

課題名 (タイトル) :

## 格子計算を用いた素粒子現象論の研究

利用者氏名 : 新谷栄悟

所属 : 理研 BNL 研究センター計算物理研究グループ

## 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上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と大体  $1/300$  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  $1/300$  という事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、ハニカム格子を再現した格子上の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実際に起こりうるのか、もしくは現実的には起こり得ないのかを詳細に調べることを目的とする。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を目指す。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

まず、ハニカム格子上のハミルトニアンが実際に相対論的ディラックフェルミオンとしてどのように振る舞うべきかを調べるために、最近接祖語作用のみを考慮した近似について考える。グラフェン上の原子上に位置する価電子間の相互作用として、スピン間相互作用および光子間相互作用を無視した第一近似の下で、座標空間を成分を持ったままの形でハミルトニアンを書き下したのち、その運動方程式を導いたところ、格子 QCD でよく知られている staggered フェルミオンと呼ばれるフェルミオン形式とよく似た形が導かれた。このときのフェルミオンは空間 2 次元に束縛されている、4成分スピノールをもった形を保っている。このア

ナロジーから、実際のハニカム格子上においても、フェルミオンダブリングと呼ばれる意図しないゼロモードの存在を排除できると共に、カイラル対称性をフェルミオンがもつ自由度として内包していることを明示的に示すことができました。このハニカム格子上におけるフェルミオン形式の開発は今後の数値計算を進めるにあたる基礎である。

#### 4. まとめ

本研究では、グラフェンにおける電子の運動および相互作用による特異的な物性特性の解明に向けた新しいフェルミオン形式の開発を行った。ここで開発したフェルミオン形式は相互作用が入っていない第一近似であるが、格子 QCD における staggered フェルミオン形式とのアナロジーから、カイラル対称の保証と数値計算の実行可能性を含んでいる。とくに、座標空間上のハミルトニアンを明示できたことは、格子計算を行う上で重要である。

#### 5. 今後の計画・展望

今後の方針としては、まず摂動論をもとにしたカイラル対称性の破れと繰り込み群の手法を用いた、結合定数のスケールリングを調べる予定である。また、同時にここで開発した形式をもとにした数値計算のアルゴリズム開発とプログラムコードの開発を進めていきたい。

#### 6. 利用がなかった場合の理由

本年度ではとくに基礎的部分の開発に時間を費やしたため、利用をすることはなかった。

平成 26 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】**

Masaki Hirotsu, Tetsuya Onogi, Eigo Shintani, “Position space formulation for Dirac fermions on honeycomb lattice”, Nucl. Phys. B885, 61 (2014).

**【国際会議、学会などでの口頭発表】**

招待講演

発表者：大野木哲也「Hidden exact symmetry in graphene」国際会議 Lattice2014, 23-28 June 2014, Columbia University