

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)»

КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ АСТРОФИЗИКИ И КВАНТОВОЙ  
ТЕОРИИ ПОЛЯ

## **Свойства дираковских полуметаллов и их решёточное моделирование**

(выпускная квалификационная работа бакалавра)

**Выполнил:**  
студент 221 группы  
Алексей Дмитриевич Сыромятников

**Научный руководитель:**  
д.ф.-м.н., Брагута В.В.

Долгопрудный  
2016

# Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Графен и дираковские полуметаллы</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Теория на решётке</b>	<b>7</b>
3.1	Калибровочные поля . . . . .	7
3.2	Фермионные поля . . . . .	10
3.3	Решёточные действия для графена и дираковских полуметаллов . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Численные методы</b>	<b>14</b>
4.1	Бозонные поля . . . . .	14
4.2	Фермионные поля . . . . .	16
<b>5</b>	<b>Результаты</b>	<b>18</b>
<b>6</b>	<b>Заключение</b>	<b>19</b>

# 1 Введение

Чаще всего спектр возбуждений в металлах или полупроводниках хорошо описывается параболическим законом дисперсии для электронов и дырок. На этом фоне очень занятными являются материалы, получившие название ”дираковские полуметаллы”. Дираковские полуметаллы – это полупроводники с нулевой запрещённой зоной, в которых квазичастицы имеют линейный закон дисперсии, то есть представляют собой безмассовые фермионы. Одним из самых известных представителей этого класса материалов является графен – двумерный кристалл, состоящий из атомов углерода, образующих гексагональную решётку. Не так давно были обнаружены и трёхмерные дираковские полуметаллы, а именно  $\text{Na}_3\text{Bi}$  ([3], [4]) и  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  ([5], [6]). Также было показано, что  $\text{TaAs}$  демонстрирует свойства вейлевского полуметалла ([7]) (у вейлевских полуметаллов ферми-точки с квазичастицами разной киральности разнесены в импульсном пространстве, в отличие от дираковских полуметаллов).

Другие интересные свойства этих объектов вытекают из относительной малости скорости Ферми (в графене, например,  $v_F \sim \frac{c}{300}$ ). Следствием этой малости является величина эффективной константы взаимодействия, в том же графене она составляет  $\alpha_{eff} \sim \alpha \cdot \frac{c}{v_F} \sim \frac{300}{137} \sim 2$ , а это, в свою очередь, означает, что взаимодействие будет сильным.

В этой работе на примере исследования свойств дираковских полуметаллов мы собираемся описать методы решёточного моделирования, которые уже успешно себя зарекомендовали. Решёточное моделирование является очень мощным и перспективным подходом, позволяющим эффективно изучать разнообразные физические системы, в том числе системы с сильной связью, которые, как известно, трудно исследуемы аналитически.

Работа имеет следующую структуру. Глава 2 содержит основную информацию о графене и дираковских полуметаллах. В главе 3 будет дано краткое введение в решёточную теорию поля, будут описаны используемые методы дискретизации калибровочных и фермионных полей. Глава 4 содержит описание численных методов и алгоритмов, применяемых для расчёта наблюдаемых. В параграфе 3.3 приведён важный практический результат – решёточное действие для графена и дираковских полуметаллов с использованием staggered-фермионов. В главе 5 приведены результаты, полученные решёточным моделированием, а также их обсуждение.

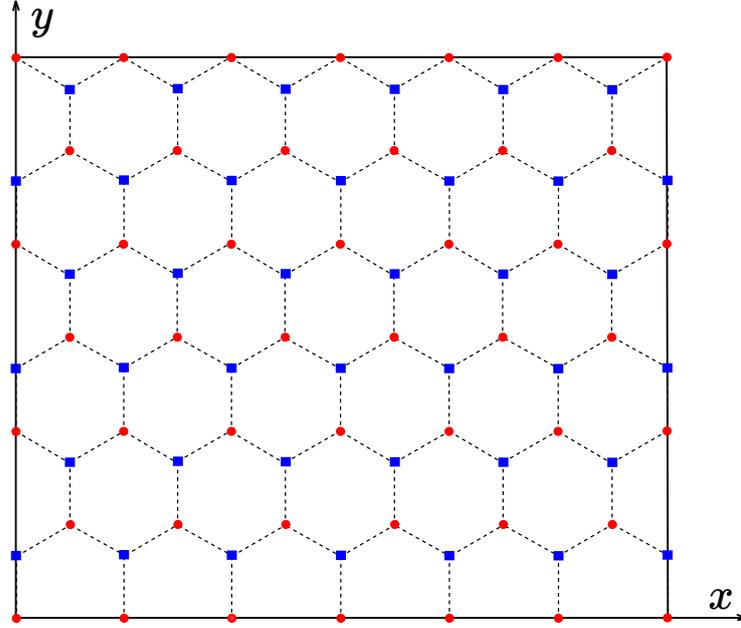


Рис. 1: Кристаллическая решётка графена. Узлы, отвечающие одной и той же подрешётке, выделены одинаковыми цветом и формой.

## 2 Графен и дираковские полуметаллы

Уникальные электронные свойства графена обусловлены кристаллической структурой материала и хорошо описываются следующим гамильтонианом

$$H = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\langle i,j \rangle} \left( a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j} + a_{\sigma,j}^\dagger a_{\sigma,i} \right) \quad (2.1)$$

где оператор  $a_{\sigma,i}^\dagger$  ( $a_{\sigma,i}$ ) рождает (уничтожает) электрон со спином  $\sigma$  на узле  $i$ , а выражение  $\langle i,j \rangle$  обозначает пару вершин  $i, j$ , являющихся соседями по кристаллической решётке. На рисунке 1 такие узлы соединяют пунктирные линии. Легко видеть, что такой гамильтониан отвечает приближению сильной связи, при котором электрон, не участвующий в формировании кристаллической решётки (то есть живущий на единственной негибридной  $p$ -орбитали атома углерода), локализован на своём атоме и лишь с небольшой вероятностью может перейти на другой ближайший атом. Как уже было отмечено, этот гамильтониан описывает взаимодействие только между ближайшими соседями, но ничего не мешает добавить члены с соответствующей константой связи  $t'$ , отвечающие взаимодействию с узлами, следующими за ближайшими. Константы связи  $t$  и  $t'$ , наиболее удачно соотносящиеся с экспериментальными данными, были посчитаны в работе [8] и составляют 2.8 эВ и 0.1 эВ соответственно.

Для исследования свойств графена, обусловленных низкоэнергетическими возбуждениями, удобнее будет использовать эффективную теорию

со следующим евклидовым действием

$$S = \sum_{f=1}^{N_f} \int d^3x \bar{\psi}_f [\gamma_0(\partial_0 + iA_0) + \gamma_j \partial_j] \psi_f + \frac{\beta}{2} \int d^4x (\partial_i A_0)^2, \quad j = 1, 2 \quad (2.2)$$

где  $\gamma_\mu$  есть гамма-матрицы 4x4, удовлетворяющие тождеству  $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}$ ,  $\psi_f$  – четырёхкомпонентный спинор аромата  $f$ , живущий в плоскости листа графена,  $N_f$  – число ароматов (равно 2 для однослойного графена). Константа  $\beta$ , определяющая силу взаимодействия, равняется

$$\beta = \frac{v_F \varepsilon}{e^2} \quad (2.3)$$

где  $e$  – заряд электрона, а  $\varepsilon$  – эффективная диэлектрическая проницаемость среды. Аналогично, эффективная константа взаимодействия  $\alpha_{eff}$  равняется

$$\alpha_{eff} = \alpha \frac{c}{v_F \varepsilon} \quad (2.4)$$

В случае подвешенного графена диэлектрическая проницаемость равна единице, а  $\alpha_{eff} \sim 2$ .

Стоит сделать небольшое отступление и прояснить переход от гамильтониана 2.1 к действию 2.2.

Для начала найдём спектр гамильтониана. Мы имеем ортонормированный базис из волновых функций  $a_i|0\rangle$  (опустим спиновый индекс и будем считать, что  $\sigma = \uparrow$ , другой случай рассматривается аналогично). Перейдём к новому ортонормированному базису из следующих функций

$$\begin{aligned} k_A|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i \in A} e^{ik \cdot r_i} a_i|0\rangle \\ k_B|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i \in B} e^{ik \cdot r_i} a_i|0\rangle \end{aligned} \quad (2.5)$$

где  $N$  – количество элементарных ячеек в кристалле (в два раза меньше числа атомов в кристалле), индексы  $A$  и  $B$  обозначают конкретную подрешётку. Заметим, что  $Hk_B \sim k_A$ ,  $Hk_A \sim k_B$ , а это значит, что матричные элементы, взятые для функций, отвечающих одной и той же подрешётке, равны нулю. Также зануляются матричные элементы для функций с разными значениями волнового вектора  $k$ . Ненулевыми же будут выражения следующего вида

$$\begin{aligned} \langle 0|k_B^\dagger Hk_A|0\rangle &= -t \frac{1}{N} \sum_{\langle l,j \rangle, l \in A, j \in B} e^{ik \cdot (r_l - r_j)} = \\ &= -t \sum_{\rho} e^{ik \cdot \rho} = -t \left( 2 \exp\left(\frac{ik_x a}{2}\right) \cos \frac{k_y a \sqrt{3}}{2} + \exp(-ik_x a) \right) \end{aligned} \quad (2.6)$$

где  $a$  – расстояние между ближайшими атомами,  $\rho$  – радиус-векторы соседей узла подрешётки  $A$  относительно этого узла. Рассмотрим матрицу  $2 \times 2$ , отвечающую за блок гамильтониана  $H$ , связанный с волновым вектором  $k$

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & \langle 0|k_B^\dagger H k_A|0\rangle \\ \langle 0|k_A^\dagger H k_B|0\rangle & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Теперь очевидно, что дисперсия есть

$$E(k) = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{3}k_x a\right)} \quad (2.8)$$

Заметим, что это выражение обращается в нуль в вершинах гексагональной зоны Бриллюэна. Вершин всего шесть, но уникальных из них всего две (другие получаются смещением на вектор обратной решётки). Векторы, отвечающие этим вершинам, есть

$$\begin{aligned} K' &= \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \\ K &= \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \end{aligned} \quad (2.9)$$

В окрестности этих точек дисперсия принимает следующий вид

$$E(q) = \frac{3}{2}at|q| = v_f|q|, \quad v_f \approx \frac{c}{300} \quad (2.10)$$

где  $q = k - K$  ( $q = k - K'$ ). Таким образом, в спектре графена есть две уникальные дираковские точки.

Теперь можно перейти к непрерывному низкоэнергетическому действию и записать

$$\begin{aligned} S &= \sum_{f=1}^{N_f} \int d^3x \bar{\psi}_f [\gamma_0(\partial_0 + iA_0) + \gamma_j(v_F\partial_j + iA_j)] \psi_f \\ &+ \frac{\varepsilon}{4e^2} \int d^4x F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}, \quad j = 1, 2 \end{aligned} \quad (2.11)$$

которое после преобразования  $t \rightarrow \frac{t}{v_F}$ ,  $A_0 \rightarrow A_0 v_F$  переходит в

$$\begin{aligned} S &= \sum_{f=1}^{N_f} \int d^3x \bar{\psi}_f \left[ \gamma_0(\partial_0 + iA_0) + \gamma_j \left( \partial_j + \frac{i}{v_F} A_j \right) \right] \psi_f \\ &+ \frac{v_F \varepsilon}{2e^2} \int d^4x \left[ (\partial_0 A_j - \partial_j A_0)^2 + \frac{1}{v_F} (\partial_k A_j - \partial_j A_k)^2 \right], \quad j, k = 1, 2 \end{aligned} \quad (2.12)$$

Теперь мы учитываем малость скорости Ферми  $v_F \sim \frac{1}{300}$ , тем самым отбрасывая члены, содержащие вектор-потенциал  $A_i$ , и получаем эффективное действие для графена

$$S = \sum_{f=1}^{N_f} \int d^3x \bar{\psi}_f [\gamma_0(\partial_0 + iA_0) + \gamma_j \partial_j] \psi_f + \frac{\beta}{2} \int d^4x (\partial_i A_0)^2, \quad j = 1, 2 \quad (2.13)$$

Обобщение действия для графена на случай изотропного трёхмерного дираковского полуметалла не составляет труда. Интереснее рассмотреть модель, в которой скорость Ферми  $v_\perp$  вдоль одной из осей отличается от скорости Ферми  $v_\parallel$  вдоль плоскости, перпендикулярной этой оси, что было сделано в работе [2]. В этом случае мы получаем действие

$$S = \sum_{f=1}^{N_f} \int d^4x \bar{\psi}_f [\gamma_0(\partial_0 + iA_0) + \xi_i \gamma_i \partial_i] \psi_f + \frac{\beta}{2} \int d^4x (\partial_i A_0)^2 \quad (2.14)$$

где  $\xi_1 = \xi_2 = 1$ , а  $\xi_3 = \frac{v_\perp}{v_\parallel}$ . Видно, что в такой модели мы можем менять поведение системы изменяя  $\xi_3$ . При  $\xi_3 = 0$  модель будет описывать листы графена, взаимодействующие только благодаря электромагнитному полю и не обменивающиеся электронами, а при  $\xi_3 = 1$  изотропный трёхмерный дираковский полуметалл.

## 3 Теория на решётке

Прежде чем записать решёточную форму для действий, полученных в предыдущей главе, стоит обсудить несколько важных вещей, связанных с переходом от непрерывной теории к дискретной.

### 3.1 Калибровочные поля

Когда мы строим теорию на решётке, мы хотим, чтобы дискретное действие переходило в непрерывное в пределе, когда шаг решётки стремится к нулю. Также мы хотим, чтобы дискретное действие удовлетворяло симметриям, которым удовлетворяет непрерывное. В данном разделе мы сфокусируемся на том, как посадить на решётку калибровочные поля, чтобы действие осталось калибровочно инвариантным.

Если читатель знает про связь между символом Кристоффеля (аффинной связностью) и калибровочными полями, то описанное ниже будет для него простым и естественным (если нет, то про это можно прочитать, например, в параграфе 8.2 [9]). Для ясности напомним следующую вещь. В ОТО, чтобы сравнить два вектора, заданные в разных точках пространства, их нужно передвинуть в одну точку (поместив таким образом в одну

систему координат). Это свойство искривлённого пространства также мотивирует введение понятия ковариантной производной векторного поля  $V^\mu$

$$\nabla_\nu V^\mu = \partial_\nu V^\mu + \Gamma_{\lambda\nu}^\mu V^\lambda \quad (3.1)$$

где  $\Gamma_{\lambda\nu}^\mu$  есть символ Кристоффеля. Сравним это выражение с калибровочно инвариантной производной

$$D_\mu \psi = (\partial_\mu + iT_a A_\mu^a) \psi \quad (3.2)$$

где  $T_a$  есть генераторы группы калибровочной симметрии. Отметив, что роль связности  $\Gamma$  в зарядовом пространстве играет  $T_a A_\mu^a$ , а следовательно, это же слагаемое должно отвечать за приращение поля при его переносе в другую точку пространства, можно построить соответствующий оператор переноса для  $\psi$

$$U(x', x) = \exp \left( \int_x^{x'} iT_a A_\mu^a(y) dy^\mu \right) \quad (3.3)$$

где, во-первых, интеграл берётся вдоль пути от  $x$  к  $x'$ , а во-вторых, производится упорядоченное вдоль траектории экспоненцирование (это необходимо, так как генераторы не обязаны коммутировать). Таким образом, каждому пути от одной точки до другой сопоставляется элемент калибровочной группы. Полученный оператор переноса при калибровочном преобразовании (то есть при повороте локальной системы координат зарядового пространства) изменяется согласно следующему правилу

$$U'(x', x) = W(x') U(x', x) W^{-1}(x) \quad (3.4)$$

где  $W$  – оператор ”поворота” в зарядовом пространстве. При таком законе преобразования оператора переноса скалярное произведение  $\bar{\psi}(x') U(x', x) \psi(x)$  является инвариантом относительно калибровочных преобразований. Также легко показать, что такое правило изменения для оператора переноса влечёт за собой привычный закон преобразования поля  $A_\mu$

$$T_a A_\mu^a = W [T_a A_\mu^a] W^{-1} - i [\partial_\mu W] W^{-1} \quad (3.5)$$

Теперь мы готовы посадить калибровочные поля на решётку и построить дискретную калибровочно инвариантную теорию. Для начала рассмотрим простое фермионное действие без взаимодействия

$$S_f = \int d^4x \bar{\psi} (\gamma_\mu \partial_\mu + m_0) \psi \quad (3.6)$$

и его наивный аналог для решётки (в чём недостатки наивного способа

дискретизации фермионов мы обсудим в следующем параграфе)

$$S_f^{lat} = \sum_{n,m} \bar{\psi}_n D_{n,m} \psi_m \quad (3.7)$$

$$D_{n,m} = \frac{a^3}{2} \sum_{\mu=0}^3 \gamma_\mu (\delta_{n+\hat{\mu},m} - \delta_{n-\hat{\mu},m}) + m_0 a^4 \delta_{n,m}$$

где  $n, m$  – четырёхкомпонентные номера узлов решётки,  $a$  – шаг решётки,  $\hat{\mu}$  – единичный вектор вдоль оси координат  $\mu$  (например,  $\hat{1}$  есть  $(0, 1, 0, 0)$ ). Разностный член в операторе  $D$  образует скалярные произведения полей  $\psi$  с разных узлов. Как мы уже знаем, чтобы такие произведения были калибровочно инвариантными, их нужно модифицировать, добавив оператор переноса  $U$ . Следовательно, оператор  $D$ , включающий в себя взаимодействие, должен выглядеть следующим образом

$$D_{n,m} = \frac{a^3}{2} \sum_{\mu=0}^3 \gamma_\mu [\delta_{n+\hat{\mu},m} U((m - \hat{\mu})a, ma) - \delta_{n-\hat{\mu},m} U((m + \hat{\mu})a, ma)] + m_0 a^4 \delta_{n,m} \quad (3.8)$$

Учтём, что  $U(x, y) = U^{-1}(y, x) = U^\dagger(y, x)$ , и введём следующие обозначения

$$U_{m,\mu} = U((m + \hat{\mu})a, ma) \quad (3.9)$$

$$U_{n,\mu}^\dagger = U((m - \hat{\mu})a, ma)$$

Тогда оператор  $D$  запишется как

$$D_{n,m} = \frac{a^3}{2} \sum_{\mu=0}^3 \gamma_\mu [\delta_{n+\hat{\mu},m} U_{n,\mu}^\dagger - \delta_{n-\hat{\mu},m} U_{m,\mu}] + m_0 a^4 \delta_{n,m} \quad (3.10)$$

Заметим, что  $U_{m,\mu}$  зависит не только от узла  $m$ , но и от направления  $\mu$ , то есть зависит от ребра, соединяющего два определённых узла. По этой причине  $U_{m,\mu}$  также называют "рёберной переменной" (link variable).

Осталось выяснить, как выглядит чисто калибровочный член в решёточном действии. Для начала найдём некоторые калибровочно инвариантные комбинации рёберных переменных. Рассмотрим путь от  $x$  к  $x'$  по рёбрам и соответствующий ему оператор переноса  $U(x', x)$ , получающийся перемножением рёберных переменных вдоль этого пути. Как было отмечено ранее, при калибровочном преобразовании оператор изменяется по закону

$$U'(x', x) = W(x') U(x', x) W^{-1}(x) \quad (3.11)$$

Рассмотрим частный случай, когда  $x = x'$ , то есть траектория замкнута. Тогда

$$U'(x, x) = W(x) U(x, x) W^{-1}(x) \quad (3.12)$$

а  $\text{Tr } U$  преобразуется как

$$\begin{aligned}\text{Tr } U'(x, x) &= \text{Tr} [W(x)U(x, x)W^{-1}(x)] \\ &= \text{Tr} [U(x, x)W^{-1}(x)W(x)] = \text{Tr } U(x, x)\end{aligned}\quad (3.13)$$

то есть является калибровочно инвариантной величиной. Самой простой замкнутой траекторией является так называемый плакет (plaquette) – прямоугольник, состоящий из узлов с номерами  $n, n + \hat{\mu}, n + \hat{\mu} + \hat{\nu}, n + \hat{\nu}$  и ребёр между ними. Величина

$$U_p = U_{n, \mu\nu} = U_{n, \nu}^\dagger U_{n + \hat{\nu}, \mu}^\dagger U_{n + \hat{\mu}, \nu} U_{n, \mu} \quad (3.14)$$

называется ”плакетной переменной”, и на её основе строится вильсоновское  $\text{SU}(N)$  калибровочное действие

$$S_g^{\text{lat}} = \sum_p \beta (N - \Re \text{Tr } U_p) \quad (3.15)$$

где каждый плакет считается только один раз и только в одном направлении обхода. Раскладываясь по шагу решётки  $a$ , можно показать, что

$$S_g^{\text{lat}} = \frac{\beta}{4} \sum_x a^4 F_{\mu\nu}^b F_{\mu\nu}^b + \mathcal{O}(a^5) \quad (3.16)$$

то есть с точностью до  $a^5$  воспроизводит действие Янга-Миллса.

## 3.2 Фермионные поля

В предыдущем параграфе мы уже ввели наивное фермионное решёточное действие

$$\begin{aligned}S_f^{\text{lat}} &= \sum_{n, m} \bar{\psi}_n D_{n, m} \psi_m \\ D_{n, m} &= \frac{a^3}{2} \sum_{\mu=0}^3 \gamma_\mu (\delta_{n + \hat{\mu}, m} - \delta_{n - \hat{\mu}, m}) + m_0 a^4 \delta_{n, m}\end{aligned}\quad (3.17)$$

как дискретный аналог для

$$S_f = \int d^4x \bar{\psi} (\gamma_\mu \partial_\mu + m_0) \psi \quad (3.18)$$

и отметили, что у такого способа дискретизации существуют определённые недостатки. Пришло время подробнее остановиться на этом вопросе.

Перейдём в импульсное пространство, произведя преобразование Фурье

$$\psi_n = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{ik \cdot n} \psi(k) \quad (3.19)$$

где интеграл берётся по одной зоне Бриллюэна (то есть  $-\frac{\pi}{a} < k_\mu \leq \frac{\pi}{a}$  для каждого  $\mu$ ). После подстановки преобразования Фурье поля  $\psi$  в решёточное действие, получим импульсную его форму

$$S = \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \bar{\psi}(-k) \left[ \frac{i}{a} \gamma_\mu \sin(ak^\mu) + m_0 \right] \psi(k) \quad (3.20)$$

и следовательно, пропагатор свободного поля есть

$$\frac{1}{a} S(k_\mu) = [i\gamma_\mu \sin(ak^\mu) + am_0]^{-1} = \frac{-i\gamma_\mu \sin(ak^\mu) + am_0}{\sum_\mu \sin^2(ak_\mu) + a^2 m_0^2} \quad (3.21)$$

а дисперсионное соотношение

$$E(k) = \frac{1}{a^2} \sum_\mu \sin^2(ak_\mu) + m_0^2 \quad (3.22)$$

В окрестности  $k_\mu = (0, 0, 0, 0)$  дисперсия имеет минимум и совпадает с непрерывным вариантом  $k^2 + m_0^2$ . Но в то же время из-за периодичности  $\sin$  она ведётся себя точно так же в окрестности ещё пятнадцати точек  $\{(\pi, 0, 0, 0), (0, \pi, 0, 0), \dots\}$ . Это означает, что в решёточной теории помимо обычного фермиона существуют ещё 15 дублей (для случая произвольной размерности будет всего  $2^D$  фермионов). Один из вариантов избавиться от дублей предложил Вильсон. Этот способ предполагает добавку к действию члена, не влияющего на непрерывный предел, но придающего всем дублям бесконечную массу ( $\sim \frac{1}{a}$ ). Недостатком такого подхода является отсутствие у полученного действия киральной симметрии (легко видеть, что наивное действие инвариантно относительно глобального кирального преобразования  $\psi' = e^{i\alpha\gamma_5}\psi, \bar{\psi}' = \bar{\psi}e^{i\alpha\gamma_5}$ , когда масса  $m_0 = 0$ ).

Рассмотрим следующий способ, который позволит нам сократить число фермионов до четырёх и сохранить киральную симметрию. Рассмотрим дискретное наивное фермионное действие с калибровочным полем

$$S_f^{lat} = \sum_{n,m} \bar{\psi}_n D_{n,m} \psi_m \quad (3.23)$$

$$D_{n,m} = \frac{a^3}{2} \sum_{\mu=0}^3 \gamma_\mu [\delta_{n+\hat{\mu},m} U_{n,\mu}^\dagger - \delta_{n-\hat{\mu},m} U_{m,\mu}] + m_0 a^4 \delta_{n,m}$$

и произведём следующие преобразование, которое именуется спиновой диагонализацией ("spin-diagonalization") или преобразованием Кавамото-Смита ("Kawamoto-Smit")

$$\begin{aligned} \psi_n &= \Omega_n \psi'_n \\ \bar{\psi}_n &= \bar{\psi}'_n \Omega_n^\dagger \\ \Omega_n &= \gamma_0^{n_0} \gamma_1^{n_1} \gamma_2^{n_2} \gamma_3^{n_3} \end{aligned} \quad (3.24)$$

Используя тождество

$$\Omega_n^\dagger \gamma_\mu \Omega_{n+\hat{\mu}} = (-1)^{n_0+\dots+n_{\mu-1}} = \alpha_\mu(n) \quad (3.25)$$

получим

$$\begin{aligned} S_f^{lat} &= \sum_{n,m} \bar{\psi}'_n K_{n,m} \psi'_m \\ K_{n,m} &= \frac{a^3}{2} \sum_{\mu=0}^3 \alpha_\mu(n) [\delta_{n+\hat{\mu},m} U_{n,\mu}^\dagger - \delta_{n-\hat{\mu},m} U_{m,\mu}] + m_0 a^4 \delta_{n,m} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Таким образом мы добились того, что спинорные компоненты поля  $\psi'$  распепились. Все четыре компоненты  $\psi'$  взаимодействуют независимо и одинаковым образом. Это позволяет сократить имеющиеся степени свободы в четыре раза (а вместе с тем и число дублей), рассматривая только одну конкретную компоненту  $\chi$ . Мы приходим к следующему действию

$$\begin{aligned} S_\chi^{lat} &= \sum_{n,m} \bar{\chi}_n K_{n,m} \chi_m \\ K_{n,m} &= \frac{a^3}{2} \sum_{\mu=0}^3 \alpha_\mu(n) [\delta_{n+\hat{\mu},m} U_{n,\mu}^\dagger - \delta_{n-\hat{\mu},m} U_{m,\mu}] + m_0 a^4 \delta_{n,m} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Поле  $\chi$  называется полем staggered-фермионов, а остаточные дубли – taste'ами (по аналогии с flavor'ами). При  $m_0 = 0$  staggered-действие обладает остаточной киральной симметрией, то есть инвариантно относительно следующих преобразований

$$\begin{aligned} \chi_n &= e^{i\alpha\Gamma_{5n}} \chi'_n \\ \bar{\chi}_n &= \bar{\chi}'_n e^{i\alpha\Gamma_{5n}} \\ \Gamma_{5n} &= (-1)^{|n|+1} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Стоит заметить, что все четыре taste'a staggered-фермионов абсолютно одинаковые, и мы не можем придать им, например, разные массы. Поэтому, чтобы моделировать физическую систему с одним фермионом, придётся применить некоторые ухищрения, про которые будет сказано в следующей главе. Однако, в случае  $D = 2 + 1$  существует всего два taste'a, что совпадает с числом ароматов в однослойном графене. Это свойство позволяет просто и эффективно использовать staggered-фермионы для моделирования графена.

### 3.3 Решёточные действия для графена и дираковских полуметаллов

Теперь мы готовы записать решёточные действия для графена и дираковских полуметаллов. Начнём с калибровочной части, одинаковой для двух

случаев. Как мы помним, действие для  $SU(N)$  на решётке записывается как

$$S_g^{lat} = \sum_p \beta (N - \Re \text{Tr} U_p) \quad (3.29)$$

Для  $U(1)$ , отвечающего электромагнетизму, будем иметь

$$S_g^{lat} = \sum_p \beta (1 - \Re U_p) \quad (3.30)$$

Калибровочная часть действия для графена и дираковских полуметаллов

$$S_g = \frac{\beta}{2} \int d^4x (\partial_i A_0)^2 \quad (3.31)$$

зависит только от  $A_0$ , другие компоненты вектор-потенциала нулевые. Поэтому решёточное действие принимает вид

$$\begin{aligned} S_g^{lat} &= \beta \sum_n \left( 3 - \sum_{i=1}^3 \Re(U_n^\dagger U_{n+\hat{i}}) \right) \\ &= \beta \sum_n \left( 3 - \sum_{i=1}^3 \cos(\theta_{n+\hat{i}} - \theta_n) \right) \end{aligned} \quad (3.32)$$

где были введены новые обозначения

$$U_n = U_{n,0} = \exp(iA_0(na)a) = \exp(i\theta_n) \quad (3.33)$$

Выражение 3.32 отвечает компактной формулировке, тогда как чаще всего при моделировании используется некомпактная, получающаяся разложением по  $\theta$  до второго порядка малости

$$S_{noncompact}^{lat} = \frac{\beta}{2} \sum_n \sum_1^3 (\theta_{n+\hat{i}} - \theta_n)^2 \quad (3.34)$$

Перейдём теперь к фермионной части. Для анизотропных дираковских полуметаллов оператор  $K$  для одного flavor'a будет выглядеть следующим образом

$$K_{n,m} = \frac{a^3}{2} \left[ \delta_{n+\hat{0},m} U_n^\dagger - \delta_{n-\hat{0},m} U_m + \sum_{i=1}^3 \alpha_i(n) \xi_i \left[ \delta_{n+\hat{i},m} - \delta_{n-\hat{i},m} \right] \right] + m_0 a^4 \delta_{n,m} \quad (3.35)$$

а для графена

$$K_{n,m} = \frac{a^3}{2} \left[ \delta_{n+\hat{0},m} U_n^\dagger - \delta_{n-\hat{0},m} U_m + \sum_{i=1}^2 \alpha_i(n) \left[ \delta_{n+\hat{i},m} - \delta_{n-\hat{i},m} \right] \right] + m_0 a^4 \delta_{n,m} \quad (3.36)$$

Массовый член был введён искусственно, так как он необходим для проведения численных расчётов. Значения наблюдаемых, соответствующие графену и дираковским полуметаллам, получаются экстраполяцией к нулю из данных, посчитанных для разных значений  $m_0$ .

## 4 Численные методы

### 4.1 Бозонные поля

Рассмотрим сначала для простоты теорию скалярного поля  $\phi$ . Напомним, что наблюдаемое значение оператора  $\mathcal{O}$  вычисляется с помощью функционального интеграла как

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{O} \rangle &= \frac{1}{Z} \int D\phi \mathcal{O}(\phi) \exp(-S(\phi)) \\ Z &= \int D\phi \exp(-S(\phi))\end{aligned}\tag{4.1}$$

Интеграл по траекториям очень просто переносится на решётки и принимает вид

$$Z = \int [d\phi] \exp(-S(\phi))\tag{4.2}$$

где  $[d\phi] = \prod_n d\phi_n$ . Величину  $[d\phi] \exp(-S(\phi))$  можно интерпретировать как вероятностную меру, тогда, если получить большую выборку  $\phi^k$ , подчиняющуюся

$$P(\phi) \sim \exp(-S(\phi))\tag{4.3}$$

среднее значение оператора можно приблизить средним по выборке

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}(\phi^i)\tag{4.4}$$

Методы Монте Карло как раз призваны генерировать выборки, соответствующие заданным вероятностным распределениям. Одним из таких методов является алгоритм Метрополиса, который состоит в следующем. Пусть на вход шага  $k$  подана конфигурация поля  $\phi^k$ . Пусть каким-либо образом на шаге  $k$  получена конфигурация  $\phi'$ . Тогда если

1.  $S(\phi') < S(\phi^k)$ , то  $\phi'$  принимается как новая конфигурация  $\phi^{k+1}$ , и начинается новый шаг алгоритма
2.  $S(\phi') > S(\phi^k)$ , то  $\phi'$  принимается за новую конфигурацию с вероятностью  $\exp(S(\phi^k) - S(\phi'))$  и алгоритм переходит к следующему шагу, иначе повторяется текущий.

При таком подходе вероятности перехода от одной конфигурации к другой подчиняются соотношению детального баланса, а именно

$$\frac{P(\phi' \leftarrow \phi)}{P(\phi \leftarrow \phi')} = \frac{\exp(-S(\phi'))}{\exp(-S(\phi))} \quad (4.5)$$

Это условие является достаточным, чтобы генерируемая выборка подчинялась искомому вероятностному распределению.

Альтернативным подходом является метод, получивший название "молекулярная динамика". Его суть заключается в следующем. Введём искусственный импульс  $\pi_n$ , сопряженный  $\phi_n$ , и рассмотрим гамильтониан у такой системы

$$H(\pi, \phi) = \sum_n \frac{\pi_n^2}{2} + S(\phi) \quad (4.6)$$

Эволюция системы в течение фиктивного времени  $\tau$ , задаваемая таким гамильтонианом, выражается с помощью известных уравнений

$$\begin{aligned} \dot{\phi}_n &= \pi_n \\ \dot{\pi}_n &= -\frac{\partial S}{\partial \phi_n} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Статсумма, соответствующая гамильтониану, есть

$$Z = \int [d\pi][d\phi] \exp(-H(\pi, \phi)) \quad (4.8)$$

Легко видеть, что от функционального интеграла, соответствующего  $S(\phi)$ , она отличается лишь численным множителем, получающимся интегрированием по импульсу. Таким образом, если принять эргодическую гипотезу, мы можем получить выборку, соответствующую вероятностному распределению  $\sim \exp(-H(\pi, \phi))$ , идя вдоль классической траектории, задаваемой уравнениями эволюции в течени времени  $\tau$ . Для  $\phi$  же, следовательно, распределение будет  $\sim \exp(-S(\phi))$ , что нам и нужно.

Наиболее популярным и эффективным методом для генерации выборки является гибридный алгоритм Монте Карло (Hybrid Monte Carlo), сочетающий в себе оба вышеописанных подхода. Метод молекулярной динамики достаточно трудоёмок из-за необходимости выбора малого шага интегрирования уравнений эволюции. Однако, молекулярную динамику можно использовать в качестве функции внутри алгоритма Метрополиса, которая генерирует  $\phi'$  по  $\phi^k$ . В таком случае проблема малости шага отпадает, а для метода интегрирования уравнений эволюции необходимо лишь обеспечить инвариантность относительно обращения времени  $\tau$ . Если действие над новой конфигурацией  $S(\phi')$  получилось меньше, то она принимается, а иначе алгоритм возвращается к  $\phi^k$ , но с новой конфигурацией импульса  $\pi$  (выбранной из гауссового распределения).

## 4.2 Фермионные поля

Дискретизация функционального интеграла для бозонных полей не составляла труда, однако иначе обстоит дело с фермионами, которые описываются грассмановыми переменными. Рассмотрим непрерывный интеграл по путям

$$Z = \int [dU][d\bar{\psi}][d\psi] \exp(-S_g(U) - \bar{\psi}D(U)\psi) \quad (4.9)$$

После интегрирования грассмановых переменных остаётся

$$Z = \int [dU] \exp(-S_g(U)) \det D(U) \quad (4.10)$$

Встаёт проблема вычисления детерминанта оператора Дирака. Одним из методов, решающих эту задачу, является введение "псевдофермионных" полей  $\Phi$

$$\det D(U) = \int [d\Phi^* d\Phi] \exp(-\Phi^* D^{-1}(U)\Phi) \quad (4.11)$$

Однако, следует отметить, что детерминант оператора Дирака может принимать отрицательные значения. В этом случае величину  $\exp(-S_g(U)) \det D(U)$  нельзя интерпретировать как вероятностную меру. Эта проблема решается искусственным дублированием фермионов и заменой  $\det D(U)$  на  $\det^2 D(U) = \det [D^\dagger(U)D(U)]$ , что эквивалентно  $D(U) \rightarrow D^\dagger(U)D(U)$ . Детерминант оператора Дирака с использованием staggered-фермионов всегда положителен, тем не менее рассмотренная выше замена полезна и в этом случае, более того, для staggered-фермионов лишнего дублирования можно избежать.

Заметим, что массовый член в staggered-операторе  $K$  связывает узлы одинаковой чётности (even-even, odd-odd), а разностный член – узлы разной чётности (even-odd, odd-even).

$$K = \begin{pmatrix} m_0 & K_{oe} \\ K_{eo} & m_0 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Следовательно, оператор  $D^\dagger(U)D(U)$  для staggered-фермионов будет выглядеть как

$$K^\dagger K = \begin{pmatrix} K_{eo}^\dagger K_{oe} + m_0^2 & 0 \\ 0 & m_0^2 + K_{oe}^\dagger K_{eo} \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Так как оператор  $K_{oe}$  антиэрмитов ( $K_{oe}^\dagger = -K_{eo}$ ). Поэтому, чтобы избавиться от дублирования, достаточно обнулить псевдофермионы на чётных или на нечётных узлах. Очевидно, что таким занулением половины вектора  $\Phi$  мы можем ускорить процесс моделирования, так как эффективные линейные размеры матрицы оператора Дирака также сократятся в два раза.

Другим важным моментом является то, что при замене  $D(U) \rightarrow D^\dagger(U)D(U)$  выражение 4.11 можно интерпретировать как гауссово распределение на  $\Phi$ , что позволяет легко обновлять  $\Phi$  в процессе моделирования методом НМС. НМС с псевдофермионами обновляет в начале траектории MD не только псевдоимпульс  $\pi$ , но и вектор  $\Phi$  (случайно из соответствующего распределения), а в течении итерирования вдоль траектории молекулярной динамики  $\Phi$  считается фиксированным.

Итак, мы пришли к следующему функциональному интегралу с использованием staggered-оператора  $K$

$$Z = \int [dU][d\Phi^*][d\Phi] \exp \left( -S_g(U) - \Phi^* (K^\dagger K)^{-1} \Phi \right) \quad (4.14)$$

Как мы помним, staggered-фермионы дублируются четырёхкратно. Поэтому, чтобы избавиться от дублёров, из детерминанта оператора Дирака нужно извлечь корень четвёртой степени, что приводит к

$$Z = \int [dU][d\Phi^*][d\Phi] \exp \left( -S_g(U) - \Phi^* (K^\dagger K)^{-\frac{1}{4}} \Phi \right) \quad (4.15)$$

Теперь задача свелась к вычислению  $(K^\dagger K)^{-\frac{1}{4}}$ . Одним из способов решения этой проблемы является разложение оператора по рациональным функциям, которое можно выразить как сумму дробей

$$(K^\dagger K)^{-\frac{1}{4}} \approx a_0 + \sum_n \frac{a_n}{K^\dagger K + b_n} \quad (4.16)$$

где  $a_i, b_i$  – определённые константы. Такое разложение является удобным по причине наличия алгоритмов, эффективно решающих совокупность линейных уравнений, различающихся сдвигом (multishift linear equation solver)

$$(A + b)x = y \quad (4.17)$$

В итоге мы приходим к методу моделирования под названием ”рациональный гибридный Монте Карло” (rational hybrid Monte Carlo). Как легко понять из названия, это гибридный Монте Карло, рассмотренный в прошлом параграфе, применённый к следующему интегралу

$$Z = \int [dU][d\Phi^*][d\Phi] \exp \left( -S_g(U) - \Phi^* \left( a_0 + \sum_n \frac{a_n}{K^\dagger K + b_n} \right) \Phi \right) \quad (4.18)$$

Теперь соберём всё вместе и получим следующее описание алгоритма Rational Hybrid Monte Carlo. Пусть на шаге  $k$  есть конфигурация  $U_k$ . Тогда  $U_{k+1}$  получается следующим образом.

1. Псевдоимпульс  $\pi$  инициализируется из стандартного нормального распределения.
2. Псевдофермионы  $\Phi$  инициализируются из нормального распределения с матрицей ковариации  $(K^\dagger K)^{\frac{1}{4}}$  (опять на помощь приходит разложение по рациональным функциям).
3. Происходит интегрирование вдоль траектории молекулярной динамики следуя уравнениям эволюции 4.7. Заметим, что оператор Дирака зависит от глюонных полей, поэтому в производной действия по калибровочному полю появляется вклад фермионного действия (так называемая "фермионная сила").
4. На последнем шаге методом Метрополиса принимается решение о принятии новой конфигурации  $U$  в выборку.

Заметим, что на шаге молекулярной динамики мы можем использовать более грубые методы аппроксимации для работы с псевдофермионами. Во-первых, это даёт прирост к скорости выполнения алгоритма, а во-вторых, это допустимо, так как точность на первом и втором шаге влияет на качество приближения моделируемого вероятностного распределения, а точность молекулярной динамики влияет только на частоту принятия новых конфигураций.

## 5 Результаты

В этой главе мы обсудим результаты исследований графена и дираковских полуметаллов, полученные с использованием методов, описанных ранее.

Начнём с обсуждения результатов работы [1], в которой исследовался фазовый переход полуметалл-диэлектрик в графене в зависимости от константы связи  $\beta$ . В качестве параметра порядка такого перехода выступает киральный конденсат  $\sigma = \langle \bar{\psi}\psi \rangle$ , при этом полуметаллу соответствует случай  $\sigma = 0$ , а диэлектрику  $\sigma \neq 0$ . В работе [1] вычисления проводились для решёток двух разных размеров –  $20^2 \times 20$  и  $28^2 \times 28$ , фотоны также могли распространяться вдоль третьего пространственного измерения, чей размер был равен 8 (было показано, что дальнейшее увеличение размера дополнительного измерения не изменяет получаемые результаты существенным образом). Для моделирования в обоих случаях использовались staggered-фермионы, однако в случае решётки малых размеров применялся алгоритм Метрополиса с пересчётом детерминанта оператора Дирака на каждой итерации, а в другом случае использовался гибридный Монте Карло с псевдофермионами. В результате была получена следующая оценка на

$\beta_c$ , соответствующую фазовому переходу

$$0.071 < \beta_c < 0.091 \quad (5.1)$$

На рисунке 2 представлены графики, наиболее наглядно иллюстрирующие полученные результаты, а именно графики зависимости кирального конденсата  $\sigma$  и восприимчивости  $\chi_l = \frac{\partial \sigma}{\partial m_0}$  от константы связи  $\beta$ .

В статье [2] также исследовался фазовый переход полуметалл-диэлектрик, но для случая анизотропного дираковского полуметалла в пределе сильной связи в зависимости от степени анизотропии. Было получено, что при  $v_{\perp}/v_{\parallel} < 0.24$  киральный конденсат отличен от нуля, что соответствует диэлектрику, а при  $v_{\perp}/v_{\parallel} > 0.24$  киральный конденсат отсутствует (рисунок 3). Значение кирального конденсата  $\sigma \approx 0.24$  в случае  $v_{\perp}/v_{\parallel} = 0$  совпало с полученными ранее значениями  $\sigma$  для графена в пределе сильной связи. Практическая значимость работы [2] состоит в том, что известные на данный момент дираковские металлы анизотропны. Так, например, для  $\text{Na}_3\text{Bi}$   $v_{\perp}/v_{\parallel} \approx 0.25$  [3], а для  $\text{Cd}_3\text{As}_2$   $v_{\perp}/v_{\parallel} \approx 0.1$  [5].

## 6 Заключение

Графен и дираковские полуметаллы безусловно являются интересными объектами для изучения как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения. Поэтому очень важным является тот факт, что их свойства можно успешно изучать при помощи решёточного моделирования, в частности методами, изложенными в этой работе: моделированием дискретного staggered-фермионного действия методом гибридного Монте Карло с псевдофермионами и извлечением корня из детерминанта оператора Дирака. Подробнее про эти и другие методы решёточного моделирования можно узнать из литературы, приведённой в конце работы.

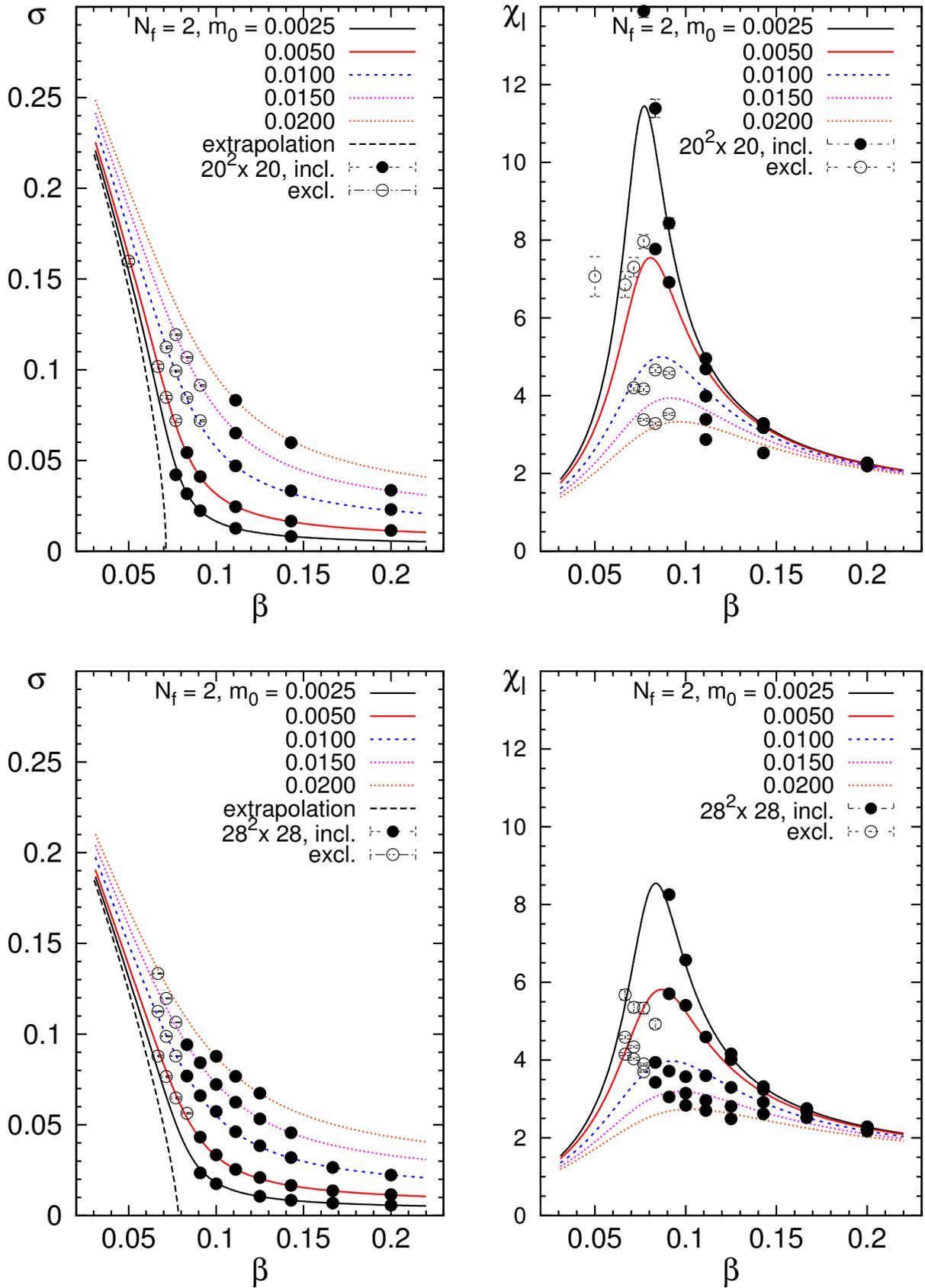


Рис. 2: Графики зависимости от  $\beta$  для кирального конденсата  $\sigma$  (слева) и восприимчивости  $\chi_l$  (справа). Верхние графики соответствуют решётке  $20^2 \times 20$ , нижние  $28^2 \times 28$ .

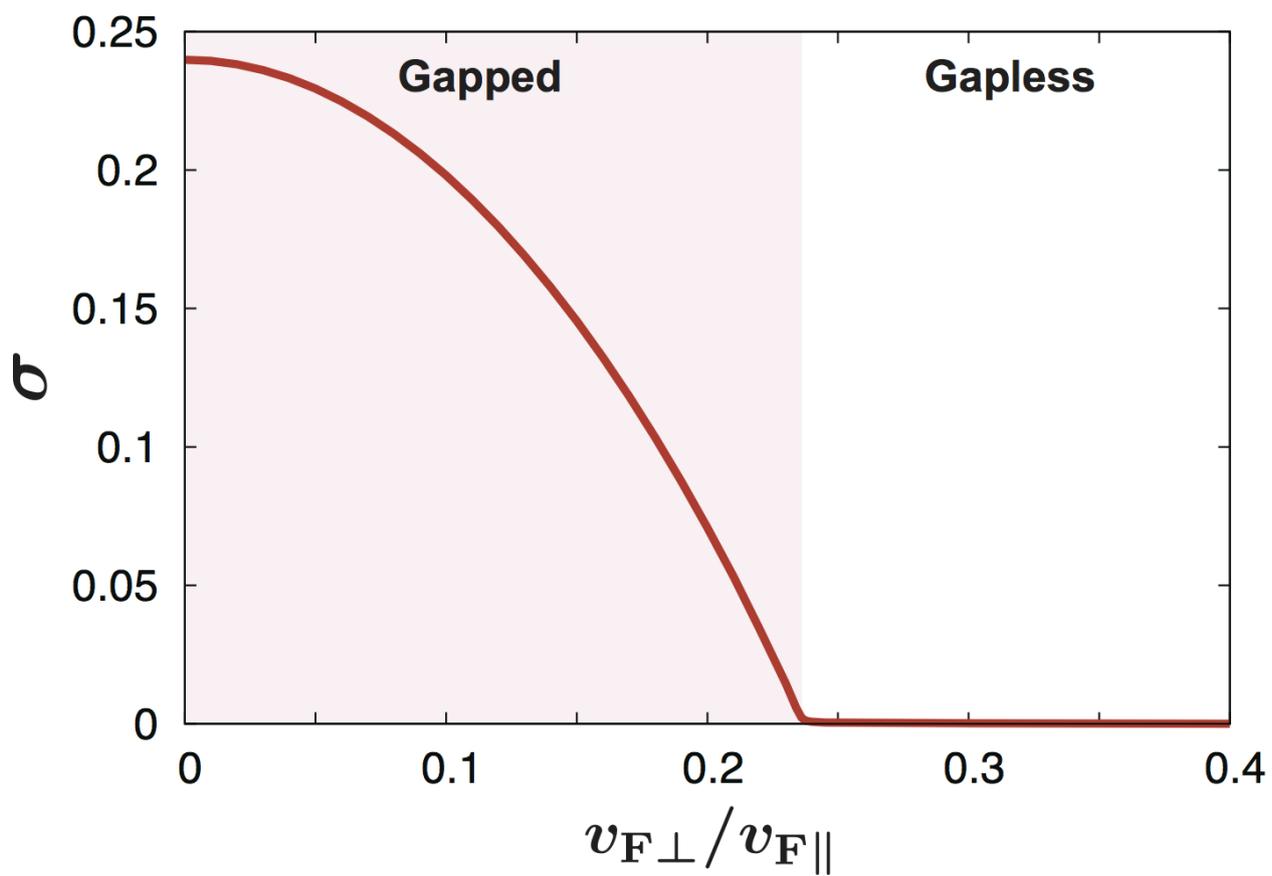


Рис. 3: Зависимость кирального конденсата  $\sigma$  от степени анизотропии  $v_{\perp}/v_{\parallel}$  в пределе сильной связи.

## Список литературы

- [1] J. E. Drut and T. A. Lähde, Phys. Rev. B **79**, 165425 (2009);
- [2] A. Sekine and K. Nomura, Phys. Rev. B. **90**, 075137 (2014);
- [3] Z. K. Liu, J. Jiang, B. Zhou, Z. J. Wang, Y. Zhang, H. M. Weng, D. Prabhakaran, S-K. Mo, H. Peng, P. Dudin, T. Kim, M. Hoesch, Z. Fang, X. Dai, Z. X. Shen, D. L. Feng, Z. Hussain and Y. L. Chen, Science **343**, 864 (2014);
- [4] S. Y. Xu, C. Liu, S. K. Kushwaha, R. Sankar, J. W. Krizan, I. Belopolski, M. Neupane, G. Bian, N. Alidoust, T. R. Chang, H. T. Jeng, C. Y. Huang, W. F. Tsai, H. Lin, P. P. Shibayev, F. C. Chou, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, Science **347**, 294 (2015);
- [5] M. Neupane, S. Y. Xu, R. Sankar, N. Alidoust, G. Bian, C. Liu, I. Belopolski, T. R. Chang, H. T. Jeng, H. Lin, A. Bansil, F. Chou, and M.Z. Hasan, Nature Commun. **5**, 3786 (2014);
- [6] T. Liang, Q. Gibson, M. N. Ali, M. Liu, R. J. Cava, and N. P. Ong, Nature Mater. **14**, 280 (2015);
- [7] S.Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.C. Lee S.M. Huang, H. Zheng, J. Ma, D.S. Sanchez, B. Wang, A. Bansil, F. Chou, P.P. Shibayev, H. Lin, S. Jia, M.Z. Hasan, Science **349**, 6428 (2015);
- [8] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejón, Phys. Rev. B **66**, 035412 (2002);
- [9] Т.П. Ченг, Л.Ф. Ли, "Калибровочные теории в физике элементарных частиц", М.: Мир (1987);
- [10] I. Montvay, G. Münster, "Quantum Fields on a Lattice", Cambridge University Press (1994);
- [11] Th. DeGrand, C. DeTar, "Lattice Methods for Quantum Chromodynamics", World Scientific Publishing (2006);
- [12] M.I. Katsnelson, "Graphene. Carbon in Two Dimensions", Cambridge University Press (2012);
- [13] N. Yu. Astrakhantsev, V.V. Braguta, M.I. Katsnelson, Phys. Rev. B **92** 245105 (2015);
- [14] A. D. Kennedy, "Algorithms for Dynamical Fermions", [arXiv:hep-lat/0607038](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0607038)