2次元ハバードモデルの光学伝導度の 最下端準位構造

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 岩野 薫

目的 2次元強相関電子系の基本モデルであるハバードモデルを用いて、半電子充填の場合にその光学伝導度スペクトルを解析した。特に興味はその最下端構造であり、磁気的相互作用を通じて電子正孔対が束縛されるかどうかである。本研究ではこれを厳密対角化の手法で有効モデルを用いて明らかにする。

内容 図に有効モデルによって求めた一対の電子正孔対状態の状態数密度 (DOS)と、それを最近接状態に投影した局所スペクトル(LDOS)を示す。DOSはほぼ連続状態から始まる。(連続状態の端をE=0とする) 一方、束縛状態に敏感なLDOSはそのやや下側にピークを有し、これは束縛状態の形成を意味する。その束縛エネルギーは0.1T(Tは運動エネルギーのスケール)より小さく、非

常に浅い束縛状態であることが示された。

利用した計算機 OCTOPUS

ノード時間 ~800時間

使用メモリ 4.2TB

ベクトル化率 -

並列化 128ノード内並列

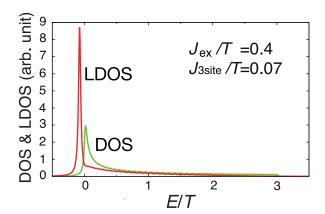


図: DOSとLDOS。J_{ex}, J_{3site}は2種類の 磁気相互作用のパラメター。