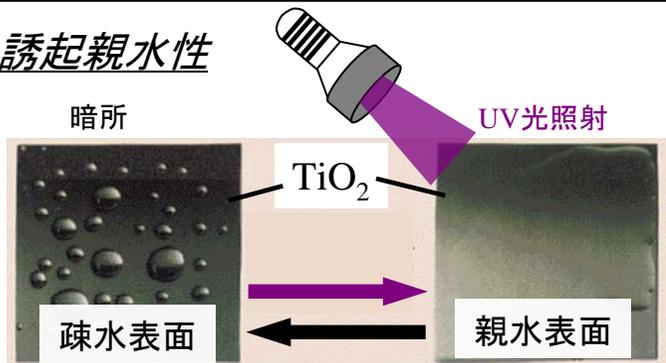


第一原理荷電表面計算法によるTiO₂表面の光誘起親水性メカニズム解析

豊田中央研究所 梶田晴司

光誘起親水性



R. Wang et al., Nature 388 (1997) 431.

[既存の光誘起親水性メカニズム]

- ① 光生成Holeによる**正荷電**
- ② **水と反応、OH基増加**

➡ 親水性

第一原理計算
検証・解析

電極反応

高効率
光誘起新水性

摩擦材料

光・電圧による
表面物性制御

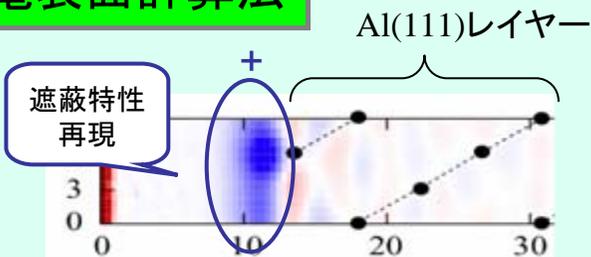
並列化・高速スパコン
水分子集団&時間発展計算

☆研究目的

- ① 新手法開発: **正荷電表面**の第一原理計算法
- ② メカニズムの検証: 正荷電による**水分子反応**

① 新規荷電表面計算法

- ◇ 荷電表面を高精度シミュレート
- ◇ 容易に第一原理プログラム適用可能



② 正荷電による水分子の吸着反応

- ◇ 正荷電によるOH基増加モデルの検証

吸着エネルギー不安定 →

OH基増加モデル実現しない

- ◇ **新規メカニズムの提唱**

H₃O⁺生成反応

H₃O⁺核による
水の吸着構造変化

