

第3回 夏の体験入学

グループ紹介・体験プログラム概要

理論分子科学研究系 信定G

(助教授) 信定 克幸 (助手) 安池 智一

研究テーマ

量子開放系における電子ダイナミクス

- 量子開放系とは？

環境との相互作用下にある系（表面吸着分子や溶液内分子など）

- 量子開放系の特徴

粒子・エネルギーの散逸，コヒーレンスの喪失（デコヒーレンス）

- 量子論でのダイナミクス

コヒーレント励起→量子状態の重ね合わせ

（cf. コヒーレント制御・量子コンピューティング）

…と何やら難しそうなことを考えています。

体験プログラム

量子論におけるダイナミクスとは何であるかを
数値実験を通して体感しよう！

- ✿ Na_2 に光を照射して電子がどのように応答するかを調べる
 - 1. 量子化学計算プログラムによる励起状態計算
(定常状態＋時間依存摂動論に基づいて見当をつける)
 - 2. 実空間・実時間 TDDFT プログラムによる電子波束の直接計算
(電子が実際どのように動くのかを見る)