

# 「フロンティア機能性物質創製センター」 オープンセミナーのご案内

連絡先 阿部 正明・田原圭志郎 (物質理学研究科)

TEL: 0791-58-0155 E-mail: mabe@sci.u-hyogo.ac.jp

taharak@sci.u-hyogo.ac.jp

「フロンティア機能性物質創製センター」では、オープンセミナーを開催しております。第26回は、理論化学がご専門の徳永健先生(工学院大学 教育推進機構)にご講演をお願いしました。多くの方々のご来聴をお待ちしています。

## 兵庫県立大学「フロンティア機能性物質創製センター」 オープンセミナー(第26回)

**講師：徳永 健 准教授**

(工学院大学 教育推進機構)

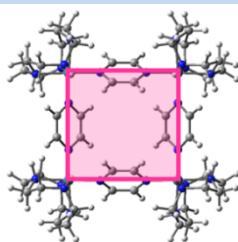
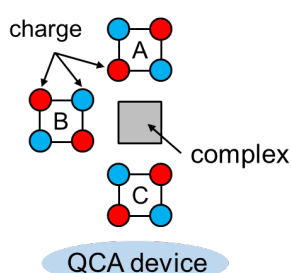
### 題目 混合原子価錯体を用いた量子ドットセルオートマトン：錯体の構造とデバイス動作の関係

概要：量子ドットセルオートマトン(QCA)は、分子内電荷移動による電子状態のスイッチを利用して演算を行う分子デバイスである。その正常な動作には、外部入力電荷に対する素早く十分な分子内電荷移動が必要なため、混合原子価錯体が有力な候補となる。我々はQCAの実現を目指し、様々な混合原子価錯体を用いたQCAの動作を理論的に検証してきた。本講演では、QCAにおける電荷移動速度と移動量のシミュレーション方法を紹介する。また、フェロセン部位やRu原子を有する混合原子価錯体の電子的・幾何学的構造とQCAの動作の関連性について解説する。

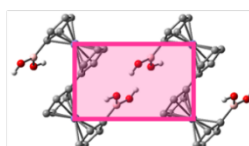
**日時：2017年6月5日(月曜日)**

**15:00 ~ 16:00**

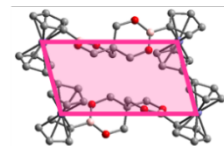
**場所：兵庫県立大学理学部(738号室)**



square



rectangle



parallelogram