

第5回 夏の体験入学

グループ紹介・体験プログラム概要

理論・計算分子科学研究領域 信定G

(准教授) 信定 克幸 (助教) 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→如何に壊れるか？

（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
紙と鉛筆・計算機を駆使して体感しよう！

- ✻ 量子力学ミニマム（担当者による解説）
- ✻ 紙と鉛筆でできること（相互作用表示・2準位系の厳密解）
- ✻ 計算機実験

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）