

課題名 (タイトル) :

格子 QED を用いたグラフェンモデルの数値的解析

利用者氏名 : ○新谷栄悟*, 大野木 哲也**

所属 : *理研 BNL 研究センター計算科学研究グループ・マインツ大学
**大阪大学大学院理学研究科

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

本研究課題では、3次元空間上にフェルミオンが拘束された格子 QED 系におけるモンテカルロ計算を行い、グラフェンモデルに対応する相転移現象の理論的解明を目指す。グラフェンは六角格子をした炭素原子配置が空間 2 次元にシート上に広がった炭素同位体であるが、その高い対称性から特異的な性質を持っていることが実験的に示唆されている。特にグラフェン上における非常に高い電子移動度と異常量子ホール効果は理論的に興味深い課題であると共に実用的にも新しい半導体デバイスとしての可能性を秘めている。結晶における電子間相互作用による物性特性を理論的に解析するとき、単純なモデルとして原子間の最近接相互作用のみを扱った強結合近似は結晶バンド構造の概観を容易に得られことから、理論解析の初期段階によく用いられる。グラフェンにおいても、1980 年代においてすでに同様の解析が試みられ、グラフェン上における電子運動自体は非相対論的系と考えられるにもかかわらず、ハミルトニアンが 3 次元上における相対論的なディラック粒子系として記述できることが知られていた。この対応関係は非常にナイーブな近似を元にしたものであるにも拘らず、グラフェンが持つ高い電子移動度と分散関係を示すバンド構造はその描像を裏付けている。更に異常量子ホール効果が示す階層構造をこのモデルが再現できることもディラック粒子モデルの正当性を裏付ける強力な事実と見られる。一方、3次元ディラック粒子モデルに電子間クーロン相互作用を導入した 3次元 QED モデルが予想する幾つかの理論予想は実験結果を再現できていない。その一つにグラフェンの絶縁体-半導体相転移現象が単層グラフェンでは超低温においても観測されていないことが挙げられる。絶縁体-半導体相転移現象は相転移温度以降において絶縁体として結晶が振る舞う 2 次相転移現象であり、幾つかの結晶で観測されている。

3次元 QED をもとにしたモデル計算ではこの相転移現象がカイラル対称性の自発的破れとして理解できるという提唱がなされている。この系の特殊性から、質量ゼロフェルミオンが持つ速度が光速度とは $1/300$ だけ小さいというバンド構造からの解析結果を再現するため、モデル計算においてもフェルミオンの運動項に速度パラメータを導入している。このフェルミオンと光子の速度比は結合定数の微細構造定数との比に対応する。速度比が $1/300$ ということは単純には結合定数が微細構造定数の 300 倍を意味するため、強結合 QED 系を考慮必要がある。従って通常の摂動計算は収束しないため、非摂動計算が求められる。3次元 QED 系のカイラル対称性の破れを扱うモデル計算では自発的カイラル対称性が起こると予想しており、グラフェンにおいても対応する相転移現象が予想される。ただし、モデル計算ではその相転移温度の具体的な値を決めることはできないため、現在のところ実験結果の再現性は保証できていない。

本研究では、モンテカルロ計算を用いた非摂動的手法からカイラル対称性の自発的破れが強結合 3次元 QED モデルに実現可能かを厳密的に確かめることを目的としている。また、この研究により具体的な相転移温度を求めることによって、実際のグラフェンモデルとの普遍性の探索及び相図の決定することができる。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究では 3次元空間に拘束されたフェルミオンを含む 4次元格子 QED のモンテカルロ計算を実施し、カイラル対称性の自発的破れが起こっていることを次の 3つのアプローチから確かめることとした。

● カイラル凝縮とカイラル感受率

フェルミオンのスカラー凝縮を弱結合領域から強結合領域にかけて幾つかの結合パラメータ及び質量パラメータ上で計算して、その特異的な振る舞いが起こる点を探す。またカイラル凝縮を質量パラメータで一次

微分したカイラル感受率を質量パラメータごとに幾つか振ってその発散的振る舞いが起こる点を特定する。質量ゼロにおいてカイラル感受率の発散点が臨界点と考えられるが、質量依存性からその傾向が判定できる。

● 低固有モードの分布

カイラル凝縮から得られた臨界点近傍のディラック演算子の低固有モード分布からカイラル対称性の自発的破れの厳密的な証明を行うことができる。カイラル対称性の自発的が起こることに伴って生じるスペクトラル密度分布の特有のパターンから、質量ゼロ及び無限体積上のカイラル凝縮の具体値を評価できると共に、結合定数に依ったパターン変化から臨界点以前と以降の相構造の変化を測定することができる。

● 南部ゴールドストーンボゾンとカイラル摂動論

カイラル対称性の自発的破れに伴って、南部ゴールドストーン定理からボゾンの振る舞いを示すフェルミオンの拘束状態が生じる。臨界点を越えた対称性が破れた領域において南部ゴールドストーン (NG) ボゾンが 1 粒子状態として生じるかを確かめることで、カイラル対称性の自発的破れの現象との妥当性を確認することができる。また、NG ボゾンの振幅と質量依存性がカイラル摂動論から導き出される表式との一致を確かめ、かつその表式を用いたフィットからゼロフェルミオン質量点への外挿を実施できる。この結果から具体的にカイラル凝縮の値との一致を確認することができる。

ここでは格子サイズとして $40^2 \times 20 \times 8$ を用いる。注目するグラフェン系におけるフェルミオンはフェルミ速度を持ち、その大きさはおよそ光速の $1/300$ と予想されている。格子 QED 計算においては、速度パラメータ v を導入し、さらに変数変換からゲージ場の結合定数の非等方性を見なすことで、フェルミオンとゲージ場の運動項を通常の QED と同じ形にすることができる。さらに、このパラメータ化をとることで v の変化量によって結合定数と温度を同時に動かすことができる。ここでは $v=0.1, 0.05$ の 2 パターンを用いて実施した。

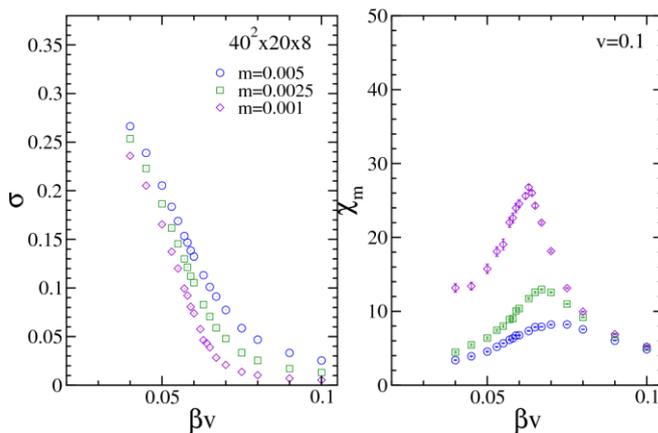
3. 結果

図 1 と図 2、図 3 にこれまで得られたカイラル凝縮とカイラル感受率の結合定数依存性をプロットしてある。図 1 を見ると、結合定数 $1/\beta v$ が大きくなるに従ってカイラル凝縮がゼロから離れていっていることが分かる。

またカイラル感受率について $\beta v=0.06$ 近傍においてピークが現れ、質量が小さくなるに従ってピークの位置が成長していることが分かる。このことから、 $\beta v=0.06$ 近傍に臨界点が存在することを示唆している。格子サイズを変化させてもその傾向は変わらないことも分かる。また図 2 にあるように v を小さくするに従って臨界点の振る舞いが変わっている。これは、また v そのものの結合定数依存性が存在することを示唆する。図 3 にはサイズ依存性をプロットしてあるが、格子サイズを大きくしていくことによって臨界点の位置が弱結合側にシフトする様子が分かる。このことから、臨界点の有限サイズスケージングの傾向が見て取れる。

図 4 に低固有値分布の変化を表した結果をプロットしてある。スペクトラル密度として表した場合、カイラル対称性の自発的破れが起こると、スペクトラル密度は固有値に依らずに一定の値に近づき、その値はカイラル凝縮を示す (Banks-Casher 関係式)。図 3 を見ると予想通り、 $\beta v=0.06$ 近傍からプラトー領域が現れている。さらに弱結合領域と強結合領域の違いも顕著に現れている。

図 5 では、臨界点以降の対称性の自発的破れが起こっている領域において擬スカラー粒子の演算子間の相関関数を計算して NG ボゾンの 1 粒子状態を抜き出した後、その振幅を各質量においてプロットした結果を表している。NG ボゾン振幅の質量依存性に結合定数による違いが表れていることが分かる。また、臨界点近傍の振幅についてカイラル摂動論から導かれるフィット関数とモンテカルロ計算の結果がよく一致していることから、この領域ではカイラル摂動論がよい有効モデルとして記述出来ていることを表している。ただし、強結合領域ではこの描像が成り立たなくなっている。これは格子間隔が大きいためシステム誤差としてのカイラル対称性の破れであると考えられる。



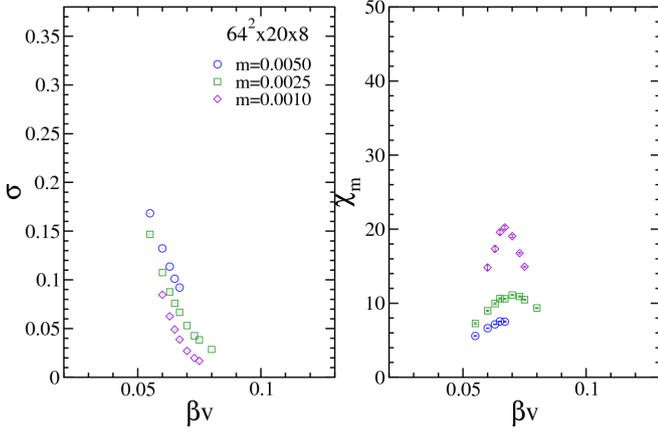


図 1: カイラル凝縮(左)とカイラル感受率(右)の結合定数依存性。上図は $40^2 \times 20$ 、下図は $64^2 \times 20$ の格子サイズである。ここでは $v=0.1$ の結果。異なるシンボルは質量の違いを表す。

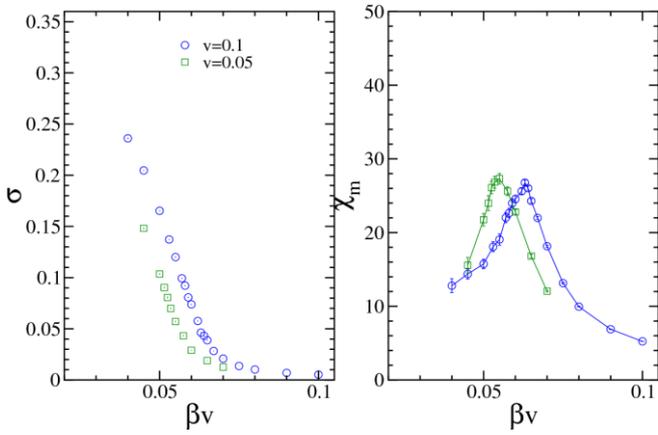


図 2: カイラル凝縮(左)とカイラル感受率(右)の結合定数依存性。異なるシンボルは異なる v の結果を表す。

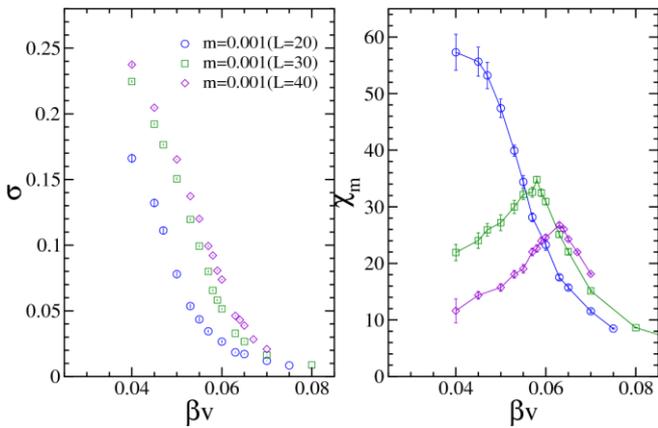


図 3: カイラル凝縮及びカイラル感受率の格子サイズ依存性。 $m=0.001$ の結果を表す。

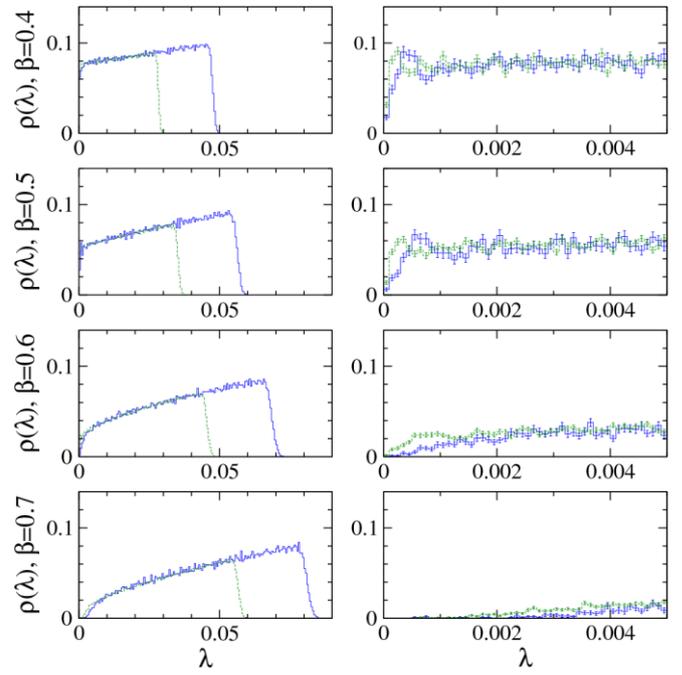


図 4: スペクトル密度の結合定数依存性。上は強結合、下は弱結合領域を表す。低固有値の数は 75。左は全体図、右は低固有値領域の拡大図を示す。青色の実線は空間体積 30^2 格子、緑色の波線は 40^2 格子。

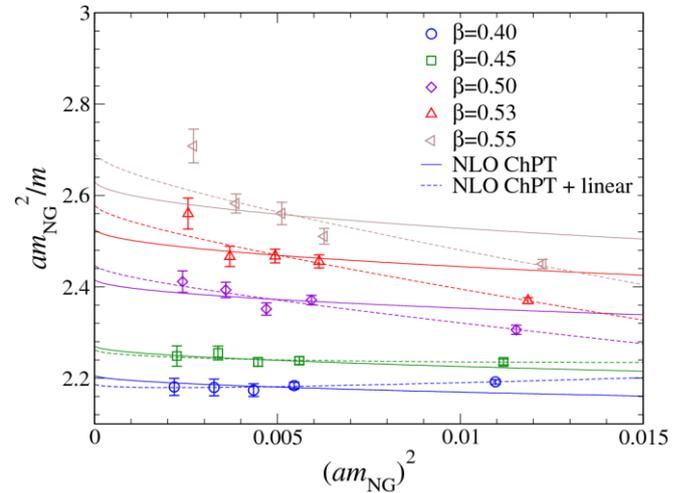
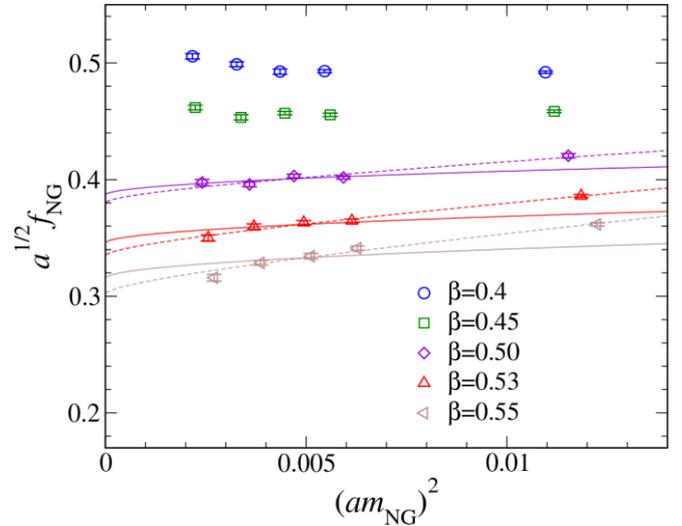


図 5: (上図) 南部ゴールドストーンボジンの振幅と

2乗質量との関係。(下図)南部ゴールドストーンボゾンの2乗質量と擬フェルミオン質量との比。結合定数の違いはシンボルの違いとして表している。実線はフィット範囲を $0.001 \leq m \leq 0.0025$ として1パラメータでフィットした結果、波線は $0.001 \leq m \leq 0.005$ として2パラメータでフィットした結果。

4. まとめ

この研究結果から3次元に拘束されたフェルミオンを持つ格子QEDモデルにおいて、カイラル対称性の自発的破れが起こっていることが厳密に分かった。またその臨界点として結合定数は $\alpha=1.3$ 近傍という強結合領域であることも興味深い。カイラル摂動論の議論から結合定数が臨界点近傍では連続理論から導かれるフィット関数でデータ点を記述できるが、あまり強結合領域にすると一致がよくない。これは、格子間隔が大きくなることによる系統誤差の影響が大きいと考えられる。

5. 今後の計画・展望

今後の研究計画として、物理スケールの決定を行っていききたい。そのためには、幾つかの格子サイズを用いた有限スケールリング則を確かめることは重要である。また、速度パラメータを更に2点追加して、量子化効果による繰り込み群の議論も進めていきたい。また、強結合領域における格子間隔誤差の大きさを評価することも今後の課題である。

6. 利用がなかった場合の理由

今年度はスケール依存性をみるために大きな格子サイズの計算を進めてきたが、計算効率を上げるためにプログラムのチューニングに時間をかけたため、十分な計算時間を消費できなかった。

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

なし

【国際会議などの予稿集、proceeding】

なし

【国際会議、学会などでの口頭発表】

なし

【その他】

M. Hirotsu, T. Onogi and E. Shintani, “Position space formulation for Dirac fermions on honeycomb lattice”, arXiv:1303.2886[hep-lat]