

2 核 Cu 分子触媒の CO₂ 電解還元による C₃H₇OH 生成

(豊田中研)○坂本 直柔・関澤 佳太・白井 聡一・野中 敬正・荒井 健男・佐藤 俊介・森川 健志

C₃ product formation by electrochemical CO₂ reduction for dinuclear Cu molecular catalyst. (Toyota Central R&D Labs., Inc.) ○Naonari Sakamoto, Keita Sekizawa, Soichi Shirai, Takamasa Nonaka, Takeo Arai, Shunsuke Sato, and Takeshi Morikawa,

The propanol (C₃H₇OH) with high energy density and high market price as a CO₂ reduction product is one of the desired compounds when practicality is considered. To produce propanol, which requires three molecules of CO₂ and 18 electrons, a new molecular design strategy must be considered, different from the conventional molecular catalysts for two-electron reduction products (CO, HCOOH) formation. Herein, we demonstrated that a new Cu molecular catalyst can exhibit both CO₂ adsorption/retention and intermediate retention properties, enabling the production of C₃H₇OH beyond C₂ products. Detailed *operando* analyses also revealed high robustness during the reaction, which has been a problem with conventional Cu molecular catalysts. New molecular design guidelines are provided as one of the basic structures of molecular catalysts for the synthesis of CO₂ reduction products that require C-C coupling.

Keywords: CO₂ reduction, Molecular catalyst, C₃ products, CO₂ adsorption, *operando* analysis

CO₂還元生成物として高エネルギー密度、高い市場価格のプロパノールは実用性を考慮する際に望まれる化合物の一つである。3分子のCO₂と18電子を必要とするプロパノール生成のためには、従来の2電子還元物(CO, HCOOH)生成分子触媒とは異なる、新たな戦略による分子設計が求められる。

本発表では、CO₂の吸着・保持能力と反応中間体の保持能力を兼ね備えた新規Cu₂核分子触媒による水溶液中CO₂電解還元反応におけるプロパノール生成実証を示す。*Operando* X線吸収分光法から、従来のCu分子触媒の問題点であった反応中の高い堅牢性も兼ね備えていることが明らかとなった。また、電極上の分子触媒の分析は局在表面プラズモン共鳴を利用した*operando*分光分析を用い、DFT計算と組み合わせることで主要な反応中間体の検出・同定、プロパノール生成反応機構解明に向けた検討を行った。C-Cカップリングを必要とするCO₂還元生成物合成のための分子触媒の基本構造の1つとして新たな指針を与えるものである。