

Tsai型Ag-In-Yb準結晶表面に吸着したペンタセンの反応性に関する第一原理計算を用いた検証

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Ag-In-Yb準結晶表面に吸着したペンタセン(Pn)分子の反応性を明らかにすることを目指した。

内容 反応性の調査を行うための準備段階として、表面の詳細な吸着構造を第一原理計算を用いて調査したのち、当該吸着表面の差電荷密度等の反応性検証のための計算を行った。

結果 現時点でまでに準結晶表面に特有な傾向等は見いだせていない。詳細を明らかにするためには今後も調査が必要である。

利用した計算機 SQUID
利用資源 1000 SQUIDポイント