

行政院原子能委員會
委託研究計畫研究報告

【太陽能及乙醇／氫氣轉換之量子化學計算模擬及實驗驗證】
【Quantum Simulations of Solar Energy and Ethanol to Hydrogen
Conversion Processes with Experimental Validations】

計畫編號：962001 INER 0028

受委託機關(構)：國立交通大學

計畫主持人：林明璋

核研所參與人員：謝宏明

聯絡電話：(03)5731696

E-mail address：chemmcl@emory.edu

報告日期：96年11月23日

中文摘要

本計畫是為期四年行政院原子能委員會委託研究計畫之第三年執行結果摘要。這一年主要的工作在繼續進行以下兩個目標：1. 利用大型電腦計算解釋 InN/TiO₂ 太陽能電池的製作機制及 InN 與 TiO₂ 之間利用量子點及有效的化學鍵製作方法。2. 理論與實驗驗證 L. D. Schmidt 的 Rh/CeO₂ 乙醇轉換氫氣催化劑的性能，並進而研究發現新而便宜的催化劑。

在乙醇轉換氫的實驗上，今年實驗結果發現，Ru/CeO₂/Al₂O₃ 催化分解乙醇與水的混合物目前已得到 120% 的轉換率，Ru 金屬比 Rh 較便宜 25 倍；另外，研究 CeO₂ 與 ZrO₂ 混合氧化物的實驗已在進行中。

大型量子計算可分為三方面，1. 乙醇轉氫在不同催化劑表面反應基制的研究。2. 量子點在 TiO₂ 表面吸附的能量與結構。3. 發展 SCC-DFTB 將應用於乙醇轉氫及量子點/TiO₂ 方面大型計算的元素參數。

在乙醇轉氫方面的計算，今年主要在了解水氣轉氫 (CO+H₂O → CO₂ +H₂) 在 Rh/CeO₂ 上的反應機制及能量。也進行乙醇在 Rh/CeO₂/ZrO₂ 催化劑上的吸附及分解，同時，CuO/Al₂O₃ 對乙醇轉氫的可行性也在計算中。

在量子點/TiO₂ 系統的計算，今年著重於(InN)_x/OY(O)O/TiO₂ (Y=B and P)及(Si)_x 量子點兩系統的研究，不同量子點的大小影響 TiO₂ 帶隙的計算，已供給良好的結果。

在 SCC-DFTB 程式的發展，目前也有很好的進展，這個程式的完成，將可供給本計算團隊用 VASP 及 CASTEP 以外作大型分子群

的計算，諸如 $\text{Ru}_x/\text{CeO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 催化系統應用於乙醇轉氫的反應機制，將可用此程式研究並得反應速度常數。

除了上述的計算外， H_2S 、 H_2O_2 及 H_3BO_3 在 TiO_2 表面反應的計算已完成；類似計算研究以 H_3PO_3 作 InN 及 TiO_2 中間的 linker 已在進行中，此系列的反應，與 InN 、 InO_x 及 InS_x 的沉積亦有直接關係。