

銅電極触媒上におけるCO二量化反応の表面配位数依存性の解析

大阪大学 基礎工学研究科 神谷 和秀

目的 CO₂から高付加価値物質(C₂₊化合物)を電気化学的に生成する上で重要な素反応であるCO二量化反応が、銅表面構造に受ける影響を解明する。

内容 CO₂電解還元の際のC₂₊化合物選択性は反応場である銅表面構造に大きく左右される。本課題ではCI-NEB法を用いて、異なる表面配位数(SCN = 9, 8, 7)サイトでのCO二量化反応の活性化エネルギーを評価することで、その表面配位数依存性を評価した。本系は、COの酸素原子が水素結合で安定化されることを考慮し、明示的な水分子を含む系を設計している。

結果 CO二量化後のOCCO中間体は表面配位数が小さいサイト(SCN = 7)よりも大きいサイト(SCN = 9, 8)上で安定化され、その後の中間体還元反応が進行すると示唆された。

利用した計算機

SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間 221570 時間(56500pt)

使用メモリ 最大235GB

並列化 最大9ノード 並列

