

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を明らかにする。

内容：酸素欠損での光吸収の光入射方向依存性と内部への拡散して凝集し易い酸素欠損が連続した場合の光吸収効率を探る。

結果：酸素欠損での光吸収の光入射方向依存性は比較的小さい。また、凝集した酸素欠損が連続すると、波動関数の対称性から光吸収効果が次第に下がってしまうことが分かってきた。

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