

Cu(100)面上のO原子がCO水素化反応に与える影響の解析

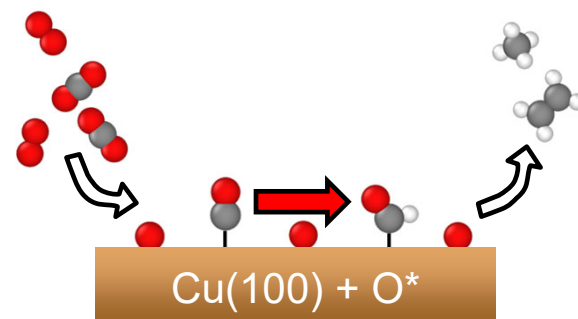
大阪大学 基礎工学研究科 神谷 和秀

目的 CO₂電解還元反応における、基質ガスへのO₂分子の混入が及ぼす影響を第一原理計算を用いて明らかにする。特に、O₂還元の間媒体が吸着した表面において、COの水素化反応がどのような影響を受けるかについて解析する。

内容 CO₂とO₂が共に表面で反応する場合にCO₂電解の選択性が変化することが知られている。本課題ではCI-NEB法を用いて、酸素還元中間体が吸着した表面での活性エネルギーを評価することで反応機構の解明を目指した。

結果 O原子の被覆率が高い場合に表面Cuの電子状態が変化し、CO水素化反応の活性化エネルギーが低下することが示された。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間 157,940 時間
使用メモリ 最大350 GB
並列化 最大18ノード 並列



O原子が吸着したCu(100)面上でのCO水素化反応