

# グラフェン上のガス吸着と電子輸送

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、吸着エネルギーと電子輸送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輸送特性を求めた。

**結果** 窒素酸化物分子がグラフェンに強く吸着することが分かった。また、吸着分子の種類に依存し、電子伝導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	200GB
並列化	ノード間4並列

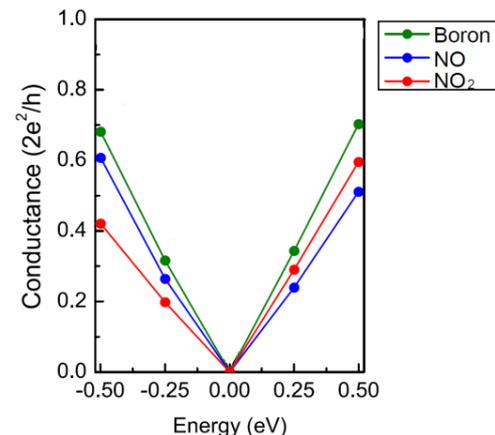


図 ガス吸着と電子伝導特性