Моделирование графена на квадратной решетке.

Эффективная квантово-полевая модель

Два безмассовых фермионных поля на 2+1-мерной плоскости, взаимодействующие с калибровочным полем.

Исходное действие модели:

$$S = -\int F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} d^3x dt + \sum_{a=1,2} \left(\int \overline{\psi_a} (i\partial_0 - eA_0) \gamma^0 \psi_a d^2 x dt + \int \overline{\psi_a} (i\partial_k - eA_k) \gamma^k \psi_a v_F d^2 x dt \right)$$

С учетом малости скорости Ферми: $v_F \approx 1/300$

можно учитывать только электрическое поле:

$$S_{Eucl.} = \frac{1}{2} \int \sum_{i=1,2,3} (\partial_4 A_i - \partial_i A_4)^2 d^3 x d\tau + \sum_{a=1,2} \left(\int \overline{\psi_a} (\partial_4 + i \frac{e}{\sqrt{v_F}} A_4) \gamma_4 \psi_a d^2 x d\tau \right)$$

(осуществлен переход к евклидовому времени)

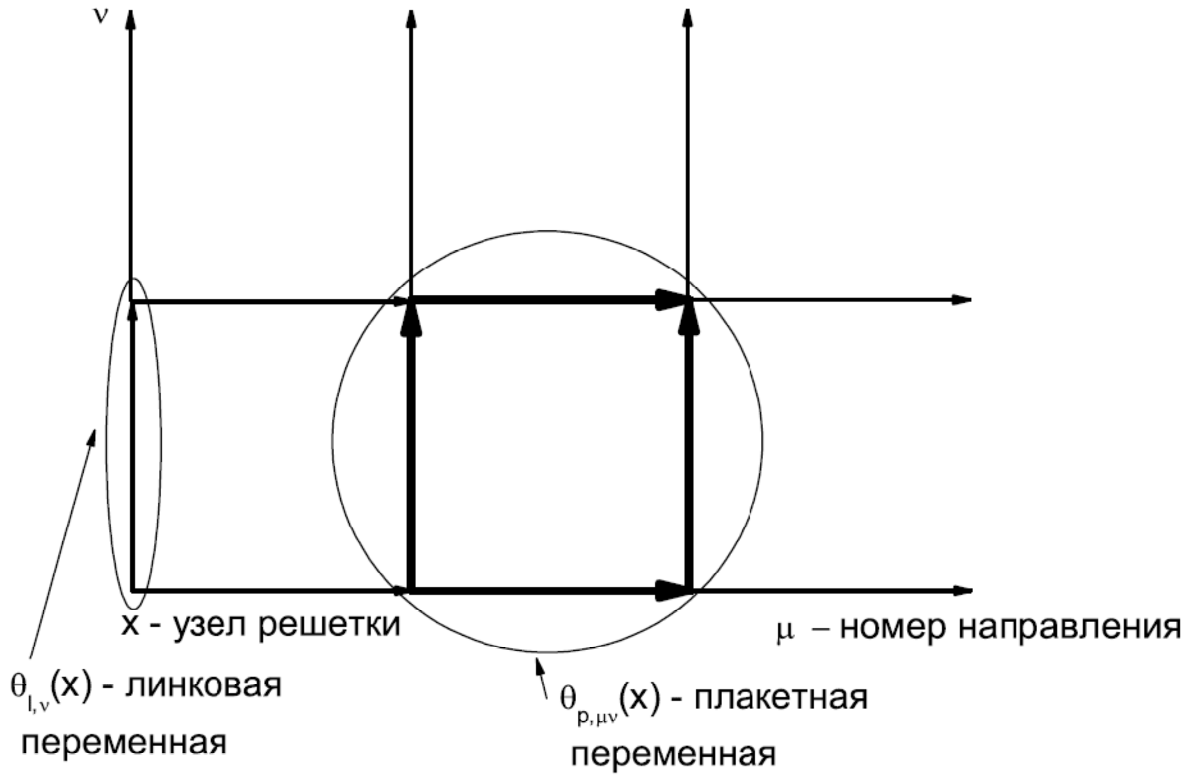
Решеточная формулировка (калибровочное поле)

$$S_g = \frac{\beta}{2}\sum_x \sum_{i=1,2,3} \theta_{4i}^2(x)$$

$$\theta_\mu(x) = \frac{e}{\sqrt{v_f}} a A_\mu$$

$$\Delta_\nu \theta_\mu(x) = \theta_\mu(x+\hat{\nu}) - \theta_\mu(x)$$

$$\theta_{\mu\nu}(x) = \Delta_\mu \theta_\nu(x) - \Delta_\nu \theta_\mu(x)$$



$$\beta = \frac{v_F}{e^2}$$

Решеточная формулировка (фермионное действие)

«Наивное» фермионное действие:

$$S_{naive} = \frac{1}{2a} \sum_{x,\hat{\mu}} (\overline{\psi}_x \gamma_\mu U_\mu(x) \psi_{x+\hat{\mu}} - \overline{\psi}_x \gamma_\mu U_\mu(x-\hat{\mu})^+ \psi_{x-\hat{\mu}}) + m \sum_x \overline{\psi}_x \psi_x$$

$$U_\mu(x) = e^{i\theta_\mu(x)}$$

Недостаток: «фермионы-дубли» (16 в четырехмерии, 8 в трехмерии)

В процессе модификации действия возникает противоречие между устранением «дублей» и сохранением исходной киральной симметрии безмассового действия.

Решеточная формулировка (фермионное действие)

Для моделирования графена используются staggered-фермионы:

$$S = \frac{1}{2a} \sum_{x,\hat{\mu}} \bar{\chi}_x \alpha_\mu(x) (U_\mu(x) \chi_{x+\hat{\mu}} - U_\mu(x-\hat{\mu})^+ \chi_{x-\hat{\mu}}) + m \sum_x \bar{\chi}_x \chi_x$$

$$\alpha_\mu(x) = (-1)^{x_1 + \ldots + x_{\mu-1}}$$

Дублей – ровно столько, сколько надо – 2 в трехмерии.
От киральной симметрии (U(2)*U(2)) в пределе m→0 остается U(1)*U(1) группа.

Более правильные – “overlap”-фермионы. Дают действие, инвариантное относительно решеточной версии киральных преобразований (переходящих в обычные при a →0), однако требуют вычисления sign(M).

Вычисление физических величин

Континуальные интегралы

Решеточная формулировка

Вычисление многомерных интегралов методом Монте-Карло.

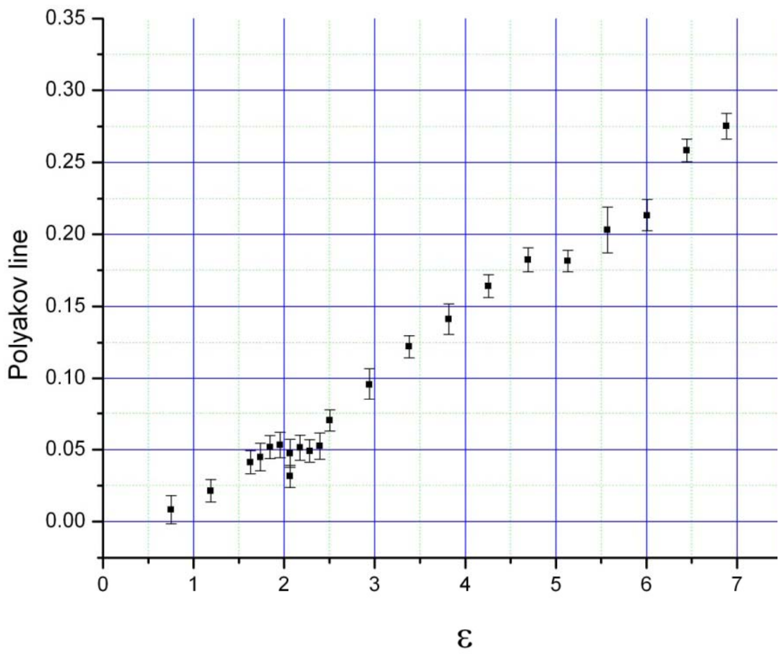
$$\int p(x) f(\vec{x}) d^n x = < f >$$

$$< f > = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\vec{x}_i)$$

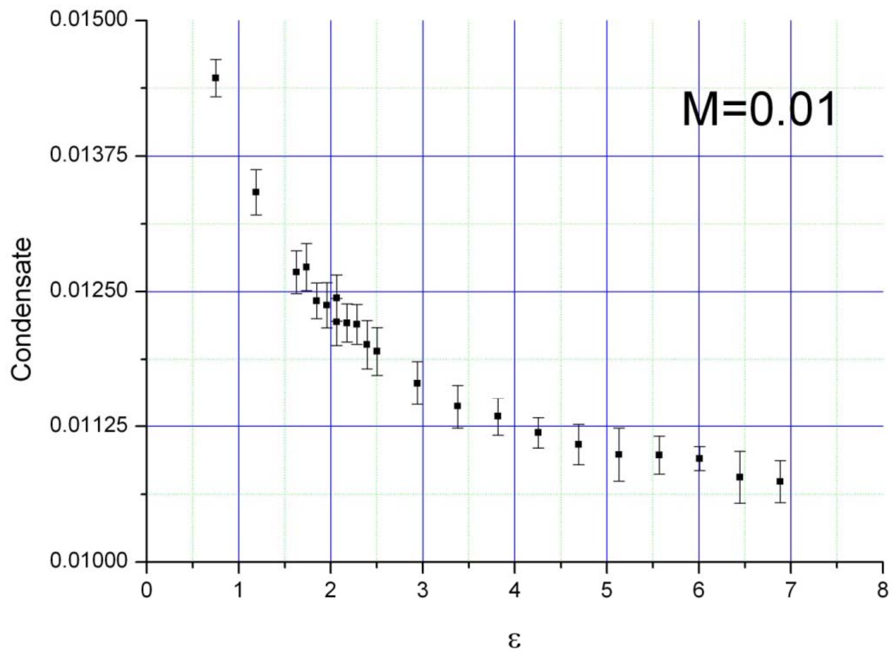
p(x) – плотность вероятности для вектора x.

Некоторые результаты вычислений.

Основная задача – исследование фазового поведения при различных диэлектрических проницаемостях подложки



Зависимость среднего поляковской линии от диэлектрической проницаемости подложки.



Зависимость фермионного конденсата от диэлектрической проницаемости подложки

$$P = \left\langle \exp\left(ie \int_{\tau=0}^{T} A_4(\tau,\vec{r})\, d\tau \right) \right\rangle$$

$$\sigma = \left\langle \overline{\psi}\psi \right\rangle$$