

A04-6

高密度共役分子集積体の定量的な有効モデル化と特異な電荷スピン結合現象の発掘

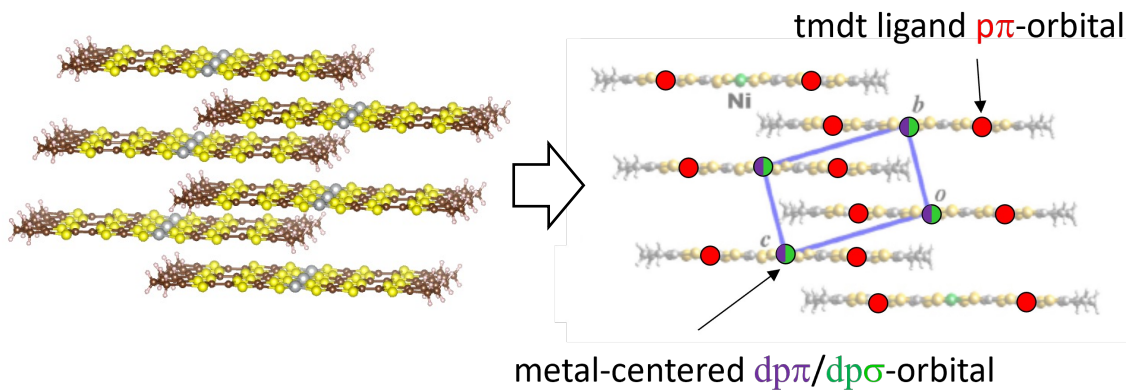
研究代表者：妹尾 仁嗣 (理研)

A04班のミッション：高密度共役のその先に

A04-6の狙い

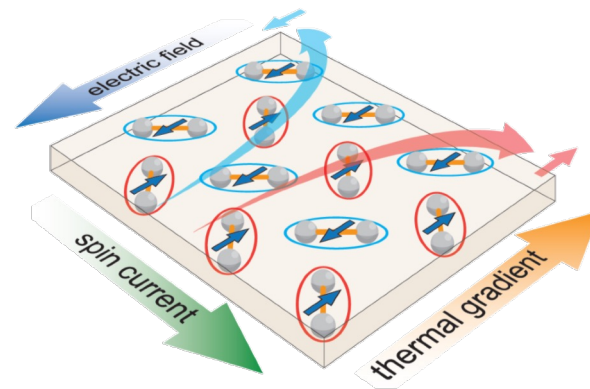
- ab initio第一原理計算による高密度共役系の定量的モデル構築
- 新規の電気・磁気結合応答の理論的発掘

金属含有分子性導体の有効モデル化



分子内自由度を抽出・モデル解析

特異なスピン輸送現象



分子配列と磁気秩序の協奏効果