

# Исследование непертурбативных эффектов в сильновзаимодействующих системах методами решёточного моделирования

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физ.-мат. наук

*Никита Астраханцев*

Научный руководитель: д. ф.-м. н. *Виктор Брагута*

Институт теоретической и экспериментальной физики  
им. Абрама Алиханова

5 февраля 2019,  
Институт Физики Высоких Энергий

# Содержание

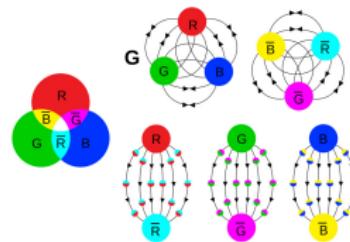
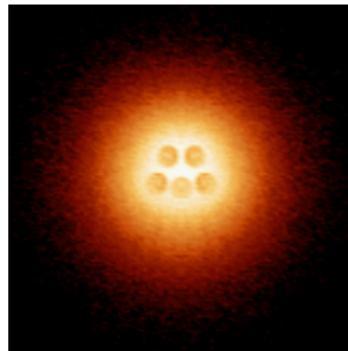
- ▶ Сильновзаимодействующие системы
- ▶ Методология решёточного моделирования
- ▶ Проекты и результаты:
  1. Сдвиговая вязкость кварк-глюонной материи в рамках  $SU(2)$ - и  $SU(3)$ -глюодинамики (JHEP09(2015)082, JHEP04(2017)101)
  2. Объёмная вязкость кварк-глюонной материи в рамках  $SU(3)$ -глюодинамики (Phys. Rev. D 98, 054515 (2018))
  3. Многочастичные эффекты в графене за рамками модели Дирака с Кулоновским взаимодействием (Phys. Rev. B 92, 245105 (2015))
  4. Изучение статического потенциала в графене в рамках решёточного моделирования (Phys. Rev. B 97, 035102 (2018))
- ▶ Результаты, выносимые на защиту, аprobация результатов.

# Сильновзаимодействующие системы

# Сильновзаимодействующие системы

Сильное взаимодействие:

1. может существенно изменить свойства системы по сравнению со свободной теорией;
2. делает теорию возмущений неприменимой;
3. приводит к множеству удивительных физических явлений.



**Рис.:** Слева: коллапс суперкритического заряда в графене (квазилокализованное состояние [Зельдович, Герштейн, Попов], сильные эффекты вакуумной поляризации). Справа: конфайнмент в КХД.

# Методология решёточного моделирования

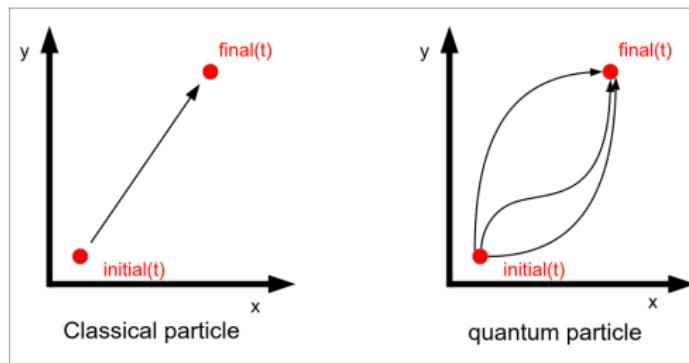
# Формулировка квантовой механики через интеграл по траекториям

Квантовая механика формулируется в терминах *Фейнмановского интеграла* по всем траекториям:

$$C(x_a, t_a, x_b, t_b) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) \exp(iS[x(t)]/\hbar),$$

где

$$S(x(t)) = \int_{t_a}^{t_b} \left( \frac{1}{2} m \dot{x}(t)^2 - V(x(t)) \right) dt.$$



# Формулировка квантовой теории поля через интеграл по траекториям

Например, на примере  $\varphi^4$ -теории:

$$C(x_a, t_a, x_b, t_b) = \frac{\int \mathcal{D}\varphi (\varphi(x_a, t_a)\varphi(x_b, t_b)) \exp(iS[\varphi]/\hbar)}{\int \mathcal{D}\varphi \exp(iS[\varphi]/\hbar)},$$

где

$$S[\varphi] = \int d^4x \left( \frac{1}{2}(\partial_\mu \varphi(x))^2 - \frac{1}{2}m^2\varphi(x)^2 + \frac{\lambda}{4!}\varphi(x)^4 \right).$$

Таким образом, для вычисления коррелятора в КТП необходимо проинтегрировать по всем периодическим (или антипериодическим) полевым *историям*.

# Решёточное моделирование

На решётке обычно моделируется система в термодинамическом равновесии. Статсумма по определению

$$\mathcal{Z} = \text{Tr } e^{-\beta \hat{H}} = \int \mathcal{D}\varphi_{3D} \langle \varphi_{3D} | e^{-\beta \hat{H}} | \varphi_{3D} \rangle,$$

выражается в терминах интеграла по 3D полевым конфигурациям.

Евклидово «время»  $\beta$  можно разбить на  $N_\tau$  частей, в итоге статсумма переписывается в виде интеграла действия по всем 4D конфигурациям (температура скрыта в числе временных слоёв):

$$\mathcal{Z} = \int_{\varphi_{4D}(0, \vec{x}) = \varphi_{4D}(\beta, \vec{x})} \mathcal{D}\varphi_{4D} \exp(-S(\varphi_{4D})).$$

# Решёточная регуляризация

Решёточная регуляризация: переход к дискретным переменным, можно симулировать на компьютере

$$x_{\mu, \text{cont}} \rightarrow x_{\mu, \text{lattice}} = an_{\mu}, \quad n_{\mu} = 0, 1, \dots, N_{\mu} - 1. \quad (1)$$

Эффективно регуляризует теорию на ультрафиолетовом  $\pi/a$  и инфракрасном  $\pi/L$  масштабах.

## Выборка по значимости

Среднее любой наблюдаемой  $\mathcal{O}$  можно вычислить как:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\varphi(0, \vec{x})=\varphi(\beta, \vec{x})} \mathcal{D}\varphi \mathcal{O}(\varphi) \exp(-S(\varphi)).$$

Если у нас есть набор конфигураций  $\{\varphi_i\}$  распределённых с каноническим весом  $W_c(\varphi) \propto e^{-S(\varphi)}$ , то среднее можно приблизить как

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{N} \sum \mathcal{O}(\varphi_i).$$

# Проклятие размерности

- ▶ Для большой системы действие очень локализовано. Как семплировать эффективно из пространства размерности  $\sim 10^7$ ?
- ▶ Если в системе есть фермионы, их нужно отинтегрировать, поскольку они описываются гравитационными переменными. В итоге действие приобретает дополнительный член  $S(\varphi) - \bar{\psi} D(\varphi) \psi \rightarrow S(\varphi) - \log \det D(\varphi)$ . *Действие становится существенно нелокальным!*
- ▶ Локальные обновления поля очень медленно исследуют фазовое пространство системы, однако из-за нелокальности стоят  $\mathcal{O}(N)$ .

Решение – гибридный Монте-Карло, генерируем случайные сопряжённые импульсы из Гауссова распределения  $P(p) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_n p_n^2\right)$ , затем решаем канонические уравнения гамильтоновой динамики:

$$\dot{\phi}_n = p_n \quad p_n = -\partial S / \partial \phi_n,$$

где

$$H(p, \phi) = \sum_n p_n^2 + S(\varphi).$$

## Алгоритм Метрополиса

Конфигурация в конце траектории принимается или отбрасывается с вероятностью:

$$P([p, \phi]) \rightarrow [p', \phi']) = \min(1, \exp(-H(p', \phi') + H(p, \phi))) .$$

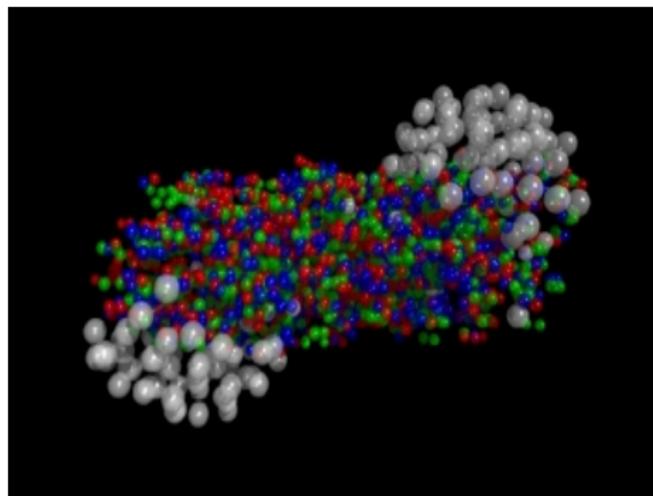
# Трудности

Решёточное моделирование — очень трудная задача:

- ▶  $\det D(\varphi)$  может быть комплексным — знаменитая проблема знака
- ▶ Физические результаты могут быть получены только на очень больших решётках: уравнения Гамильтона решаются очень долго
- ▶ Critical slowdown: в окрестности фазового перехода длина автокорреляции возрастает, требуется длинная эволюция

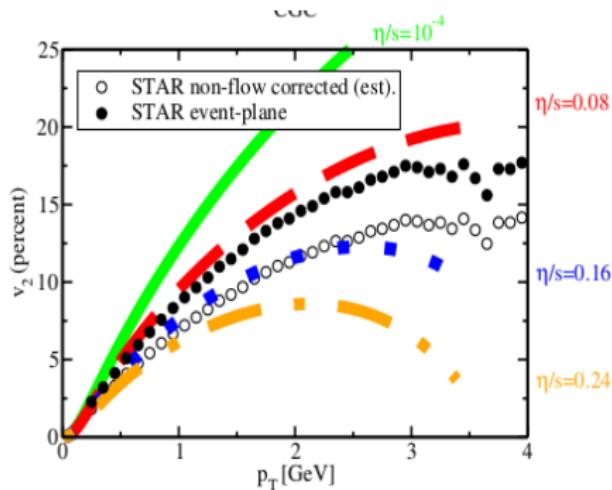
Сдвиговая вязкость кварк-глюонной материи в  
рамках  $SU(2)$ - и  $SU(3)$ -глюодинамики  
(JHEP09(2015)082, JHEP04(2017)101)

## Эксперименты по соударению тяжёлых ионов



После соударения, число частиц в начальном состоянии может превышать  $10^5$ : возможно использование гидродинамического приближения.

# Гидродинамическое описание экспериментальных данных

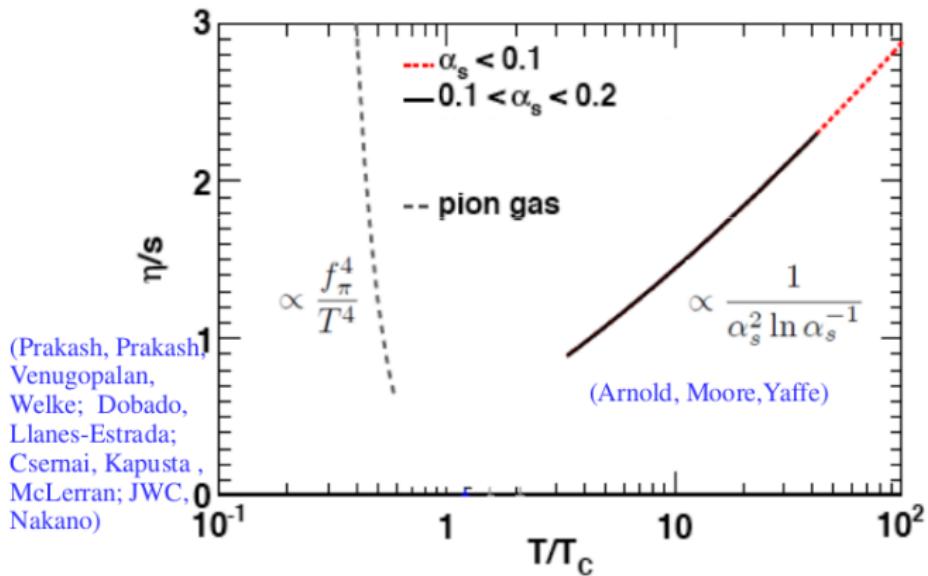


- Эллиптичность распределения конечных адронов

$$\frac{dN}{d\phi} \sim (1 + 2v_1 \cos \phi + 2v_2 \cos^2 \phi)$$

- Кварк-глюонная материя близка к идеальной жидкости  
 $(\frac{\eta}{s} = (1 - 3)\frac{1}{4\pi})$

# Сдвиговая вязкость в известных температурных пределах



# Определение вязкости на решётке

## Первый шаг:

Измеряются корреляционные функции различных компонент тензора энергии-импульса:

$$C_{sh}(t) = \int d^3\vec{x} \langle T_{12}(t, \vec{x}) T_{12}(0) \rangle$$

$$C_b(t) = \int d^3\vec{x} \langle T_{\mu\mu}(t, \vec{x}) T_{\nu\nu}(0) \rangle$$

# Определение вязкости на решётке

## Первый шаг:

Измеряются корреляционные функции различных компонент тензора энергии-импульса:

$$C_{sh}(t) = \int d^3\vec{x} \langle T_{12}(t, \vec{x}) T_{12}(0) \rangle$$

$$C_b(t) = \int d^3\vec{x} \langle T_{\mu\mu}(t, \vec{x}) T_{\nu\nu}(0) \rangle$$

## Аналитическое продолжение:

Определение спектральной функции  $\rho(\omega)$ :

$$C(t) = \int_0^\infty d\omega \rho(\omega) \frac{\cosh\left(\frac{\omega}{2T} - \omega t\right)}{\sinh\left(\frac{\omega}{2T}\right)}$$

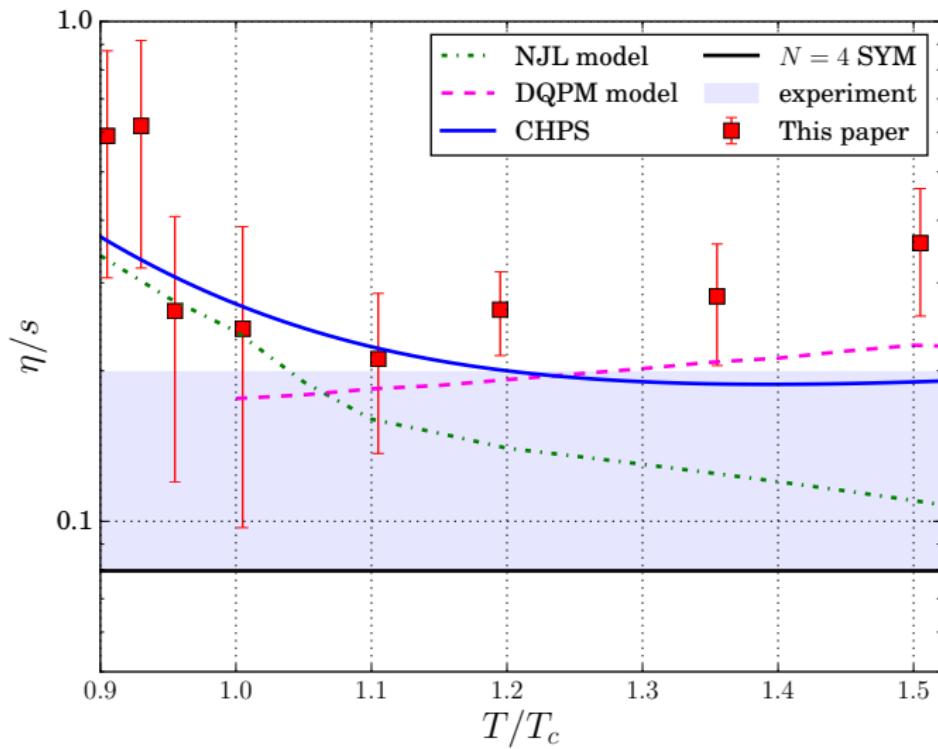
$$\eta = \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\rho_{sh}(\omega)}{\omega}, \quad \zeta = \frac{\pi}{9} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\rho_b(\omega)}{\omega}$$

# Методы обращения интегральных уравнений

Задача плохо поставлена, требуются различные методы регуляризации:

- ▶ Физически-мотивированная процедура фитирования;
- ▶ Непараметрические методы оценки (Бакуса-Гильберта, Максимальной энтропии);
- ▶ Регуляризации с помощью нейронных сетей;

# Результаты

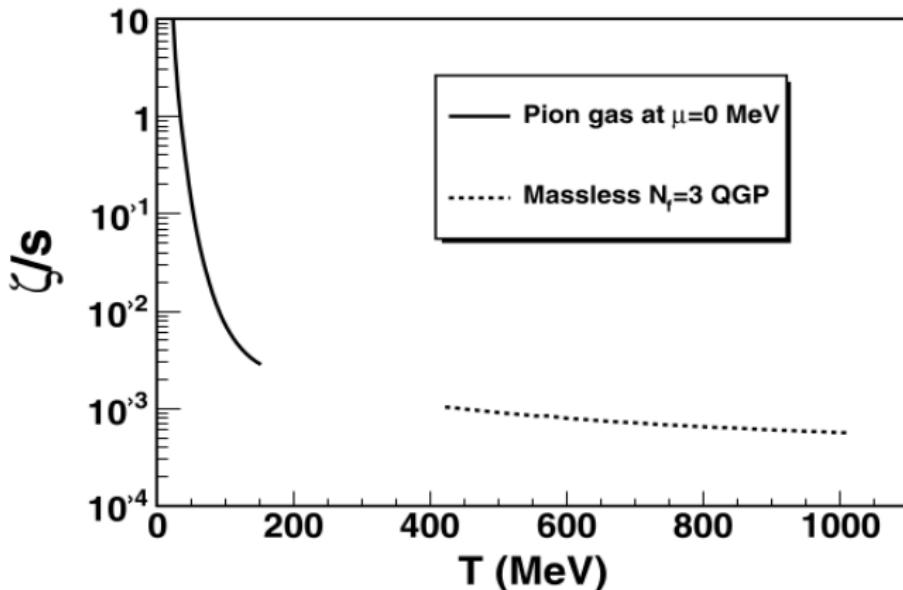


# Результаты

- ▶ Сдвиговая вязкость  $SU(3)$ -глюодинамики была измерена для температур  $T/T_c \in [0.9, 1.5]$ .
- ▶ Мы видим близость отношения  $\eta(T)/s(T)$  к  $1/4\pi$  предсказанию  $N = 4$  Суперсимметричной теории Янга-Миллса в пределе сильной связи,
- ▶ Мы также наблюдаем разногласие с наивным однопетлевым пертурбативным расчётом даже на температуре  $1.5 T_c$  (и дальше).
- ▶ Сдвиговые вязкости  $SU(2)$  и  $SU(3)$  теорий согласуются при  $T = 1.2 T_c$ , что является неким сюрпризом.

Объёмная вязкость кварк-глюонной материи в  
рамках  $SU(3)$ -глюодинамики (Phys. Rev. D 98,  
054515 (2018))

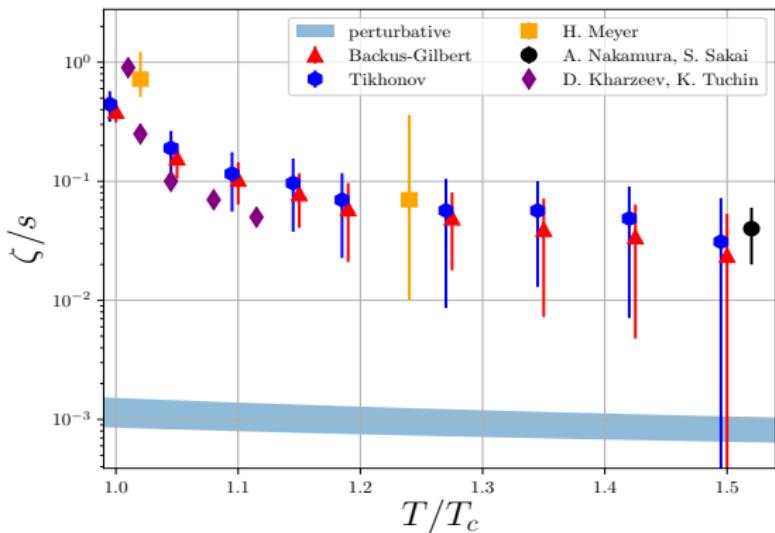
# Объёмная вязкость в известных пределах



# Мотивация

- ▶ Согласно пертурбативным расчётам,  $\zeta/s \sim 0.02\alpha_s^2$ . Таким образом, при высоких температурах объёмная вязкость мала.
- ▶ Однако последний анализ экспериментальных данных Байесовскими методами указывает на наличие высокого пика при  $T = T_c$  [S. Bass. 2017]
- ▶ Оказывается, учёт большой объёмной вязкости в окрестности фазового перехода необходим для корректного гидродинамического описания соударения тяжёлых ионов [Pawlovsky, 2018].
- ▶ Необходим анализ из первых принципов в области фазового перехода.

# Результаты



- ▶ Согласие с существующими решёточными расчётами,
- ▶ Как ожидалось, существенное различие с пертурбативным расчётом даже на больших температурах.

## Выводы

- ▶ Мы определили  $\zeta/s$  на наборе температур  $T/T_c \in (0.9, 1.5)$
- ▶ Наблюдается согласие с решёточными вычислениями и эффективными низкоэнергетическими моделями.
- ▶ Подтверждено наличие пика объёмной вязкости на температуре фазового перехода.

Многочастичные эффекты в графене за  
рамками модели Дирака с Кулоновским  
взаимодействием (Phys. Rev. B 92, 245105  
(2015))

# Мотивация

- ▶ Графен — очень сильновзаимодействующая система,  $\alpha_g \sim 2.5$ , сильные многочастичные эффекты перенормировок.
- ▶ Потенциал взаимодействия между квазичастицами закладывается в теорию как внешний параметр: результаты расчётов оказываются неожиданно чувствительны к форме этого потенциала.
- ▶ Задача: развить теорию возмущений в точной решёточной модели графена с конечной температурой, шагом решётки и произвольным потенциалом.
- ▶ Далее посмотреть, как перенормировки зависят от формы голого потенциала (графен на подложке).

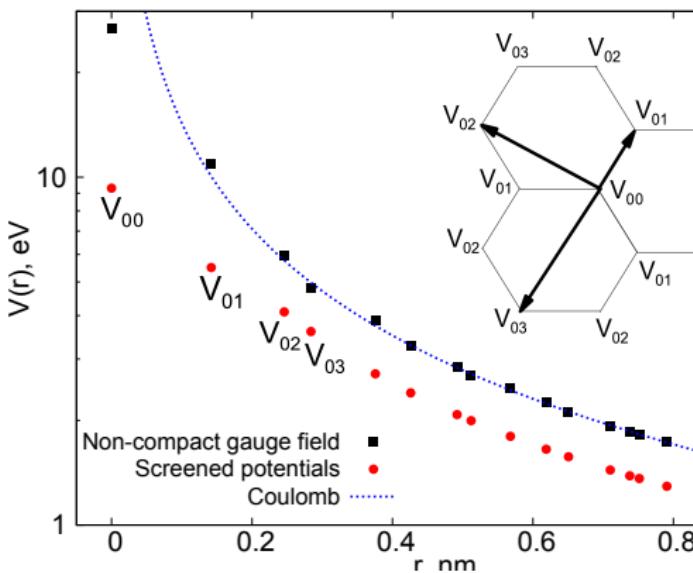
# КТП формулировка графена

Многочастичный гамильтониан:

$$\hat{H} = \underbrace{-\kappa \sum_{(x,y),\sigma} \left( \hat{a}_{\sigma,x}^\dagger \hat{a}_{\sigma,y} + \hat{a}_{\sigma,y}^\dagger \hat{a}_{\sigma,x} \right)}_{\text{tight binding}} \pm m \underbrace{\sum_x \hat{a}_{\sigma,x}^\dagger \hat{a}_{\sigma,x}}_{{\text{mass term}}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{x,y} V(x,y) \hat{q}_x \hat{q}_y}_{\text{interaction}}$$

1. член tight-binding: связывает соседние пары ячеек, воспроизводит стандартный конус Дирака,
2. массивное слагаемое — необходимо для численных расчётов,
3. мгновенный электростатический потенциал, его форма будет меняться

# Модификация формы взаимодействия



На малых расстояниях потенциал экранируется  $\sigma$ -электронами, которые не являются степенями свободы исходной модели. Модификация рассчитывается методами квантовой химии в рамках DFT.

## Статсумма

С помощью преобразования Хаббарда-Стратоновича гамильтониан приводится к статсумме с электронами, скалярными фотонами и дырками

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\varphi \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-\mathcal{S}_{em}(\varphi) - \sum_{\sigma,x,y} \bar{\eta}(x)\mathcal{M}_{x,y}(\varphi)\eta(y) - \sum_{\sigma,x,y} \bar{\psi}(x)\bar{\mathcal{M}}_{x,y}(\varphi)\psi(y)}.$$

*Теперь можно проводить аналитические расчёты в точной гексагональной модели.*

# Собственно-энергетическая функция

Однопетлевое выражение имеет вид  $\Sigma_e^{(1)}$ :

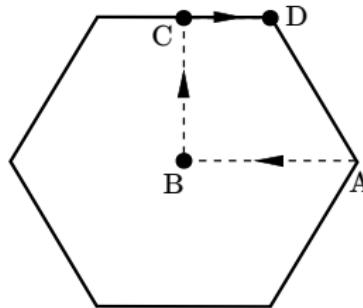
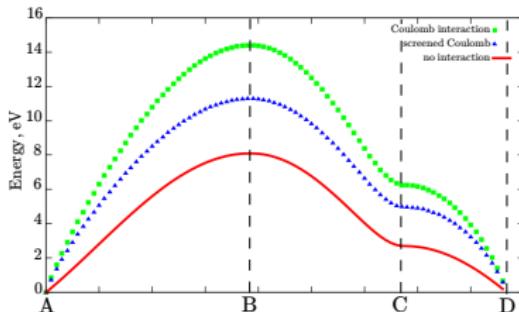


$$\begin{aligned}\Sigma_e^{(1)}(p) = & \underbrace{\frac{1}{2} \delta\tau \begin{pmatrix} V_{00} & 0 \\ 0 & V_{00} \end{pmatrix} e^{ip^0 \delta\tau}}_{\Sigma_1(p)} - \\ & \underbrace{- \frac{1}{2} \delta\tau \begin{pmatrix} V_{00} & 0 \\ 0 & V_{00} \end{pmatrix} e^{ip^0 \delta\tau} + \frac{e^{ip^0 \delta\tau} \delta\tau}{2L_x L_y} \sum_{\vec{k}} \tanh\left(\frac{E(\vec{k})}{2T}\right) \times \begin{pmatrix} -\frac{mc^2}{E(\vec{k})} \tilde{V}^{AA}(\vec{p} - \vec{k}) & \frac{\varphi(\vec{k})}{E(\vec{k})} \tilde{V}^{AB}(\vec{p} - \vec{k}) \\ \frac{\varphi^*(\vec{k})}{E(\vec{k})} \tilde{V}^{BA}(\vec{p} - \vec{k}) & \frac{mc^2}{E(\vec{k})} \tilde{V}^{BB}(\vec{p} - \vec{k}) \end{pmatrix}}_{\Sigma_2(p)}.\end{aligned}$$

Такое сокращение типично для решёточных расчётов, обеспечивая  $\Sigma_{xx} = 0$ , что означает сохранение заряда.

# Спектральная функция

С помощью выражения для  $\Sigma_e$  можно перенормировать энергетический спектр  $\varphi(\vec{k})$  ( $E_R^2(\vec{k}) = m_R^2 + \varphi_R^2(\vec{k})$ ):



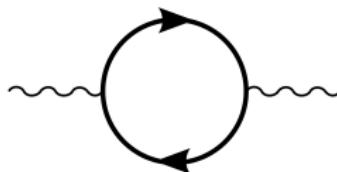
1. Видно, что энергетический спектр оказывается очень чувствительным к модификации потенциала на малых расстояниях.
2. В эксперименте Новосёлова по измерению квантовой ёмкости, измерялась сила перенормировки скорости Ферми в зависимости от хим. потенциала:  $v_F(\mu) = v_F(\mu_0) (1 + A \log \mu_0 / \mu)$ ,  $\mu_0 = 3.2$  eV, графен был расположен на подложке из нитрида бора.
3. В наших расчётах немодифицированный потенциал даёт  $\mu_0 = 5.2$  eV, а модифицированный — 2.9 eV, лучшее совпадение с экспериментом.

Изучение статического потенциала в графене в  
рамках решёточного моделирования  
(Phys. Rev. B 97, 035102 (2018))

# Мотивация

1. Множество наблюдаемых в графене (даже в пределе большой константы связи) описываются в однопетлевом приближении: проводимость, скорость Ферми, диэлектрическая проницаемость.
2. Было показано, что экспериментальные данные по диэлектрической проницаемости совпадают в результатами однопетлевой эффективной модели Дирака с Кулоновским взаимодействием.
3. Наша цель: проанализировать то же совпадение между однопетлевым расчётом и непертурбативным QMC расчётом (все порядки т.в.) в рамках дискретной реалистичной модели.

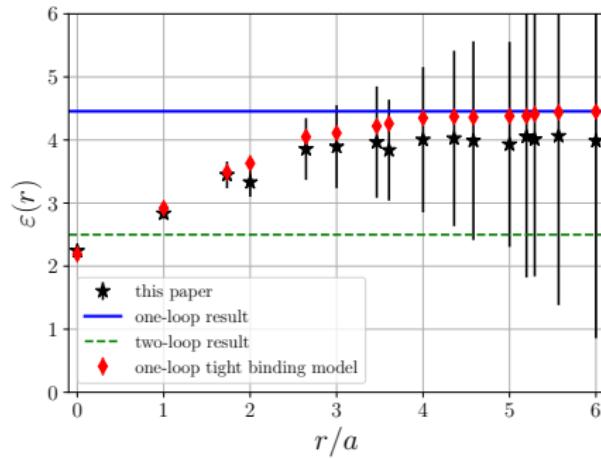
# Диэлектрическая проницаемость в рамках решёточного моделирования



- ▶ Фотонный пропагатор  $\tilde{V}(\vec{k})$  перенормируется за счёт петлевой диаграммы. Длинноволновое поведение  $\vec{k} \rightarrow 0$  отвечает за перенормировку  $V(r)$  на бесконечности, т.е. за диэлектрическую проницаемость;
- ▶ Загрузив в систему голый потенциал  $V(\vec{r})$ , мы измеряем коррелятор Поляковских петель между

$$V_{QQ}(\vec{r}) = -\frac{T}{Q^2} (\ln \langle L_Q(0) L_Q^*(\vec{r}) \rangle - 2 \ln \langle L_Q \rangle). \quad (2)$$

# Диэлектрическая проницаемость в рамках решёточного моделирования



Данные решёточного Монте-Карло действительно согласуются с однопетлевыми расчётами даже при  $\alpha_g = 2.5$ . Причина этого совпадения, возможно, кроется в некой симметрии и сокращении высших петлевых вкладов, но пока не ясна.

# Результаты, выносимые на защиту

- ▶ Проведено ультрафиолетовое исследование спектральных функций в  $SU(2)$ -глюодинамике при температуре  $T = 1.2 T_c$ . Изучено приложение параметрического метода обращения формулы Кубо и определение гидродинамических свойств спектральной функции при большом вкладе ультрафиолета. Получены точные решёточные выражения для ультрафиолетового поведения спектральной функции. Показано, что учёт точной формы ультрафиолетового поведения важен для определения сдвиговой вязкости. Обнаружено, что вязкость  $SU(2)$ -глюодинамики близка к значению из  $SU(3)$ -теории.
- ▶ Исследованы ультрафиолетовые спектральные функции в  $SU(3)$ -глюодинамике, применены параметрические и непараметрические методы извлечения транспортных коэффициентов при большом вкладе ультрафиолета. Измерена температурная зависимость сдвиговой и объёмной вязостей в интеграле от  $0.9 T_c$  до  $1.5 T_c$ . Обнаружено согласие с экспериментальными данными и с некоторыми эффективными моделями, а также сильное отклонение от пертурбативных расчётов.

# Результаты, выносимые на защиту

- ▶ Сформулирована квантовая теория поля в решёточной гексагональной модели графена. Проведены аналитические однопетлевые расчёты перенормировок скорости Ферми, диэлектрической проницаемости и массы квазичастиц. Расчёты проведены с учётом конечного размера решётки, конечной температуры и химического потенциала. Обнаружено согласие однопетлевых расчётов перенормировки диэлектрической проницаемости с предварительными результатами моделирования Монте-Карло, а также однопетлевых расчётов перенормировки скорости Ферми с экспериментальными данными.
- ▶ Изучен потенциал взаимодействия между статическими зарядами в графене методами решёточного моделирования. Проведены расчёты диэлектрической проницаемости на различных расстояниях и температурах. Обнаружено, что в пределе  $T = 0$  диэлектрическая проницаемость равна  $\epsilon = 2.24 \pm 0.02$  при  $r = 0$  и затем растёт, достигая плато в  $4.20 \pm 0.66$ , что находится в согласии с точными однопетлевыми расчётами на гексагональной решётке, а также с экспериментальными данными. Обнаружено несогласие результатов с двухпетлевыми расчётами, то есть возможное сокращение поправок в более высоких порядках теории возмущений.

# Апробация результатов

Результаты диссертации докладывались на семинарах: ИТЭФ, ОИЯИ, Самарского НИУ им. С. П. Королёва, ИФВЭ, СПбГУ и на следующих международных конференциях:

- ▶ Monte Carlo methods in computer simulations of complex systems (Владивосток, Россия, 2015),
- ▶ International school of subnuclear physics, (Эриче, Италия, 2015),
- ▶ 19th International Seminar on High Energy Physics «QUARKS – 2016» (Пушкин, Россия, 2016),
- ▶ International Conference-Session of the Section of Nuclear Physics of PSD RAS (Дубна, Россия, 2016),
- ▶ Monte Carlo methods in computer simulations of complex systems, (Владивосток, Россия, 2016),

# Апробация результатов

- ▶ XIIth Quark Confinement and the Hadron Spectrum, (Салоники, Греция, 2016),
- ▶ 6th International Conference on New Frontiers in Physics, (Колумбари, Греция, 2017),
- ▶ Quark Matter 2018 (Венеция, Италия, 2018),
- ▶ XIIIth Quark Confinement and the Hadron Spectrum, (Мейнут, Ирландия, 2018),
- ▶ Low-dimensional materials: theory, modeling, experiment, (Дубна, Россия, 2018).

По материалам работы опубликованы 4 статьи в ведущих международных реферируемых журналах и 3 статьи в сборниках международных конференций.