

第6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

- ・分子軌道の節 → 軌道の重なりが小さく、“クーロン相互作用”が重要
 - ・分子配置が変わりやすい → “電子格子相互作用”も重要
- ・分子配置と軌道の節で、電子の運動方向が制限される → 伝導の“低次元性”

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
 - 物質の色、磁性、誘電性、伝導性(金属/絶縁体)が変わる
 - 相互作用する多数の電子の協調性が起こす現象

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

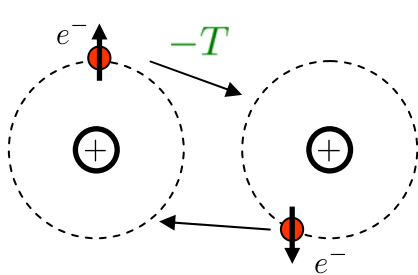
分子性導体における**基本的相互作用**である、

1) 重なり積分 T 2) クーロン相互作用 U 3) 電子-格子相互作用 S

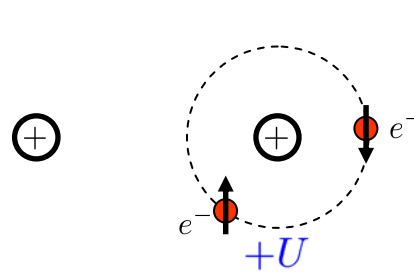
を厳密に扱える“**2サイト2電子モデル**”について、電子状態を考察する

→ **分子軌道状態**、Heitler-London状態、**自己束縛状態** を理解

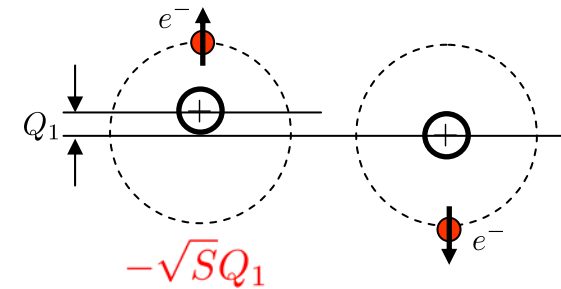
キーワード: 金属絶縁体転移、パイエルス転移、電荷移動不安定性



“**分子軌道状態**”



“**Heitler-London状態**”



“**自己束縛状態**”