

大学院集中講義

講義名 物理学特別講義 I (1 単位)
授業番号 理学研究科 博士前期 : R0215 博士後期 : R0216
理工学研究科 博士前期 : R215 博士後期 : R216
題目 原子層物質の固体物理と第一原理計算入門
講師 齋藤 理一郎 氏 (東北大学)

日時 場所 12 月 11 日 (水) 2-5 限 : 8 号館 304 室
12 月 12 日 (木) 1-4 限 : 8 号館 301 室

概要 グラフェンや遷移金属カルコゲナイド物質などの 2 次元物質をまとめて原子層物質と呼びます。原子層物質を理解するために必要な固体物性 (グラフェンなどの電子状態、ラマン分光) などを直接計算できることを目指すために、基礎となる原理を紹介します。また、Quantum Espresso と呼ばれるエネルギーバンドの第一原理計算を、各自のパソコンにインストールして、グラフェンや原子層物質の電子状態やラマンスペクトルなどを、講義の時間に実際に計算します。前提となる知識は必要ありませんが、インターネットに接続されたノートパソコンが必要です。また、ライセンスが許せば、Gaussian による分子軌道計算法も実習で学びます。

講義の目標は (1) 原子層物質の性質を式で理解でき、説明できること。(2) 第一原理計算を使うことができるようになり、インターネットを利用しているような物質の電子状態や物性量を計算できるようになることです。単位は、レポートをパワーポイントでまとめる課題を提出することで評価します。

参考書 : 1. 『フラーレン・ナノチューブ・グラフェンの世界』 齋藤理一郎 共立出版
2. 『基礎固体物性』 齋藤 理一郎 朝倉書店

講義計画・内容 :

- 第 1 回 原子層物質の紹介と電子状態の計算
- 第 2 回 平面波を用いた電子状態計算の原理
- 第 3 回 Quantum Espresso の計算 (1) (エネルギーバンド、状態密度)
- 第 4 回 Quantum Espresso の計算 (2) (光吸収スペクトル、ラマンスペクトル)
- 第 5 回 分子軌道の計算の原理と計算手法
- 第 6 回 Gaussian を用いた分子軌道計算の紹介 (1) (使えない場合には別項目)
- 第 7 回 第一原理計算のより専門的な利用方法
- 第 8 回 円偏光を用いた原子層物質の光物性の最近の研究の紹介

履修申請〆切り : 12 月 4 日 (水)

問い合わせ先 : 物理学専攻 宮田 耕充 (内線 3357) ymiyata@tmu.ac.jp