

グラフェンの環境汚染ガス吸着効果

東京工業大学理学院 藤本義隆

目的 グラフェンへの環境汚染ガス吸着に関して、吸着エネルギーや電子特性を明らかにすること。

内容 第一原理密度汎関数計算により、グラフェンへのガス吸着に関する安定性や電子状態を求めた。

結果 窒素酸化物分子がグラフェン両面に吸着することが分かった。また、吸着分子の種類や数に依存し、仕事関数など電子特性が変化することも分かった。

利用計算機	SX-ACE
ノード時間	120時間
使用メモリ	20GB
並列化	ノード内並列 (4-core)

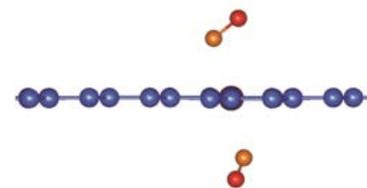


図 ガス吸着後の安定構造。