

研究責任者名 Name	岩野薫 Iwano Kaoru	所属機関 Affiliation	高エネルギー加速器研究機構	
受理番号 Proposal No.	(T)11-01	研究課題名 Program title	低次元強相関電子系における放射光分光	

研究を終了しましたので、下記の通り報告します。

成果の概要

Abstract

(和文) 2次元スピinlessフェルミオンモデルを対象に動的密度行列繰り込み群法(DDMRG 法)および状態数制限対角化法を用いて電荷秩序基底状態や光学伝導度スペクトルの計算を行った。計算サイズは空間サイズが 6×6 であり、パラメータは比較的電荷秩序が出やすい最近接間クーロン斥力の値を用いた。なお、後者はサイト表示で最近接充填ペアの数が14までを選んでおり、状態数全体のおよそ6%だが、基底状態および低エネルギー光学スペクトルを議論する際は十分良い近似となっている。両者の計算結果の比較をすると、基底状態の電荷秩序の程度や光学スペクトルは「研究実施報告書」に示すようになり良い一致を示している。これにより今回テスト計算を行った2次元DDMRG法プログラムの定量的な有効性を確認する事が出来、今後の同方法の展開に向けて大きな一歩となった。

(英文)

I investigated the charge-ordering (CO) ground state and the optical conductivity spectrum for a two-dimensional spinless fermion model, using two methods, that are, a dynamical density-matrix group method (DDMRG) and a direct diagonalization within a restricted number of basis states. The spatial size assumes is 6 by 6, and the parameter is chosen so as to give an intermediate degree of CO. In the latter method, the states having up to 15 filled pairs of fermions. Although these states correspond to approximately 6% of the total states, we consider it almost sufficient when we discuss the ground state and a low-energy part of the spectrum. By comparing both the results, we judge that the degree of CO and the spectrum agree with each other, as shown in the detailed report of the calculations. These agreements indicate the effectiveness of the present two-dimensional DDMRG method at a quantitative level, and become a substantial step toward a near-future development of this method.

研究成果を公開しているホームページアドレス

研究成果の 公表	口頭研究発表 件数	査読付きの学術論文数	プロシーディング論 文数	その他(投稿中を含 む)
	1	1	0	0

成果の公表リスト（それぞれの枠に番号をつけて記入願います。）

口頭研究発表

1. 岩野薫、「擬1次元系の電子ドメイン成長過程におけるフォノン散乱効果 III」、2012年3月24日、日本物理学会第67回年次大会

査読付きの学術論文(URLを記載)

1. K. Iwano, " Incoherence induced by phonon excitations in domain-growth dynamics: Role of the domain center-of-gravity motion ", Phys. Rev. B 84, 235139-(1-4) (2011).

プロシーディング論文(URLを記載)

その他（学位論文、紀要、投稿中の論文を含む）(URLを記載)

特記（本研究に関係した、新聞記事・著作、受賞など）

研究責任者 岩野薫
 所属機関 高エネルギー加速器研究機構
 研究課題名 低次元強相関電子系における放射光分光

研究組織 (人員:1名)

高エネルギー加速器研究機構 岩野薫 (研究の全般)

実施報告の詳細

近年、2次元系における強電子相関効果が1/4充填バンドを有する分子性結晶において注目を集めている。特に光誘起相転移の観点では、基底状態において電荷秩序を有するある集の物質においてフェムト秒 (fs) オーダーの極めて早い相転移ダイナミクスが観測されており、その光励起状態の nature に関心が集まっている。

1/4 充填系はスピン自由度も含めてバンドに1/4の割合で電子が詰まっている。これらの電子の間のオンサイト(同じ分子内)のクーロン斥力を大きいとする極限では、同じサイトの2重占拠が禁止されるため事実上スピン自由度は意味を持たなくなる。この場合はスピン自由度を無視し同種粒子と扱い、その代わり粒子数を2倍にする、すなわち、半充填とする近似が成り立ち、それが以下のスピンレスフェルミオンモデルである。

$$H = -t_0 \sum_l (C_l^+ C_l + h. c.) + V \sum_l n_l n_l$$

このモデルに対し、筆者によって開発された2次元動的密度行列繰り込み群法 (DDMRG法) および状態数制限の直接対角化法を適用し、基底状態における電荷秩序や光学伝導度スペクトルを求めた。より詳しい条件は、格子サイズ6×6、 $V/t_0=3$ であり、DDMRG法におけるブロックあたりに保持する状態数(m)は650である。直接対角化法における状態の制限は、基底のサイト表示で占拠最近接ペア数を14までとした。これにより全状態の6%程度となるが、上記ハミルトニアン第2項が示すとおり無視された状態は t_0 単位で45以上とエネルギー的に極めて高いため、この制限は基底状態および低エネルギー状態を扱う限りは良い近似となっている。下記にそのようにして計算された光学伝導度スペクトルを示す。DDMRGの結果は計算時間の制限により離散的になっているが、得られた結果の範囲内で概ね良い一致を得た。以上の結果は本DDMRG法プログラムの定量的な信頼性を示唆するものであり、今後の同方法を用いたさらなる展開が大いに期待出来る。

