

演題：「HB シート上における吸着と反応の第一原理計算による研究」

「First-Principles Study of Adsorption and Reaction on the Hydrogen Boride Sheet」

概要：ホウ化水素（HB）シートはホウ素と水素が 1:1 の比で構成された二次元材料の一つであり、水素貯蔵材料としてだけでなく、様々な興味深い物理化学的性質を示すために注目を集めている。本講演では HB の物性を概観し、密度汎関数理論計算に基づいた HB シートと水の間相互作用に関する結果を中心に最近の我々の研究結果を中心に紹介する。