

二酸化炭素還元触媒の理論的設計

大阪大学大学院基礎工学研究科 大戸達彦

- 目的 ギ酸生成効率を高めるための触媒設計を調べる
- 内容 ポリエチレングリコールで被覆したSn表面において、二酸化炭素がSn表面までたどり着く経路を計算
- 結果 二酸化炭素吸着能をもつポリエチレングリコールでSn表面を適度に被覆することで、反応物である二酸化炭素の供給を続けながら反応を起こす機構を明らかにした。

ACS Catalysis **11**, 9962 (2021).

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ
並列化

OCTOPUS+SQUID

90000+35000時間
190GB
384並列

