

電気二重層を考慮した第一原理計算によるCO₂電極反応の理論解析

株式会社デンソー マテリアル研究部 成瀬淳一

目的 カーボンニュートラルを目指して、CO₂の再資源化が注目されてる。
CO₂とO₂の電極反応メカニズムを理論検証する。

内容 ESM-RISM法を活用して、カーボン電極のフェルミ準位を制御した
状態で、CO₂とO₂の反応をシミュレーションした。

結果 電極のフェルミ準位によって、電極－電解液界面に電気二重層が
変化し、フェルミ準位-3eVにおいて、CO₂とO₂でCarbonate形成を
開始することが分かった。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	15,500 時間
使用メモリ	30 GB
並列化	3ノード 並列

