

セミナーのご案内

分子性導体の有効モデル化の進展： beyond single-MO models

妹尾 仁嗣 氏

理研CEMS

6月29日(月) 16:30-
理学研究科合同B棟745号室

一見構造が複雑な分子性導体の電子状態は、実はシンプルに記述できることがわかってきた。すなわち、構成分子の分子軌道波動関数がよい強束縛モデルのよい基底となり、大抵の場合1つの分子軌道でこと足りる。そのため典型的な強相関電子系の問題、例えばモット転移や電荷秩序転移やそれらに伴う磁性現象の舞台として、実験と理論の明確な対応をもとに研究が進んできた。

本セミナーでは、この枠組みから少しだけはみ出た、しかしながら興味深い物質群に焦点をあて、第一原理計算から出発した電子状態の有効モデル化についての我々の試みを紹介する。取り上げたいのは、単一成分分子性導体[1]、Pd(dmit)₂系[2]、および"κ-cat"系[3]という、chemistryの観点からも「新しい」物質系である。

[1] H. Seo et al, JPSJ 77, 023714 (2008); ibid 82, 054711 (2013).

[2] T. Tsumuraya et al, JPSJ 82, 033709 (2013), H. Seo et al, JPSJ 84, 044716 (2015).

[3] T. Tsumuraya et al, to be published in PRB (arXiv:1408.3162).

連絡先: 理学研究科物理学専攻 石原純夫
TEL.: (内)6436
e-mail: ishihara@cmpt.phys.tohoku.ac.jp