

研究テーマ 原子レベル触媒反応解明

大阪大学 工学研究科 魏久焱、安達有輝、李艶君

研究目的

密度汎関数理論を用いて触媒表面であるルチル型TiO₂(110)表面とSi(111)-7x7表面の電荷密度と構造最適化の計算を行うこと。

研究内容の概要

- ① 密度汎関数理論の基礎を学ぶ。
- ② 密度汎関数理論を用いてルチル型TiO₂(110)表面やSi(111)-7x7表面の最適化構造を計算する。

結果および結果図

Octopusで利用可能なQuantum espressoを実行し、密度汎関数理論の基礎を学ぶことに成功した。特に、水素原子(分子)の局所状態密度、電荷密度などの計算を通して、量子化学の基礎を学ぶことができた(図1)。さらに、ルチル型TiO₂(110)表面とSi(111)-7x7表面の構造最適化計算や電荷密度の計算に成功した(図2と図3)。

利用した計算機：Octopus

Node 1
並列化 16
時間 およそ300時間

図1 水素原子の状態密度と対応する波動関数の計算結果

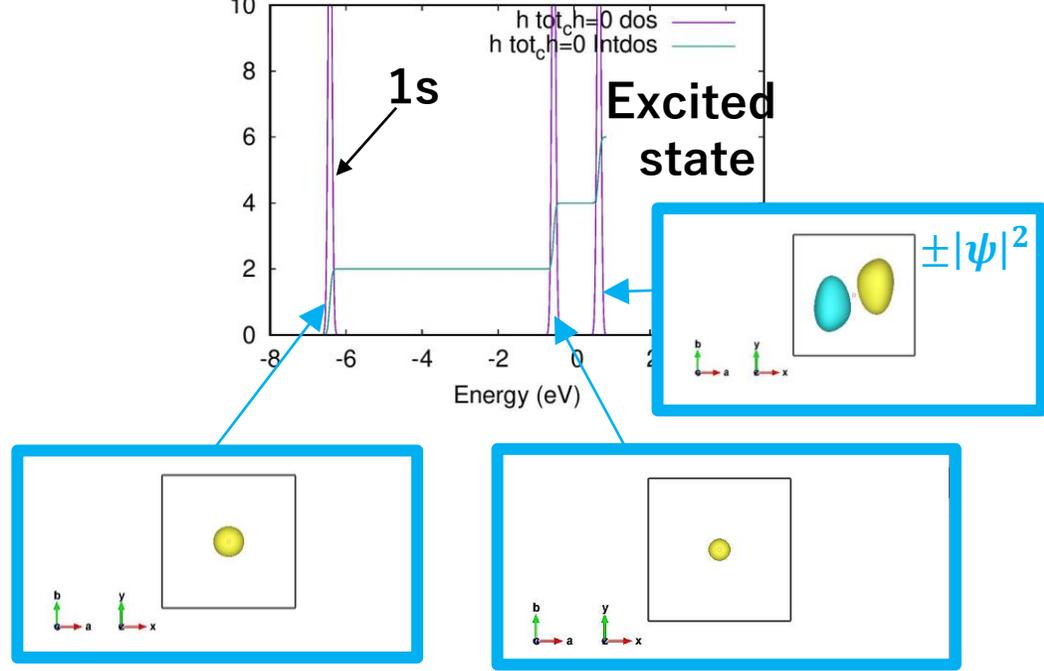


図2 Si(111)-7x7表面の構造最適化の計算結果

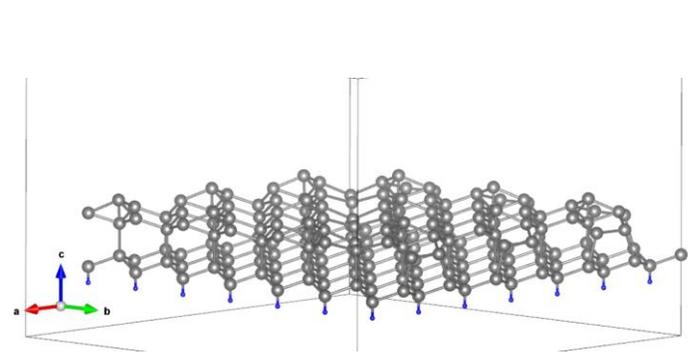


図3 ルチル型TiO₂(110)表面の電荷密度の計算結果

