

# セミナーのご案内

新物質のモデル化と電子状態  
— 分子性導体 $M(\text{tmdt})_2$ と遷移金属酸化物 $A_{0.33}V_2O_5$  —

妹尾仁嗣氏  
日本原子力研究開発機構 放射光科学研究ユニット

7月3日(木) 17:00-18:30  
理学研究科総合研究棟921号室

物性物理において新物質の開発は新しい物理を生む土壌として欠かせない。そしてその理論的研究においてはまず低エネルギー有効モデルを構築することが第一歩となる。本セミナーでは最近我々が行った、第一原理計算によって得られたフェルミ面近傍のバンド構造を元に、強束縛フィッティングによって有効ハバードモデルを構築し、これを解析した研究例を二つご紹介したい: (I) 分子性導体で初めて単一種の分子で構成され金属状態が実現した「単一成分分子性金属」系 $M(\text{tmdt})_2$  ( $M = \text{Ni}, \text{Au}$ ) [1] および (II) 電荷秩序絶縁体と超伝導の競合が圧力温度相図で見られている $A_{0.33}V_2O_5$  ( $A = \text{Na}, \text{Sr}$ ) [2]である。

[1] H. Seo, S. Ishibashi, Y. Okano, H. Kobayashi, A. Kobayashi, H. Fukuyama, and K. Terakura, J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 023714.

[2] H. Seo and S. Ishibashi, in preparation.

連絡先: 石原純夫  
TEL.: (内)6436  
e-mail: ishihara@cmpt.phys.tohoku.ac.jp