

CO₂電解還元におけるC-C結合生成に関する反応機構解析

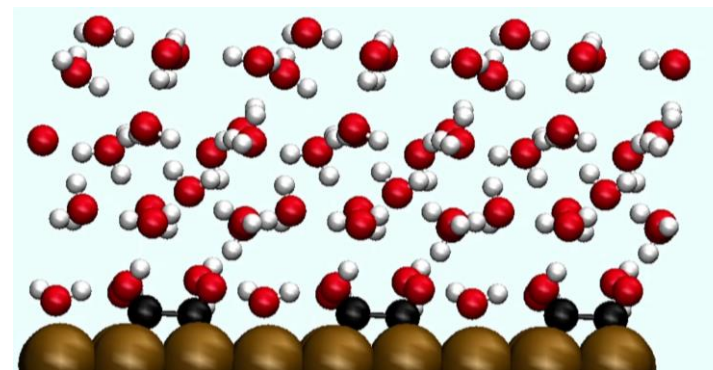
大阪大学 基礎工学研究科 神谷 和秀

目的 CO₂電解還元反応における銅電極上でのC-C結合生成反応のメカニズムを解明する。

内容 CO₂電解による有機物質生成におけるキープロセスであるC-C結合生成反応は銅系触媒のみが高い活性を有する。本課題では第一原子分子動力学を用いて、この銅系触媒のC-C結合生成に関する作動原理の解明を目指した。

結果 金属銅上では中間体COの吸着エネルギーが適度な値を有することで、CO二量化反応とそれに続くプロトン移動反応の活性化エネルギーが小さく抑えられていたことが明らかになった。

| | |
|---------|------------------|
| 利用した計算機 | SQUID 汎用CPUノード群 |
| | ノード時間 130,300 時間 |
| | 使用メモリ 170 GB |
| | 並列化 4ノード 並列 |



CO二量化反応の第一原理分子動力学解析の一例