

# 計算機シミュレーションによる 表面・界面物性の解明



キーワード 電子状態計算、二次元物質、グラフェン

濱本 雄治 HAMAMOTO Yuji

物理学系専攻 助教

精密工学講座 計算物理領域 森川研究室



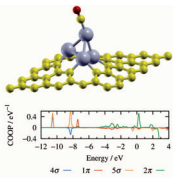
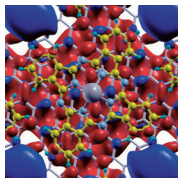
ここがポイント!【研究内容】

【有機分子修飾したグラフェンの表面状態の理論的解析】

- グラフェンの鏡像状態に対する鉛フタロシアニン吸着の影響
- 鉛フタロシアニンの非占有状態との混成により鏡像状態の有効質量が増加する現象を解明

【グラフェン担持白金クラスター触媒の理論的解析】

- 空孔に担持した白金クラスターの安定構造を決定
- 空孔の拡大とともに白金クラスターへの一酸化炭素吸着が抑制され、触媒活性の向上に寄与することを解明



応用分野

有機太陽電池、燃料電池触媒、自動車排ガス触媒

論文・解説等

- [1] Y. Hamamoto *et al.*, *J. Phys. Chem. C* 126, 10855 (2022).
- [2] H. Koshida *et al.*, *J. Phys. Chem. C* 124, 17696 (2020).
- [3] Y. Hamamoto *et al.*, *Phys. Rev. B* 102 075408 (2020).

連絡先 URL

<http://www-cp.prec.eng.osaka-u.ac.jp>

