平成 23 年度 RICC 利用報告書

課題名（タイトル）:

２＋１次元の格子ＱＥＤを用いたグラフェン相転移の研究

利用者氏名：新谷 栄悟
理研での所属研究室名：
和光研究所 仁科加速器研究センター 素粒子物性研究部門 理研 BNL 研究センター 理論研究グループ

１． 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本研究ではグラフェン物性の電気特性について、相対論的描像に基づいた電磁気力学（QED）モデルを用いた新しい解析方法を試みた。グラフェンとは近年発見された炭素原子が２次元平面上に六角格子状に配置されたシンプルな構造を持った物性であるが、非常に興味深い物性的特性を持っていることが知られている。その一つに、２次元平面の六角格子状に価電子が拘束されているという条件を用いて相対論的粒子として電子の運動方程式が記述できるという点があげられる。これは近接強結合近似を用いたナイーブな描像であるが、しかし実験的に電子と正孔のバンド構造を求めたところ、相対論的粒子の分散関係を満たしていることが分かった。また、強磁場上におけるホール伝導度が半整数則に従うことも２＋１次元の QED モデルにおいて予言されていた。以上の事実は QED モデルと実際のグラフィン物性が何らかの関係を持っていることを強く示唆している。

本研究ではグラフェンにおける絶縁体相転移現象である。半導体構造を持った物性の温度を下げていったときにある相転移温度以下で導体から絶縁体に移る現象（モット相転移）が知られているが、グラフェンにおいては２０Ｋ以下においても観測されていない。しかし、ＱＥＤモデルの予言ではカイラル対称性の破れとして相転移現象が予想されているため、矛盾した結果を示している。しかしながら、実験側ではグラフェン自体がシリコンベースの基板上に配置されていることによる揺らぎの効果がある。一方、理論面においても近似法による結果の違いがあるため、確定した結論は得られていない。そこで、我々は厳密にＱＥＤ効果を取り入れた非摂動的計算を行うことで、ＱＥＤモデルにおける相転移点の理論的決定を目的とする。

２． 具体的な利用内容、計算方法

ここでは、３＋１次元のＱＥＤに２＋１次元のフェルミオンが拘束されている系を考える。相対論的に扱うことを目的とするため、光子場は電場及び磁場からの相互作用を考慮し、局所的相互作用を含んだゲージ不変性を保つラグランジアンを考える。またフェルミオンは光速の１００分の１程度に抑えることにするため、理論パラメータとしてフェルミ速度を導入する。フェルミ速度はバンド構造からおおよそのオーダーが求められている。４次元の格子空間に光子場を配置させて、フェルミオン場は２＋１次元に拘束されている系についてモンテカルロ積分を実行して、相転移現象のオーダーパラメータであるカイラル凝縮とカイラル感受率をいくつかの質量パラメータにおいて計算した。ここで我々が注目したことは系の結合定数とフェルミ速度依存性である。フェルミ速度及び結合定数が系の振舞を決定するパラメータであるが、摂動的には結合定数/フェルミ速度が有効結合定数と考えられる。そこでこれらのパラメータを変化させた場合の物理量の応答性をシミュレーションすることにした。

３． 結果

図１にカイラル凝縮とカイラル感受率の有効結合定数依存性を質量パラメータごとにプロットしてある。フェルミ速度は 0.1 に固定し、格子のサイズは３０^2×２０である。カイラル凝縮は質量ゼロに近づくにつれて、相転移点を境にゼロか有限な値に残るように見える。カイラル感受率を見ると明らかに相転移点においてピークが現れ、かつ質量パラメータｍが小さいほどピークの形が鋭くなっている。これは２次以上の相転移が存在する場合、質量ゼロの極限においてピークの

発散が現れる振る舞いに酷似している。この結果は、ＱＥＤモデルが実際にカイラル対称性の自発的破れを持つ系であることを強く示唆している。

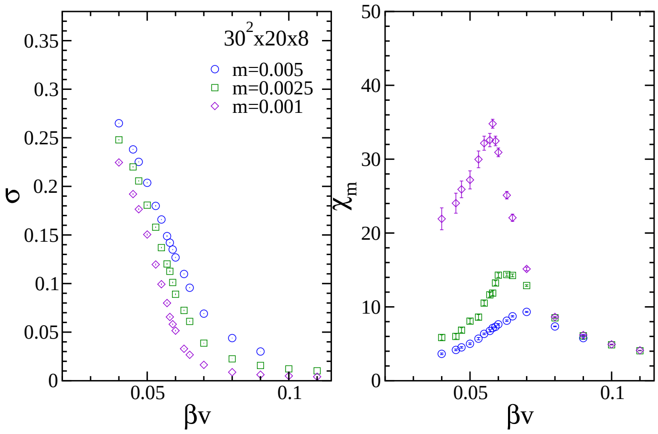

図１：（左図）カイラル凝縮の有効結合定数依存性。βは結合定数、v はフェルミ速度を表す。（右図）カイラル感受率の有効結合定数依存性。異なるシンボルは質量パラメータの違いを表す。

４．　まとめ

本研究では４次元時空上に２＋１次元のフェルミオンが拘束された QED の系を考え、その系におけるカイラル対称性の破れについてモンテカルロ積分を実行した。ここでは、ゲージ対称性とフェルミ速度を考慮したラグランジアンをもとにした局所的なモデルに注目した。シミュレーションの結果、オーダーパラメータの振舞は相転移現象をよく再現していた。

５．　今後の計画・展望

ここで示した相転移近傍の振舞から、実際に具体的な相転移点を決定するにはさらなる詳細な研究が必要である。まずは本研究で得られた相転移現象が２次であることを明らかにするにはスケーリングを見る必要がある。具体的な計算としては、相転移点付近の格子サイズを変えた場合のカイラル凝縮の応答性を調べる必要がある。

６．　RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況（どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか）や、継続して利用する際に行う具体的な内容

これまで、簡易利用として８０％以上の計算時間を利用したが、格子サイズを大きくしたモンテカルロ積分を実行する必要がある。空間サイズとして１００までを目標にするためにはより多くのコアを用いた並列計算する必要があるので、効率的に本研究を進めるためには一般利用に申請することが適当と考えられる。また、グラフェンとの対応関係を明らかにするためには、ゼロ質量への外挿が必要となる。質量パラメータが小さいほど系統誤差を抑えた結果を得ることができるため、m=0.001 以下のシミュレーションが重要であるが、質量パラメータが小さいほど逆行列を計算する時間が指数関数的に増加する。そのためにもより大規模な計算機使用が必要となる。

平成 23 年度　RICC 利用研究成果リスト

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1.　2011 年日本物理学会秋季大会、9 月弘前大学