

電気二重層を考慮したDFT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

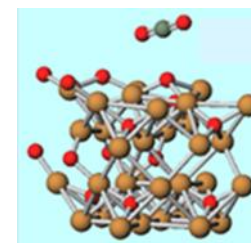
目的 カーボンニュートラルを目指して、CO₂の再資源化が注目されている。
CO₂と金属酸化物の電極反応メカニズムを理論検証する。

内容 ESM-RISM法を活用して、金属酸化物表面のフェルミ準位を制御した
状態において、CO₂の吸着反応をシミュレーションした。

結果 金属酸化物のフェルミ準位によってCO₂の吸着状態に変化がでること、
また金属酸化物の種類によって、吸着が開始する準位が大きく異なる
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	1,000 時間
使用メモリ	30 GB
並列化	4ノード 並列

<-5.6 eV>



<-5.1 eV>

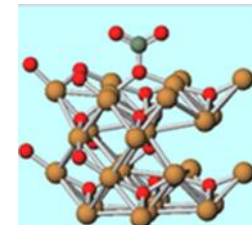


図 金属酸化物への吸着状態の
フェルミ順位依存性