

# Ag-In-Yb準結晶 5 回軸表面におけるペンタセンの 安定吸着サイトに関する第一原理計算

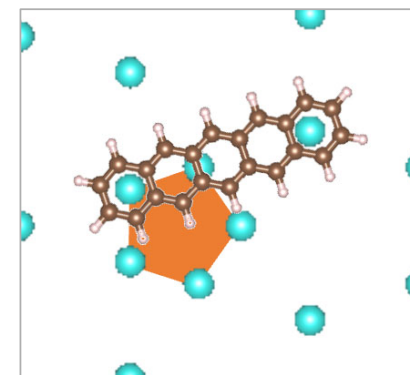
鹿児島大学大学院 理工学研究科 総合理工学専攻 佐藤壮紀

**目的** Tsai型準結晶に特有なacute rhombohedron (AR)が密集した構造の重要性を明らかにすることを目的とした。

**内容** Tsai型Ag-In-Yb準結晶5回軸表面へのペンタセン(Pn)吸着について、密度汎関数理論による第一原理計算を用いて調査した。表面上の様々なサイトにおいてPnの吸着エネルギーを求め、安定性を評価した。

**結果** Tsai型Ag-In-Yb準結晶5回軸表面上のARが密集したサイトにおいてPnが高い安定性を示すことが分かった。

利用した計算機 SQUID  
利用資源 2000 SQUIDポイント



AR密集サイト上に配置されたPn