

CO₂電解還元反応における電気二重層構造の計算化学的解析

大阪大学 基礎工学研究科 神谷 和秀

- 目的 CO₂の電気化学的還元反応（CO₂電解）における銅電極／液体電解質界面の電気二重層について、反応条件に依存して形成される界面構造を明らかにする。
- 内容 CO₂電解の反応特性は、銅電極／液体電解質界面に形成される電気二重層構造に大きく依存する。本課題では、古典分子動力学計算を用いて、印加電位およびアルカリカチオン種が電気二重層構造に及ぼす影響を評価した。
- 結果 大きな負の印可電位条件下およびイオン半径の大きなアルカリカチオン種を用いた条件で、脱水和したアルカリカチオンがCO₂分子と直接相互作用する頻度が増加することが確認された。これらの知見は、実験的に観測された反応特性を支持する知見である。

利用した計算機

SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間	183200 時間(66000pt)
使用メモリ	最大235GB
並列化	最大12ノード 並列

