

触媒における水素の移動と反応のシミュレーション

- Theoretical calculations of catalytic H atom migration and reaction-

東京大学 生産技術研究所 加藤 弘一

- Univ. Tokyo, Institute of Industrial Science Koichi kato -

目的：水などが触媒（TiO₂）の働きによってどのように分解し、その後どのような反応過程をするか明らかにする。

内容：触媒によって生成される水素の拡散挙動、水素ガス生成などの過程を逐次明らかにしてきた。

結果：水から分解して水素はTiO₂上でポーラロンを生成し、実効的に結合エネルギーが小さくなり、これが水素の移動やガス生成に大きく寄与することが分かった。

利用した計算機	SQUID汎用CPUノード群
	ノード時間 4000時間
	使用メモリ 20GB
	並列化 2ノード並列