

スピン共役電子系の理論計算

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2022-06-30 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: Nagao, Hidemi メールアドレス: 所属:
URL	https://doi.org/10.24517/00066547

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0 International License.



スピン共役電子系の理論計算

Research Project

All

Project/Area Number

12020234

Research Category

Grant-in-Aid for Scientific Research on Priority Areas (A)

Allocation Type

Single-year Grants

Research Institution

Kanazawa University

Principal Investigator

長尾 秀実 金沢大学, 理学部, 助教授 (30291892)

Co-Investigator(Kenkyū-buntansha)

山口 兆 大阪大学, 大学院・理学研究科, 教授 (80029537)

Project Period (FY)

2000

Project Status

Completed (Fiscal Year 2000)

Budget Amount *help

¥1,700,000 (Direct Cost: ¥1,700,000)

Fiscal Year 2000: ¥1,700,000 (Direct Cost: ¥1,700,000)

Keywords

超伝導 / 有機分子性結晶 / 2バンドモデル

Research Abstract

本研究の目的はスピン共役電子系における磁性・導電性・超伝導性発現の可能性を理論的に探ることである。本年度は有機分子性結晶の外場誘導超伝導についての理論的研究を行った。電界効果トランジスタ構造にした有機分子性結晶において、電場をかけると分子性結晶中の化学ポテンシャルが変化し、結果的に結晶中の電子あるいはホール濃度が変化する。このような物理的ホールドープを起こすことによって様々な物性が発現する。例えば、フラレンC_<60>やアントラセンなど

では超伝導が発現する。本研究では2バンド理論を用いて酸化物超伝導体や有機物結晶系の電場誘導超伝導の可能性を理論的に予測し、酸化物超伝導体についての計算を行った。具体的にBi₂Sr₂Ca_{1-x}Y_xCu₂O₈におけるホール濃度に対する相図と電場依存性を得た。超伝導転移温度は電場に対して敏感に変化することがわかった。このような電場あるいは光による高温超伝導体の発現には2あるいは多重バンドの状態密度の重なりが重要な役割をはたし、有機物結晶系でも2バンドモデルで記述される系が適していることがわかった。特に、有機ラジカル分子性結晶や有機スピン共役分子の結晶では高温超伝導発現の可能性があることが示された。

Report (1 results)

2000 Annual Research Report

Research Products (6 results)

All Other

All Publications (6 results)

[Publications] T.Soda et al.: "Ab initio computations of effective exchange integrals for H-H,H-He-H and Mn₂O₂ complex"Chemical Physics Letters. 319. 223-230 (2000) ▼

[Publications] H.Nagao et al.: "Theoretical Studies on Effective Spin Interactions, Spin Alignment and Macroscopic Spin Tunneling in Polynuclear Manganese"Coordination Chemistry Review. 198. 265-295 (2000) ▼

[Publications] M.Nishino et al.: "Theoretical studies on necessary conditions for Reversible Photoinduced Magnetization : Cobalt-Iron Cyanide System"Molecular Crystals and Liquid Crystals. 343. 151-156 (2000) ▼

[Publications] H.Nagao et al.: "Theoretical studies on superconducting and other phases Triplet superconductivity, ferromagnetism"International Journal of Quantum Chemistry. 80. 721-732 (2000) ▼

[Publications] Y.Shigeta et al.: "Theoretical studies on dependency of conductivity on structure of proton and electron coupled system"International Journal of Quantum Chemistry. 80. 882-891 (2000) ▼

[Publications] H.Nagao et al.: "Theoretical studies on aromatic phases of photo-doped systems in two-band model"Journal of Chemical Physics. 113. 11237-11244 (2000) ▼

URL: <https://kaken.nii.ac.jp/grant/KAKENHI-PROJECT-12020234/>

Published: 2000-03-31 Modified: 2016-04-21