## 研究指導計画書

| 所属   | 大学院理工学研究科理工学専攻(博士後期課程)生命・物質・エネルギー科学 |         |          |  |  |
|------|-------------------------------------|---------|----------|--|--|
|      | プログラム                               |         |          |  |  |
| 学籍番号 | 324C8201                            | 主指導教員氏名 | 畑田 圭介    |  |  |
|      |                                     |         | (所属学系:   |  |  |
| 学生氏名 | 安田 新                                | 副指導教員氏名 |          |  |  |
|      |                                     |         | (所属学系: ) |  |  |
|      |                                     | 副指導教員氏名 |          |  |  |
|      |                                     |         | (所属学系:   |  |  |

研究テーマ

重原子 2 次元材料および層間ツイスト型ファン・デル・ワールス系の光電子回折(PED) の研究

本研究は、重原子を含む 2 次元材料および層間ツイスト構造を持つファン・デル・ワールス

## 研究概要

(van der Waals, vdW)系の局所的な原子構造を、光電子回折(PhotoElectron Diffraction, PED)の数値計算によって解明することを目的とする。具体的には、MsSpec (分光において、電子をプローブとする断面積を計算する Fortran パッケージ) コードを用いた、多重散乱理論に基づく、vdW 系、特に重原子系に対する有効な計算アルゴリズムの開発、数値計算結果と実験データの比較と機械学習や GPU を活用した計算の高速化と、相関展開法(多重散乱理論で計算する散乱行列の展開方法の一つ)の適用範囲の拡大を行う。

#### •1 年次

研究計画の策定および基礎的な文献調査と関連知識の習得を中心に、以下を行う。

(1) 文献調査およびセミナーを通じた知識の深化(週 1 回)、(2) 研究進捗報告会での進行状況の確認(毎月1回)、(3) シンポジウム、研究会、学会への参加(11月、8月)・2・3年次

### 研究 スケジュール

PED 解析の実験データ収集および数値計算の強化を中心に、以下を実施する。

- (1) 文献調査およびセミナーの継続(週 1 回)、(2) MsSpec コードを用いた、vdW 系に対する PED 計算手法の構築、(3) PED 実験データの収集、(4) MsSpec コードのアルゴリズム 改良と、機械学習を用いたパラメータ最適化手法の導入、(5) 学会での研究成果発表 (9 月)、(6) 博士論文の執筆開始 (10 月 ~)
- ※本計画書は、主指導教員が作成し、主指導教員又は学生が提出期限までに大学院教務担当へ提出する。
- ※本計画書は毎年見直しを行い、変更がある場合は再度提出する。
- ※長期履修制度等が適用された学生が、履修期間を変更する場合は再度提出する。



# 研究指導計画書

| 所属   | 大学院理工学研究科理工学専攻(博士後期課程) |         |        | プログラム |
|------|------------------------|---------|--------|-------|
| 学籍番号 |                        | 主指導教員氏名 | (所属学系: | )     |
| 学生氏名 |                        | 副指導教員氏名 | (所属学系: | )     |
|      |                        | 副指導教員氏名 | (所属学系: | )     |

|              | 本研究は〇〇〇に関する・・・を目的とする。博士研究期間のうちに、〇〇〇を明らかにすることを目標とする。   |  |  |  |
|--------------|---|--|--|--|
| 研究概要         |   |  |  |  |
|              |   |  |  |  |
| 研究<br>スケジュール | •1年次  |  |  |  |
|              | 研究計画の立案および予備的な実験・研究を中心に以下の項目を行う。                      |  |  |  |
|              | (1)関連知識習得のために文献を調査・紹介するセミナー(週 1 回),(2)研究室内での進捗        |  |  |  |
|              | 状況報告会 (月1回), (3) 研究会・学会への参加(9月), (4)~の実験・研究を行う(9月~)   |  |  |  |
|              | •2, 3年次   |  |  |  |
|              | 〇〇月に開催が予定されている研究会・学会での研究発表を 1 つの目標として以下の項             |  |  |  |
|              | 目を行う.   |  |  |  |
|              | (1)関連知識習得のために文献を調査・紹介するセミナー(週 1 回),(2)研究室内での進捗        |  |  |  |
|              | 状況報告会 (月 1 回), (3) 研究会・学会への参加(9 月), (4)~の実験・研究を行う(9 月 |  |  |  |
|              | ~), (5)博士論文執筆(10月~)                                   |  |  |  |
|              |   |  |  |  |

- ※本計画書は、主指導教員が作成し、主指導教員又は学生が提出期限までに大学院教務担当へ提出する。
- ※本計画書は毎年見直しを行い、変更がある場合は再度提出する。
- ※長期履修制度等が適用された学生が、履修期間を変更する場合は再度提出する。