

シリコン表面における CO₂ 還元反応の理論的解析及びその実験的検証

(早大院理工) ○幸田 怜・山口 勉功・国吉 ニルソン

Theoretical analysis and experimental verification of CO₂ reduction reaction over silicon surfaces (*Sch. Sci. Eng., Waseda University*) ○Rei Kouda, Katsunori Yamaguchi, Nilson Kuniوشي

CO₂ is one of the greenhouse gases and is considered a cause of global warming. To control global warming, technologies to reduce CO₂ and convert it into a resource are attracting attention. Today, catalysts for CO₂ reduction are being explored, but there are cost issues, such as the use of noble metals. Therefore, we focused on high purity silicon, which is generated from single-crystal silicon production and waste solar panels, as a new catalyst. To evaluate the catalytic performance of silicon, we analyzed the CO₂ reduction reaction on clean Si(100) surfaces and oxidized silicon surfaces using Gaussian16. As a result, it was confirmed that H₂ reacts with CO₂ to produce CO and HCOOH. In addition, experiments were conducted in which CO₂ and H₂ were poured onto actual Si(100) wafers and silicon sludge in an electric furnace to verify the reactions confirmed by quantum chemical calculations.

Keywords : *Quantum chemical calculation; carbon recycle; reaction dynamics*

CO₂は温室効果ガスの一つであり、地球温暖化の原因とされている。地球温暖化の対策として CO₂ を還元し、資源化する技術が注目を集めている。現在 CO₂ 還元のための触媒探索が盛んになされているが、貴金属を使用するなどのコスト面の問題がある。そこで、我々は新たな触媒の材料として単結晶シリコンの製造時や廃太陽光パネルなどから排出される高純度 Si に着目した。

シリコンの触媒性能を評価するため、Gaussian16 を用いて清浄 Si(100)面や酸化されたシリコン表面において CO₂ の還元反応の解析を行った。その結果、H₂ と CO₂ が反応し、CO や HCOOH が生成することが確認された。また、電気炉において実際の Si(100)ウェハー、シリコンスラッジに CO₂, H₂ を流す実験を実施し、量子化学計算で確認された反応の検証を試みた。

