

## 2021年度 物質科学特論C (4078)

### ■ 授業科目基本情報

科目区分	専門科目	教職科目	指定なし
単位数	1	選択・必修・自由	選択
授業形態	講義	主な使用言語	英語
開講時期	IV	履修登録システム	使用する
履修登録期間	2021/12/22~2022/01/18	履修取消期限	2022/01/18

### ■ 教育プログラム別の履修区分

プログラム名	IS	CB	BS	BN	MS	CP	DS
履修区分	△	△	△	○	○	○	○
コア科目	-	-	-	-	-	-	-
履修方法	・修士論文研究又は特別課題研究を履修する場合は、基盤科目及び専門科目から12単位以上履修すること。 ・課題研究を履修する場合は、基盤科目及び専門科目から14単位以上履修すること。						

### ■ 授業科目概要

担当責任教員	上久保 裕生
担当教員	(Martin Vacha)、(鈴木充朗)、(杉本学)
教育目的／学修到達目標	<p>【教育目的】 Vacha: 鈴木:有機半導体の構造と物性に関する基礎的事項を学ぶ。また、有機太陽電池開発の実例を通し、有機半導体の性質が電子デバイスの性能にどのように反映されるのかを知る。 杉本: データ駆動科学は、自然科学(化学、物理学など)や医学・薬学で近年大きな注目を集めている研究分野です。この講義では、電子状態理論を応用した計算シミュレーションで得られる数値データを活用するケモインフォマティクスおよびマテリアルズインフォマティクス研究(「電子状態インフォマティクス」)について議論します。</p> <p>【学修到達目標】 Vacha: 鈴木: 1)有機半導体の基本的な特性を系統的に説明できる。 2)有機半導体の分子構造と電子物性、およびデバイス特性を関連付けて議論できる。 杉本: 電子状態インフォマティクス(ESI)について理解し、説明、記述できる。受講者はESIによる研究の利点と問題点を指摘するとともに、分子設計や分子物性予測のためにどのような課題があるかを発見し、議論できるようになる。</p>
授業概要／指導方針	<p>【授業概要／指導方針】 Vacha: 鈴木:講義形式で授業を行う。 杉本: 講義は、教室あるいはオンラインにて、スライドを用いたプレゼンテーション形式で実施します。質疑応答やディスカッションの時間も設けますので、問題意識を持って、積極的に参加してください。</p> <p>【授業時間外学修(予習・復習等)の目安】 Vacha: 鈴木:3回目の講義終了後に出すレポート課題に12時間程度。 杉本:各回毎に授業内で与えられたAssignmentの予習2時間 各回毎に復習2時間程度</p>

### ■ 授業計画

[1限目 9:20-10:50] [2限目 11:00-12:30] [3限目 13:30-15:00] [4限目 15:10-16:40] [5限目 16:50-18:20] [6限目 18:30-20:00]

回数	日付 [時間]	担当教員	テーマ	内容
----	---------	------	-----	----

1	1/12 [3]	鈴木 充朗	有機半導体の開発:基礎からデバイス応用まで	有機半導体の基礎物性や開発経緯を概観する。また、有機半導体デバイスの開発に関する最近の話題を紹介する。
2	1/12 [4]	鈴木 充朗	有機太陽電池材料の設計と物性	有機半導体デバイスの代表例として有機太陽電池を取り上げ、その高性能化に向けた分子設計指針を学ぶ。また、有機半導体の構造-物性相関を、実際に基き解説する。
3	1/12 [5]	鈴木 充朗	有機太陽電池材料の課題と展望	有機太陽電池材料の開発における現在の課題を説明し、その解決に向けた取り組みを紹介する。
4	1/19 [4]	Martin Vacha	単一分子分光法の原理	単一分子分光法は、ポリマーやソフトマターなどを含む複雑系のナノスケール特性を調べるための有力な最先端の方法である。この手法を理解するための物理の基本を学び、単一分子分光法や超分解能蛍光顕微鏡の原理を紹介する。
5	1/19 [5]	Martin Vacha	高分子やソフトマターのナノスケール特性	単一分子分光法を用い、共役系高分子、有機半導体、ペロブスカイトナノ結晶の光物理的ナノスケール特性、またはポリマーや液晶のナノスケールダイナミクスの研究を紹介する。
6	1/20 [5]	Martin Vacha	単一分子分光法の研究:最近のトピックス	単一分子分光法を用いた最近の研究成果を紹介する。共役系高分子ポリフルオレンの単一鎖における電界発光、b相形成、AFMを使ったH-会合体の励起子カブリング観測、またポリマー中の自由体積ダイナミクス、光合成の光化学系IIにおける光電流のプラズモン増強、などについて発表する。
7	1/24 [3]	杉本 学	電子状態インフォマティクスの基礎	電子状態インフォマティクスの概念と計算技術について、分子科学と量子化学の理論に基づいて解説します。電子状態計算の理論と実際の数値計算方法についても説明します。
8	1/24 [4]	杉本 学	電子状態インフォマティクスの応用	電子状態インフォマティクスの応用例を紹介し、従来のケモインフォマティクス手法との違いを解説します。話題としては、分子の生物学的活性、毒性予測、電子材料の物性などについて議論します。

## ■ 授業日程

[1限目 9:20-10:50] [2限目 11:00-12:30] [3限目 13:30-15:00] [4限目 15:10-16:40] [5限目 16:50-18:20] [6限目 18:30-20:00]

回数	日付	時間	講義室	備考
1	1/12	3	Rethink 物質創成科学大講義室	
2	1/12	4	Rethink 物質創成科学大講義室	
3	1/12	5	Rethink 物質創成科学大講義室	
4	1/19	4	Rethink 物質創成科学大講義室	
5	1/19	5	Rethink 物質創成科学大講義室	
6	1/20	5	Rethink 物質創成科学大講義室	
7	1/24	3	Rethink 物質創成科学大講義室	
8	1/24	4	Rethink 物質創成科学大講義室	

## ■ テキスト・参考書

テキスト	鈴木:当日はスライドを用いて説明するので特に必要ではない。 杉本: ありません。講義はスライドを用いて行います。
------	---

<b>参考書</b>	鈴木:当日はスライドを用いて説明するので特に必要ではない。 杉本[Engel,Gasteiger],Chemoinformatics:BasicConceptsandMethods[Wiley,Elsevier],IntroductiontoComputationalChemistry,3rdEd.,Wiley.
------------	--

## ■ その他

<b>履修条件</b>	特になし
<b>オフィスアワー</b>	Eメールで連絡の上、日時を決める
<b>成績評価の方法と基準</b>	5段階(秀・優・良・可・不可)で評価する。 鈴木:授業への参加度とレポートで評価する。 杉本:授業への出席、質疑応答やディスカッションでの姿勢や態度、レポートで総合的に評価します。
<b>関連科目</b>	特になし
<b>関連学位</b>	理学、工学、バイオサイエンス
<b>注意事項</b>	特になし