

グローバルCOE「統合物質科学」セミナー 報告書

開催日時: 2009年7月18日 午後1:30-3:30

開催場所: 理学部6号館 571号室

講師: 米国 ロスアラモス国立研究所 専門研究員 Sergei Tretiak博士

演題: “Multiscale Modeling of Electronic Excitations at the Nanoscale”

ナノスケールに束縛された励起子の性質は、光励起後のダイナミクスを支配し、素材としての重要性を決定づける。今回の講演では、密度汎関数法(及び時間依存密度汎関数法)を使った量子化学的手法によって、ナノスケール閉じ込め効果の役割・励起状態の局在化と非局在化・交換相互作用・励起子微細構造・分子振動フォノンへのカップリングについて議論した。量子ドットにおいて表面配位子の電子状態への影響を考察し、強い表面-配位子相互作用が混成状態や分極効果を生むこと、そして、共役ポリマーのアモルファスクラスタでは、電子のトラップ状態が分子内配置の不均一性から生まれ、一方でホールトラップ状態は分子間電子相互作用から生まれる経緯を説明した。Tretiak博士は、束縛された励起子を考察するため、マルチスケール励起子散乱モデルを開発し、このモデルを用いると、“超分子的”計算を回避しつつ、分子構造全体を通した励起子の複雑で非自明な非局在化を特徴づけが可能であることを紹介した。

今回の講演会には、理・化学専攻の物理化学系研究室のみならず、工・分子高額専攻、福井謙一記念研究センターの教員および研究員約20余名が参加し、活発な議論が交わされた。



(理・化学 金 賢得 記)