

## DFT 計算による Si 結晶表面上の CO<sub>2</sub> 水素化反応機構の解析

(早大創造理工)○井上岳紀・山口勉功・国吉ニルソン

A DFT study on heterogeneous hydrogenation of CO<sub>2</sub> over surfaces of silicon crystals  
(Sch. Creative Sci. Eng., Waseda University)

○Takanori Inoue, Katsunori Yamaguchi, Nilson Kunioshi

キーワード：CCU、量子化学計算、分子動力学

Recently, carbon recycle technologies such as CCU and DAC are receiving attention. To convert CO<sub>2</sub> to carbon resources quickly and on a large scale, high performance catalysts are needed. Hydrogenation of CO<sub>2</sub> is a promising technology, and catalysts for its realization are under development. However, there are issues that prevent the use such catalysts, such as high cost, risks related to supply of their raw materials or difficult manufacture. We selected Si particles, obtained from disposed Si wafers or EOL-PV panels, as the raw materials for CO<sub>2</sub> hydrogenation catalysts not only because they are low cost but also as an effort for recycling industrial waste. In this research, we studied the feasibility of silicon crystals as catalysts for hydrogenation reactions of CO<sub>2</sub> via simulation using DFT calculations. Si(100), Si(110), and Si(111) surfaces were modeled using clusters of silicon atoms, and the reactions involving CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> over the surfaces were analyzed. As a result, plausible mechanisms that lead to the formation of HCOOH or CO are proposed.

近年、CCU や DAC などのカーボンリサイクル技術が注目されている。これらの実用化には様々な課題があるが、特に CO<sub>2</sub> の変換工程においては、反応性の低い CO<sub>2</sub> を低エネルギー・低コストで大量に素早く処理できる優れた触媒が必要となる。現在、CO<sub>2</sub> の変換能力の高い水素化技術に対する優れた触媒が開発されているが、高価で資源リスクの高い材料を利用していたり、製造に手間がかかるものが多い。そこで我々は今回、触媒の低コスト化に加えて環境負荷低減の観点からシリコンウェーハの掘削屑やソーラーパネル廃棄物由来の Si パーティクルを CO<sub>2</sub> の水素化触媒として利用することを考え、シミュレーションによってその性能を評価した。具体的には、クラスターによってモデル化した Si 結晶表面に対する CO<sub>2</sub> 水素化の反応機構を DFT 計算によって解析した。その結果、CO<sub>2</sub> の水素化が進行する可能性の高い反応経路として HCOOH または CO が生成するものを確認した。

