

# 第4回 夏の体験入学

研究テーマ・体験プログラム紹介

理論・計算分子科学研究領域 米満グループ

(総研大 機能分子科学専攻)

# 研究テーマ：分子性物質の光誘起相転移ダイナミクス

## 1) 分子性物質(分子の集合体)の特徴

- ・電子の運動方向が制限される → “低次元性”
- ・分子配置が変わりやすい → “電子格子相互作用”が重要

## 2) “光誘起相転移”とは？

- ・光によって一斉に物性を変化させること
- 物質の誘電性(色)や伝導性(金属/絶縁体)が変わる
- 相互作用する電子の協調性が重要

光をあてた時、物性がどう変わるかを理論的に明らかにするため、  
“物性を支配する多数の電子と分子”を扱う理論計算を行っています

# 体験プログラムについて

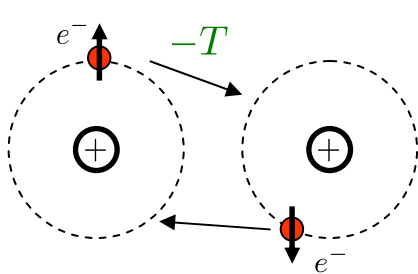
分子性導体における基本的相互作用である、

1) 重なり積分 2) クーロン相互作用 3) 電子-格子相互作用

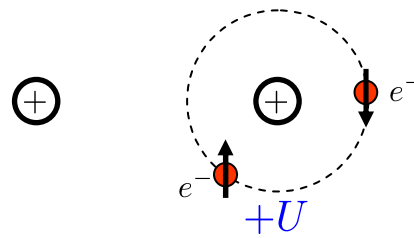
を厳密に扱った“2サイト2電子モデル”についての電子状態計算を行う

→ 分子軌道状態、Heitler-London状態、自己束縛状態 を理解

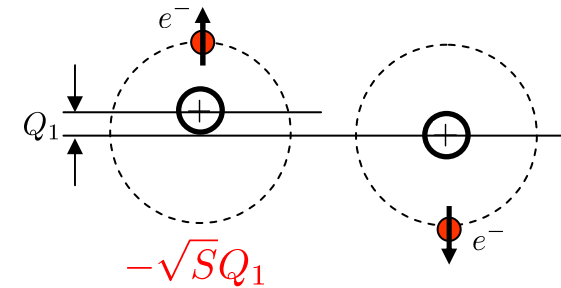
キーワード: 金属絶縁体転移、パイエルス転移、電化移動不安定性



“Molecular orbital state”



“Heitler-London state”



“Self-localized state”