

# 二層グラフェン上へのガス吸着に関する研究

東京工業大学理学院 藤本義隆

**目的** 二層グラフェンへの環境汚染ガス吸着に関する安定構造と電子特性を明らかにすること。

**内容** 第一原理密度汎関数理論に基づき、二層グラフェンへのガス吸着のエネルギー論やエネルギーバンド構造を計算した。

**結果** 一酸化窒素分子や二酸化窒素分子が二層グラフェン上に吸着することが分かった。また、これらの分子が吸着することにより、電荷の移動が起こることも分かった。

利用計算機	SX-ACE
ノード時間	120時間
使用メモリ	20GB
ベクトル化率	89%

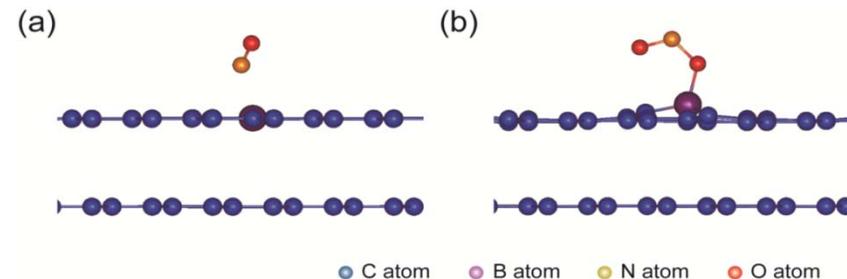


図 ガス吸着後の安定構造。(a)一酸化窒素分子、(b)二酸化窒素分子。