

通電下における酸素欠陥を有する金属酸化物の 表面状態の変化に関する理論的研究

北海道大学触媒科学研究所 飯田 健二

- 目的 電力を利用する触媒反応について注目が集まっている。しかし、通電状態に関する理論計算研究はこれまで進んでこなかった。そこで、 TiO_2 表面の通電による電子構造変化を明らかにするべく研究を行った。
- 内容 電子ダイナミクス計算プログラムSALMONを用いて、酸素欠陥を有する TiO_2 表面にH原子が吸着した系の通電状態をシミュレーションした。
- 結果 電子占有数の通電による時間変化を解析した。その結果、Hが TiO_2 表面に吸着すると、通電によって電子構造がより大きく変化することが明らかになった。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間 4612 時間
並列化 8ノード 並列

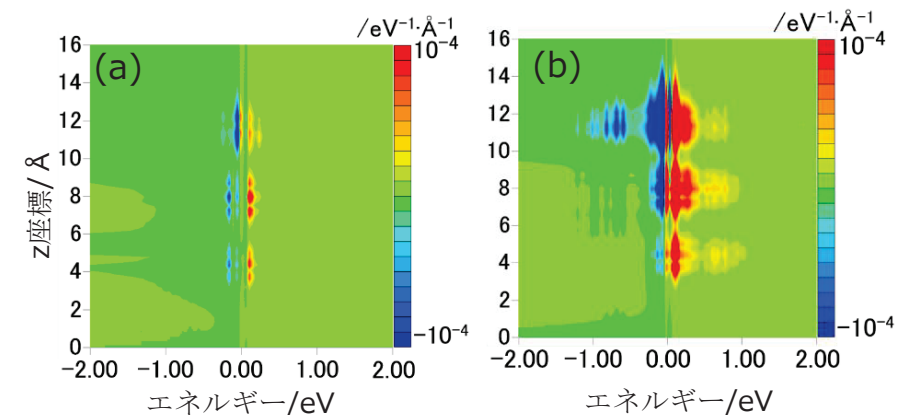


図 酸素欠陥を有する TiO_2 表面について(a)H無しと(b)H有りの系における電子占有数の通電による変化