

触媒における欠陥の移動と光吸収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：酸素欠損の触媒表面からの内部への拡散挙動を探り、触媒の光子吸収の可能性と影響を調べる。

結果：酸素欠損はTiO₂触媒表面から内部方向に拡散し、内部において凝集し易いことが分かった。酸素欠損は触媒内部で安定とあり、2光子吸収に寄与すると分かった。

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