青山学院大学 物理・数理学科 コロキウム

２０１３年度 第8回

下記の通りコロキウムを企画致しました。学生や分野の違う方にもわかるレベルから始めて下さるようにお願いしてあります。

是非ともご参加下さいますよう、ご案内申し上げます。

（世話人：佐藤　正寛、連絡先：042-759-6288

講演者 大野 かおる 氏 (横浜国立大学)

日時 １１月２８日（木）　午後４時４５分から

場所 青山学院大学　理工学部　Ｌ棟６階　Ｌ６０３室

講演題目 「カーボンナノ材料の第一原理計算」

ナノテクノロジーを代表するフラーレン、ナノチューブ、グラフェンなどのカーボンナノ材料は特殊な構造と電子状態を有することから注目を集めている。はじめに、ナノチューブの規則成長機構や直線分子内包などを例として、量子力学に基づく精密な第一原理計算から分かる特殊な力学物性について紹介する。続いて、フラーレンとフタロシアニンやポルフィリンなどの有機分子を接合して有機薄膜太陽電池を作る話題を、第一原理計算による材料設計の立場から紹介する。最後に、カーボンナノ材料が白金触媒の代替材料として使える可能性を議論する。白金は金属結晶で、フェルミ面付近に非常に高い状態密度を持つと同時に、自由電子的な電子状態も兼ね備えている。一方、グラフェンは６員環の蜂の巣格子からなる２次元シートであるが、フェルミ面での状態密度は０で、質量０の相対論的粒子と同様な、ディラック・コーンと呼ばれる電子状態を有している。この一見全く違う電子状態が、グラフェンに８員環の欠陥を周期的に配置することでかなり似たものになることが最近の第一原理計算で明らかになりつつある。フラーレンを１次元的に重合したポリマーでも同様な状態が実現する。これらの研究成果についても時間が許す限り紹介したい。