

CO₂電解還元の計算化学による反応機構解析

大阪大学 基礎工学研究科 氏名 神谷 和秀

目的 CO₂電解還元における触媒表面の反応メカニズムを明らかにすることで、新規高機能触媒の設計指針を得る。

内容 電気化学CO₂還元反応において、大気中から基質ガスに混入する可能性の高い酸素分子の触媒表面反応に対する影響を第一原理計算を用いて検討した。

結果 酸素還元中間体の吸着により、COの水素化反応の活性化エネルギーが変化することが明らかになった。

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ
並列化

SQUID

33044時間
240GB
64並列

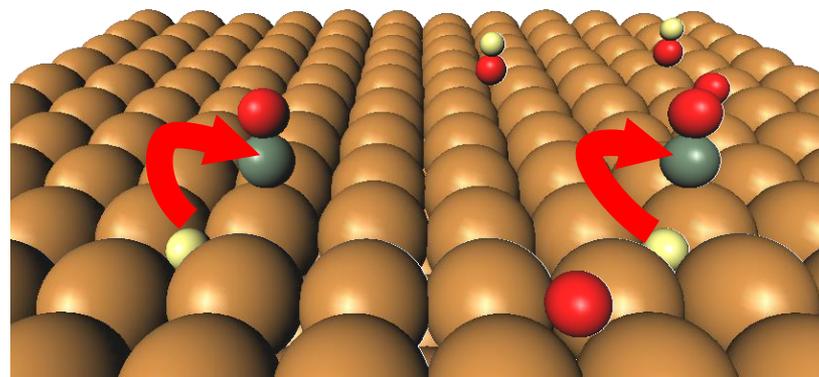


図 Cu(100)上でのCO*水素化反応