

第7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 G

研究テーマ

分子性物質の光誘起相転移ダイナミクス

- 分子性物質とは

- 分子軌道の重なりが小さい → “クーロン相互作用” が重要
- 分子の配置、形が変わりやすい → “電子格子相互作用” も重要
- 分子配置により電子の運動が異方的 → 伝導の “低次元性”

→ これらにより、多様な “相” (物性) が出現

- 光誘起相転移とは

- 光によって物性が一斉に変化すること
- 物質の色、磁性、誘電性、伝導性 (金属/絶縁体) が変わる
- 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

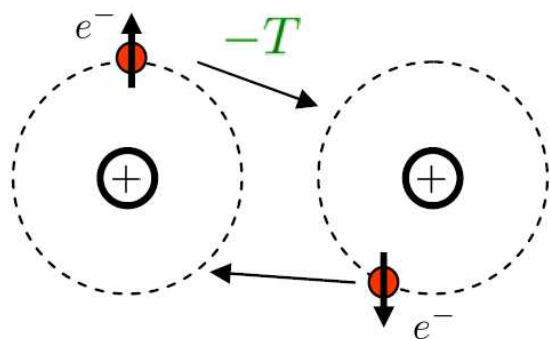
分子性導体の多様な“相”を理解する

Keywords : 金属絶縁体転移、パイエルス転移、電荷移動不安定性

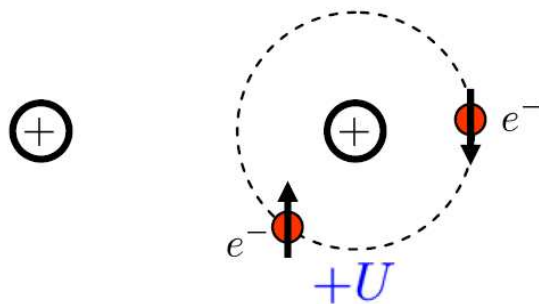
- 3つの基本的相互作用

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

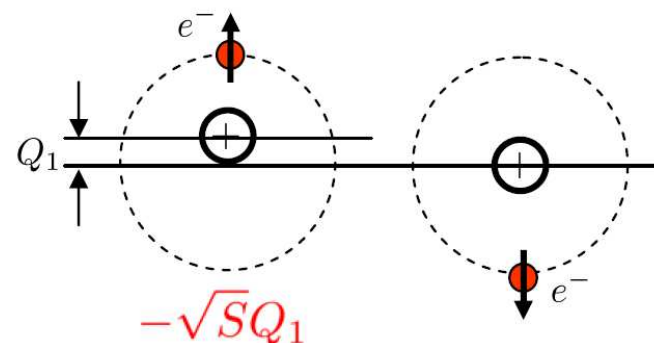
- 雛型として、“2サイト2電子モデル”の電子状態を考察し、以下の3状態を理解する



分子軌道状態



Heitler-London 状態



自己束縛状態