

日本—インドネシア・タイ 国際共同研究「材料分野（マテリアルズ・インフォマティクス）」 2023 年度 年次報告書	
研究課題名（和文）	マルチスケールシミュレーションによる二酸化炭素リサイクル反応過程の解明とデザイン
研究課題名（英文）	Multi-scale Simulations and Design for CO ₂ recycling related processes
日本側研究代表者氏名	森川 良忠
所属・役職	大阪大学大学院工学研究科・教授
研究期間	2022 年 4 月 1 日 ～ 2025 年 3 月 31 日

1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
森川 良忠	大阪大学・大学院工学研究科・教授	研究総括
濱田幾太郎	大阪大学・大学院工学研究科・准教授	電極反応の理論的研究
濱本雄治	大阪大学・大学院工学研究科・助教	電極反応の理論的研究

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

今年度は国際共同研究を立ち上げると共に、日本側研究チームは以下の目標を設定した。2023 年度も引き続き、インドネシア、タイのチームと連携して、CO₂ の水素化および電気化学的還元反応に関して研究を進めた。密度汎関数理論(DFT)計算と機械学習法による原子間ポテンシャルを構築し、Cu 表面への CO 分子吸着について大規模で高精度な長時間分子動力学シミュレーションを実施し、Cu クラスタ形成の原子レベルでの過程や水素分子の吸着確率の表面構造依存性を明らかにすることを主要な目標とする。このシミュレーションに成功したならば、化学反応系への展開を行う。

3. 日本側研究チームの実施概要

本研研究プロジェクトでは、大阪大学、チュラロンコン大学、およびバンドン工科大学の3つのチームが連携して、CO₂を有用な燃料に還元・水素化し、リサイクルするために重要な触媒反応の解明と制御を目指している。

2023年度は主として、チュラロンコン大学のグループとは、Ag触媒におけるCO₂から炭素が生じる反応に関して、実験と理論の両面から連携して研究を進めている。チュラロンコン大学のJoongjai Panpranot教授らのグループで発見された、CO₂から大量のカーボン、特に微結晶のダイヤモンドが生成する反応機構を解明することを当面の目的として、密度汎関数理論(DFT)を用いた研究を2022年度に引き続き研究してきた。2023年度もJoongjai教授のグループと2週間に一度のペースでオンラインディスカッションのミーティングを行ってきた。徐々にその原子論的な過程を解明する緒がつかめつつある。反応系には、Ag金属電極、イオン液体、Agクラスター、グラフェン量子ドットなどが関与し、極めて複雑な系であるが、実験グループとの緊密な議論に基づき、Ag金属電極とイオン液体、グラフェン量子ドットが存在すれば、電気化学的な反応を経なくともグラフェンが成長することが明らかになりつつあり、それに基づく反応解析に注力してきた。最近、Agがグラフェンに担持された触媒では炭素が生じる反応が効率的に起こる可能性が見出され、さらに実験と理論でこの反応について詳細を研究している。

もう一つの重要なテーマとして、バンドン工科大学とともに、CO₂の水素化反応について研究を進めている。第一原理電子状態計算と機械学習法を組み合わせることにより、化学反応を記述することができる精度の良い原子間力ポテンシャルを作成し、Cu表面上でのCO₂の水素化反応過程について研究を進めている。2023年度は、Cu表面上でのCOや水素の吸着挙動について研究を行った。その結果、分子吸着によって表面構造が大きく変化することがシミュレーションで示すことができた。さらに、反応確率についても精度良く見積もることが可能になってきている。さらにこの妥当性について系統的に調査を進めてメタノール合成触媒の反応機構を解明するとともに、さらに望ましい触媒を開発する指針を与えることを目指す。