

令和5年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

銅表面に吸着したフォルメート種の電子状態計算
Electronic-state calculations of formate adsorbed on Cu surfaces

京都大学大学院 理学研究科 化学専攻 分子分光学研究室 小坂谷 貴典

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、銅表面に吸着したフォルメート種の吸着構造および分子振動モードに関して密度汎関数法による第一原理計算を実施した。その結果、超構造中のフォルメートの分子密度と、フォルメート振動モードのエネルギーに相関があることが分かり、実験で測定した赤外振動モードと併せて銅表面上のフォルメートの吸着状態に関して新たな知見が得られた。

一連の計算結果をもとにして、今後論文を執筆して学術誌に投稿する予定である。