

科目名(和)		科目名(英)				
物質科学特論I		Materials Science Special I				
科目区分	単位数	選択・必修	授業形態	授業番号	開講時期	講義室
専門科目	1	選択	講義	332110	秋学期開講(詳細は後日発表する。)	大講義室

1. 科目の概要

<p>【担当教員】 水谷 五郎、立川 仁典</p> <p>【教育目的/授業目標】 この講義では、レーザーを用いた二次の非線形光学的手法、すなわち光第二高調波法および光和周波発生法で、反転対称性を持たない構造をもつ材料の電子状態、振動状態を探る方法の理論的基礎、実験的手法から応用までを最新のトピックスを交えて学習する。また、ここ10年ほどで劇的な進歩を遂げた、分子軌道理論の深化と多様化、低スケーリングの計算アルゴリズムの開発、ならびに動力学的要素の導入などについて、理論的背景と具体的な応用例をまじえ、量子化学の基礎理論から、化学反応解析への応用</p> <p>【指導方針】 二次の非線形光学効果の機構およびそれがもつ反転対称性に関する選択則を丁寧に導出し、それが応用例においてどのように現れるかを具体的に解説する。非線形光学については、軽い演習を課して理解の助けとする。量子化学計算については基礎と応用例を</p>
--

2. 授業計画等

	【テーマ】	【内容】
1回	非線形光学の理論	非線形分極の強制振動項を含むマックスウェルの波動方程式を導出し、その解の求め方を学ぶ。また表面や界面が存在する場合の境界条件の導入のしかたも学習する。
2回	表面界面電子状態の光第二高調波(SHG)分光	光触媒酸化チタンを例にとり、光第二高調波強度の試料回転角依存性と入射エネルギー依存性のもつ情報をのべ、それらを用いた分光法について述べる。
3回	光第二高調波(SHG)顕微鏡とその応用	光第二高調波強度の位置依存性、すなわち光第二高調波顕微像の計測原理と応用例を紹介し、顕微法によって新たに得られる非線形光学過程の与える情報を述べる。
4回	光和周波(SFG)分光法・顕微鏡とその応用	振動共鳴光和周波(SFG)現象はSHGと同じ二次の非線形光学効果で同様な対称性の選択則を持つが、振動共鳴という新たな情報を併せ持つ。この現象を用いた分光法・顕微鏡の
5回	量子化学の基礎 I	量子力学の基礎(数学的準備、不確定性原理、水素原子)、多電子原子(変分原理、Undi
6回	量子化学の基礎 II	分子軌道法(断熱近似、一電子近似、基底関数展開、電子相関、密度汎関数法)
7回	量子化学計算による化学反応解析	化学反応理論(分子振動理論の基礎、ポテンシャルエネルギー超曲面、核の運動)
8回	量子化学計算による化学反応解析 II	量子水素理論(トンネル効果、低障壁水素結合、経路積分シミュレーション)
<p>【テキスト】 特になし。必要に応じてプリントを配布する。</p> <p>【参考書】 レーザー光学物性, 長沢信方編(丸善、平成5年) pp.193-238. 「新しい量子化学(上)」A. ザボ, N. S. オストランド著, 大野公男, 阪井健男, 望月祐志訳(東京大学出版会) 「入門分子軌道法」藤永茂 著(講談社サイエンティフィク)</p>		

3. その他

<p>【履修条件】 電磁気学の知識があることが好ましい。</p> <p>【オフィスアワー】 電子メールで対応する。</p> <p>【成績評価の方法と基準】 授業出席と、小テストもしくはレポートにより成績評価をおこなう。</p> <p>【関連科目】 特になし。</p> <p>【注意事項】 特になし。</p>
--