表面緩和状態及びH₂分子結合軸の初期位相を毎回変化させて640回シミュレーションを繰り返す, 定常解離確率を求める