

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旨とした。

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