

課題名 (タイトル) :

## 格子理論を用いたグラフェン相転移の研究

利用者氏名 : 新谷栄悟

所属 : 和光研究所 仁科加速器センター 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

本課題では、グラフェンと呼ばれる、炭素原子が六角格子状の2次元シートに配置された物性の性質について、モンテカルロ積分を用いた新しい手法で調べることを目的としている。最近のグラフェンシートの製造方法の開発によって、この物質の特質的な側面が様々な形で発見されてきている。その一つとして、グラフェン内の電子移動度が他の物質と比べて非常に高く、かつ温度変化に対して非常に安定的であることがあげられる。例えばシリコンとの比較でいえば、室内における電子移動度は約10倍ほどである。このことは、少ない電圧で高速に電子を移動させることができるため、次世代の半導体素材として期待が高まっている。ただし、半導体応用としてグラフェンを考えたとき、その物性特性にまだ解明されていない問題点が残っている。ここで注目する問題は、グラフェンにおける温度変化によって生じる絶縁体相転移(モット転移)である。ここでの絶縁体相転移は温度変化によってエネルギーギャップが生成されて絶縁体に移っていくかを考えるのだが、グラフェンの絶縁体相転移点は実験的にはよくわかっていないのが現状である。相転移点を理論的に予想してグラフェン素材の物性を解明していくことがここでの課題である。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

グラフェンを構成する隣り合った3つの炭素原子間は共有結合で強く結合している。従って残る価電子は原子間を自由に動くことができる。ハミルトニアンを最近接強結合近似を用いて記述すると、ハニカム形状という特質から波数空間において、ゼロエネルギー点ハニカム状に現れる。この点をディラック点と呼ぶ。ディラック点近傍でハミルトニアンを展開すると、波数ベクトルに線形かつ3次元ディラック行列に比例した形として記述できる。これはグラフェン上の電子が質量ゼロディラック粒子として振る舞うことを示唆している。実際に実験結果をもとにバンド構造を解析す

ると、相対論的粒子が満たす分散関係式が現れる。その係数は光速とは約 $1/300$ だけ異なるフェルミ速度である。これは、グラフェンの電子と電子の相互作用を3次元のQED相互作用として記述でき、さらに非常に強く結合していることを意味している。つまり、グラフェンは3次元強結合QEDモデルによって解析可能であると考えられる。以上の考察から、強結合QEDの物理系に対して第一原理計算を行って、強結合QEDと実際のグラフェン系における振舞を比較する。QEDをモンテカルロ積分するために、核力相互作用を記述するQCDの解析に用いられる格子QCDの手法を用いることにする。格子QCDと同様に空間を(この場合3次元空間)格子状に分割して重点サンプリングを行う。ここで、重みとして用いる作用としてゲージ対称性を満たす一般形を用いる。ただし、通常のQEDと異なりフェルミ速度は光速とは異なるため、その部分を反映するために、電場と磁場の運動項について異なった結合定数を設定する。この形は少なくともtreeのオーダーではフェルミオンの運動項にフェルミ速度を入れた形と等価である。

今年度では、格子サイズ $20^3 \times 20$ として、フェルミ速度を0.1にセットしてモンテカルロ計算を行い、カイラル凝縮の結合定数依存性を調べた。絶縁体相転移現象は3次元QEDモデルにおいてはカイラル対称性の自発的対称性の破れとして表させる。つまりカイラル対称性が破れて質量ギャップが生じることが、グラフェンでいうところのエネルギーギャップが生じることに対応している。カイラル凝縮はオーダーパラメータであり、質量ゼロの極限において有限値を持つかどうかでカイラル対称性が破れているか調べることができる。

## 3. 結果

図1の左図に様々な質量におけるカイラル凝縮の振舞を示してある。これを見ると、 $\beta=0.5$ 付近にカイラル対称性の破れに特有の跳びに近い振舞を示している。このことを詳細に見るために、右図に質量変化で微分

したカイラル感受率をプロットした。これを見ると分かるように、質量がゼロに近づくほど  $\beta=0.5$  付近のピークが急になっている。この結果から質量ゼロにおいて  $\beta=0.5$  付近を境にしてカイラル凝縮の値が有限で残るのであると予想される。この結果はまだ統計精度が足りていないため、臨界点の位置や、臨界指数を決めることは困難であるが、臨界現象を示す有望な結果である。

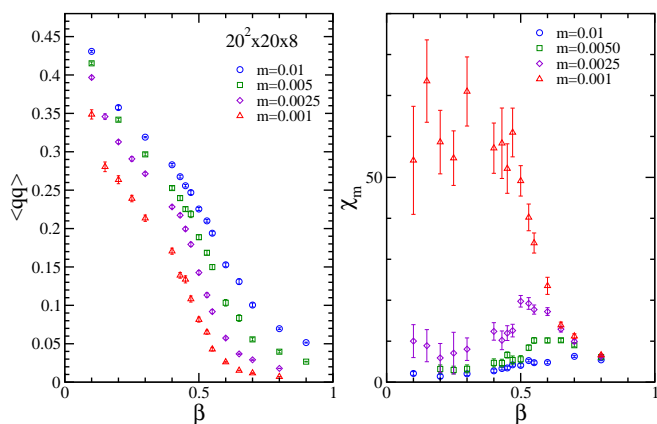


図 1 (左図) カイラル凝縮の結合定数依存性、(右図) カイラル感受率の結合定数依存性。

#### 4. まとめ

本研究では、ゲージ不変性を保ちつつフェルミ速度を導入した新しい 3 次元 QED 作用の下でモンテカルロ計算を行い、強結合におけるカイラル凝縮の結合定数依存性を計算した。その結果  $\beta = 0.5$  付近において臨界点に近い振舞を示した。

#### 5. 今後の計画・展望

まず、統計量をさらに上げて臨界点および臨界指数を決定する計画である。これらを求めるために状態方程式を立ててフィッティングを行う必要がある。また、空間サイズを大きくしていき、空間サイズ効果や有限体積法を用いた臨界次元の決定を行いたい。

#### 6. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

計算プログラムのチェックに時間を要しかつ、ジョブの待ち時間も予想以上に多かったため。

#### 8. 利用研究成果がなかった理由

調べるパラメータが多いため計算時間が必要であったが、計算実行に移れなかったため。