

К ВОПРОСУ О ПЕРЕНОСЕ ЗАРЯДА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ ГРАФЕНА

Б.В. Алексеев, заведующий кафедрой, **И.В. Овчинникова**, доцент

кафедра Физики МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, 119571 Россия

e-mail: boris.vlad.alexeev@gmail.com

Рассматривается движение заряженных частиц в графене под действием внешнего электрического поля в рамках квантового нелокального гидродинамического описания. С помощью численного решения системы нелокальных гидродинамических уравнений исследована зависимость структуры формирующихся солитонов от величины внешнего поля.

Ключевые слова: нелокальная квантовая гидродинамика, теория процессов переноса в графене, солитоны.

Введение

В настоящее время проводится много экспериментальных исследований высокотемпературных сверхпроводников. В частности, большое внимание уделяется состояниям, предшествующим возникновению сверхпроводимости. В обзоре [1] указывается, что происхождение «псевдощелевого» состояния в оксидах меди (купратах) может быть связано с флуктуациями ближнего порядка, например, антиферромагнитного типа или типа волн зарядовой плотности (CDW). Авторы [2] наблюдали с помощью сканирующего электронного микроскопа возникновение «псевдощелевых» областей размером порядка 2 нм. В работе [3] описаны прямые наблюдения волн зарядовой плотности, которые могут распространяться в оксидах меди при температурах выше температуры сверхпроводящего перехода (T_c), а также при $T < T_c$, если приложенное внешнее магнитное поле подавляет сверхпроводимость. Общим для всех рассматриваемых моделей структурных изменений в высокотемпературных сверхпроводниках, предшествующих сверхпроводимости, является возникновение неустойчивостей (флуктуаций) размером порядка нескольких межатомных расстояний.

Рассмотрение движения заряженных частиц в кристалле на основе системы нелокальных гидродинамических уравнений [4] приводит к решениям солитонного типа [4,5], которые могут описывать указанные микроскопические области. Численное моделирование в работе [5] проводилось применительно к кристаллической решетке графена, являющегося перспективным материалом в нанoeлектронике, с высокой подвижностью носителей. Ряд авторов указывают на возможность, при определенных условиях, достижения сверхпроводимости в графене [6] и графене, обладающим схожей кристаллической решеткой ($(CH)_n$) [7, 8]. В связи с этим представляет интерес исследовать поведение солитонов в кристаллической решетке графена при наложении внешнего электрического поля.

1. Обобщенные гидродинамические уравнения для движения солитона в кристалле с учетом внешнего поля

Будем рассматривать кристалл графена, помещенный во внешнее поле напряженностью \mathbf{E}_0 , направленное по оси x . В соответствии с моделью, принятой в [5], будем считать, что в кристалле происходит перемещение электронов проводимости ($-e$, m_e) и положительных поляризованных зарядов, соответствующих квазичастицам ($+e$, m_p). Будем искать решения солитонного типа системы обобщенных гидродинамических уравнений в двумерной кристаллической решетке графена (в координатах x и y). Предположим, что солитон движется по оси x со скоростью $u_0 = const$, и введем переменную $\xi = x - u_0 t$, то есть перейдем в подвижную систему координат.

На частицы действует самосогласованное поле с потенциалом φ , периодический потенциал U , связанный со структурой кристаллической решетки, а также внешнее поле напряженностью \mathbf{E}_0 . Запишем силы, действующие на единицу массы частиц, в безразмерном виде, введя масштабы для физических величин. Тогда

$$\tilde{F}_{p\xi} = -\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} - \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{E}_0, \quad (1)$$

$$\tilde{F}_{e\xi} = \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{\xi}} - \tilde{E}_0, \quad (2)$$

$$\tilde{F}_{py} = -\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{y}} - \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{y}}, \quad (3)$$

$$\tilde{F}_{ey} = \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{y}} + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{y}}, \quad (4)$$

где $F_e = \frac{e\varphi_0}{m_e x_0} \tilde{F}_e$, $F_p = \frac{e\varphi_0}{m_p x_0} \tilde{F}_p$ – силы, действующие на единицу массы электронов и положительных частиц, $\xi = x_0 \tilde{\xi}$, $y = x_0 \tilde{y}$, $\varphi = \varphi_0 \tilde{\varphi}$, $U = \varphi_0 \tilde{U}$, $E_0 = \frac{\varphi_0}{x_0} \tilde{E}_0$.

При рассмотрении потенциала, созданного кристаллической решеткой графена, ограничимся «первым приближением».

В работе [5] показано, что использование «второго приближения», то есть большего количества членов ряда Фурье в разложении потенциала, не приводит к принципиальным изменениям решения. Тогда, в соответствии с [5], имеем:

$$-\frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{\xi}} = \tilde{U}'_{10} \sin\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) + \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right), \quad (5)$$

где $a = x_0 \tilde{a} = 0.142$ нм – расстояние между ближайшими атомами углерода в графене, $\tilde{V}_{1,(10)}$ и $\tilde{V}_{1,(11)}$ – безразмерные коэффициенты разложения периодического потенциала в ряд Фурье.

$$\tilde{U}'_{10} = \frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{V}_{1,(10)}, \quad \tilde{U}'_{11} = \frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{V}_{1,(11)}, \quad (6)$$

Подставим силы (1)–(4) с учетом (5) в систему обобщенных квантовых гидродинамических уравнений для движения солитона в двухкомпонентной смеси (см. [5]). Усредним полученную систему уравнений по \tilde{y} по одной шестиугольной ячейке кристаллической решетки, принимая, что поле \mathbf{E}_0 не зависит от \tilde{y} .

Кроме того, при усреднении будем считать, что

уравнение движения (по x):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ (\tilde{\rho}_p + \tilde{\rho}_e) \tilde{u} (\tilde{u} - 1) + \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \tilde{p}_p + \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \right\} - \frac{m_e}{m_p} \tilde{\rho}_p E \left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) + \tilde{E}_0 \right) - \\ & - \tilde{\rho}_e E \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} - \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) - \tilde{E}_0 \right) + \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left(2 \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \tilde{p}_p (1 - \tilde{u}) - \tilde{\rho}_p \tilde{u} (1 - \tilde{u})^2 \right) - \right. \right. \\ & - \left. \frac{m_e}{m_p} \tilde{\rho}_p (1 - \tilde{u}) E \left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) + \tilde{E}_0 \right) \right] \right\} + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left(2 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e (1 - \tilde{u}) - \tilde{\rho}_e \tilde{u} (1 - \tilde{u})^2 \right) - \right. \right. \\ & - \left. \tilde{\rho}_e (1 - \tilde{u}) E \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} - \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) - \tilde{E}_0 \right) \right] \right\} + \frac{H}{\tilde{u}^2} E \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^2 \left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) + \tilde{E}_0 \right) \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_p (\tilde{u} - 1)) \right) + \\ & + \frac{H}{\tilde{u}^2} E \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} - \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) - \tilde{E}_0 \right) \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_e (\tilde{u} - 1)) \right) - \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{p}_p \tilde{u}) \right\} - \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{p}_e \tilde{u}) \right\} + \\ & + \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^2 E \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) + \tilde{E}_0 \right) \tilde{\rho}_p \tilde{u} \right] \right\} + E \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} - \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) - \tilde{E}_0 \right) \tilde{\rho}_e \tilde{u} \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

физические величины, характеризующие состояние системы, также не зависят от \tilde{y} .

В результате усреднения получим следующую систему уравнений:

уравнение Пуассона для самосогласованного потенциала электрического поля φ :

$$\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}^2} = -4\pi R \left\{ \frac{m_e}{m_p} \left[\tilde{\rho}_p - \frac{m_e H}{m_p \tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_p (\tilde{u} - 1)) \right] - \left[\tilde{\rho}_e - \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_e (\tilde{u} - 1)) \right] \right\}. \quad (7)$$

уравнение неразрывности для положительных частиц:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_p (1 - \tilde{u})] + \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_p (\tilde{u} - 1)^2] \right\} + \\ & + \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \tilde{p}_p - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{m_e}{m_p} \tilde{\rho}_p E \left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) + \tilde{E}_0 \right) \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

уравнение неразрывности для электронов:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_e (1 - \tilde{u})] + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_e (\tilde{u} - 1)^2] \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \tilde{p}_e - \right. \right. \\ & \left. \left. - \tilde{\rho}_e E \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} - \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) - \tilde{E}_0 \right) \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

уравнение энергии для положительных частиц:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left[\tilde{\rho}_p \tilde{u}^2 (\tilde{u} - 1) + 5 \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \tilde{p}_p \tilde{u} - 3 \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \tilde{p}_p \right] - 2 \frac{m_e}{m_p} \tilde{\rho}_p E \left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) + \tilde{E}_0 \right) \tilde{u} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{m_e}{m_p} \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left(-\tilde{\rho}_p \tilde{u}^2 (1 - \tilde{u})^2 + 7 \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \tilde{p}_p \tilde{u} (1 - \tilde{u}) + 3 \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \tilde{p}_p (\tilde{u} - 1) - \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \tilde{p}_p \tilde{u}^2 - 5 \frac{V_{0p}^4}{u_0^4} \frac{\tilde{p}_p^2}{\tilde{\rho}_p} \right) \right. \right. \\
 & + E \left(-2 \frac{m_e}{m_p} \tilde{\rho}_p \tilde{u} (1 - \tilde{u}) + \frac{m_e}{m_p} \tilde{\rho}_p \tilde{u}^2 + 5 \frac{m_e}{m_p} \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \tilde{p}_p \right) \left. \left. \left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \right. \right. \right. \\
 & \left. \left. \left. + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) + \tilde{E}_0 \right) \right] \right\} + 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} E \left(\frac{m_e}{m_p} \right) \left[-\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_p \tilde{u} (1 - \tilde{u})) + \right. \\
 & \left. + \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \tilde{p}_p \right] \left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) + \tilde{E}_0 \right) - \\
 & - 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} E^2 \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^3 \tilde{\rho}_p \left[\left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) + \tilde{E}_0 \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\tilde{U}'_{10} \sin \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) \right)^2 + \right. \\
 & \left. + \frac{3}{2} \left(\tilde{U}'_{10} \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) \right)^2 + 6(\tilde{U}'_{11})^2 + \frac{16}{\pi} (\tilde{U}'_{10} \tilde{U}'_{11}) \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) \right] = \\
 & = -\frac{\tilde{u}^2}{Hu_0^2} (V_{0p}^2 \tilde{p}_p - \tilde{p}_e V_{0e}^2) \left(1 + \frac{m_p}{m_e} \right).
 \end{aligned} \tag{11}$$

уравнение энергии для электронов:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left[\tilde{\rho}_e \tilde{u}^2 (\tilde{u} - 1) + 5 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \tilde{u} - 3 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \right] - 2 \tilde{\rho}_e \tilde{u} E \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} - \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) - \tilde{E}_0 \right) + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left(-\tilde{\rho}_e \tilde{u}^2 (1 - \tilde{u})^2 + 7 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \tilde{u} (1 - \tilde{u}) + 3 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e (\tilde{u} - 1) - \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \tilde{u}^2 - 5 \frac{V_{0e}^4}{u_0^4} \frac{\tilde{p}_e^2}{\tilde{\rho}_e} \right) \right. \right. \\
 & + E \left(-2 \tilde{\rho}_e \tilde{u} (1 - \tilde{u}) + \tilde{\rho}_e \tilde{u}^2 + 5 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \right) \left. \left. \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} - \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) - \tilde{E}_0 \right) \right] \right\} + \\
 & + E \left(-2 \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_e \tilde{u} (1 - \tilde{u})) + 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \tilde{p}_e \right) \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} - \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) - \tilde{E}_0 \right) - \\
 & - 2E^2 \frac{H}{\tilde{u}^2} \tilde{\rho}_e \left[\left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) + \tilde{E}_0 \right)^2 + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2} \left(\tilde{U}'_{10} \sin \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) \right)^2 + \frac{3}{2} \left(\tilde{U}'_{10} \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) \right)^2 + 6(\tilde{U}'_{11})^2 + \frac{16}{\pi} (\tilde{U}'_{10} \tilde{U}'_{11}) \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) \right] = \\
 & = -\frac{\tilde{u}^2}{Hu_0^2} (V_{0e}^2 \tilde{p}_e - V_{0p}^2 \tilde{p}_p) \left(1 + \frac{m_p}{m_e} \right).
 \end{aligned} \tag{12}$$

Здесь, кроме указанных выше, введены следующие масштабы и обозначения:

$u = u_0 \tilde{u}$ – гидродинамическая скорость; $\rho_e = \rho_0 \tilde{\rho}_e$,
 $\rho_p = \rho_0 \tilde{\rho}_p$ – плотности электронов и положительных частиц; $p_e = \rho_0 V_{0e}^2 \tilde{p}_e$, $p_p = \rho_0 V_{0p}^2 \tilde{p}_p$ – электронное давление и давление положительных частиц, где V_{0e} , V_{0p} – масштабы

тепловой скорости для электронов и положительных частиц;

Для параметров нелокальности принято:

$$\begin{aligned}
 \tau_e &= \frac{x_0 H}{u_0 \tilde{u}^2}, \tau_p = \frac{m_e x_0 H}{m_p u_0 \tilde{u}^2}, \\
 \frac{1}{\tau_{ep}} &= \frac{1}{\tau_e} + \frac{1}{\tau_p} = \frac{u_0 \tilde{u}^2}{x_0 H} \left(1 + \frac{m_p}{m_e} \right).
 \end{aligned} \tag{13}$$

безразмерный параметр

$$H = \frac{N_R \hbar}{m_e x_0 u_0}, \quad (14)$$

N_R – целое число.

Введены также безразмерные параметры

$$R = \frac{e \rho_0 x_0^2}{m_e \varphi_0}, \quad E = \frac{e \varphi_0}{m_e u_0^2}. \quad (15)$$

2. Выбор параметров математического моделирования

Математическое моделирование проводилось с помощью пакета Maple 9 и старших версий. При

расчетах было принято $\frac{m_e}{m_p} = 5 \cdot 10^{-5}$, то есть m_p

принимали порядка массы атома углерода.

Для численного решения системы уравнений при обезразмеривания физических величин были выбраны следующие независимые масштабы: $\rho_0 = 10^{-10} \text{ г/см}^3$, $u_0 = 5 \cdot 10^6 \text{ см/с}$, $V_{0e} = 5 \cdot 10^6 \text{ см/с}$,

$V_{0p} = 5 \cdot 10^4 \text{ см/с}$ (масштабы тепловых скоростей соответствовали $T \sim 300^\circ\text{К}$), $x_0 = a = 0.142 \text{ нм}$,

$$\varphi_0 = 10^{-4} \frac{e}{a} = 3.4 \cdot 10^{-6} \text{ ГЦЭ} \varphi.$$

При данных численных значениях масштабов значения безразмерных параметров составили: $R = 3 \cdot 10^{-3}$, $E = 0.1$ (см. (15)), $H = 15$ (см. (14)), при $N_R = 1$.

При таком выборе независимых масштабов характерные для данной физической задачи значения начальных условий были выбраны следующим образом (см. также [5]): $\tilde{\rho}_e(0) = 1$, $\tilde{\rho}_p(0) = 2 \cdot 10^4$, $\tilde{v}_e(0) = 1$, $\tilde{v}_p(0) = 2 \cdot 10^4$, $\tilde{\varphi}(0) = 1$.

Было принято также $\frac{\partial \tilde{\rho}_e}{\partial \tilde{\xi}}(0) = 0$, $\frac{\partial \tilde{\rho}_p}{\partial \tilde{\xi}}(0) = 0$. В работе

[5] отмечался небольшой рост давления положительных частиц в направлении оси x , в связи с чем при выборе начальных условий в ряде рассчитанных вариантов была задана небольшая положительная производная $\frac{\partial \tilde{p}_p}{\partial \tilde{\xi}}(0)$ (см. табл.1).

Будем считать, что характерные значения потенциала решетки $U \sim V_{1,(10)} \sim V_{1,(11)} \sim \varphi_0$, тогда в соответствии с (6) выберем $\tilde{U}'_{10} = 10$, $\tilde{U}'_{11} = 10$.

При выборе значений напряженности электрического поля для численных расчетов учтем, что

$$E_0 = \frac{\varphi_0}{x_0} \tilde{E}_0 = 10^{-4} \frac{e}{a^2} \tilde{E}_0 = 238 \text{ ГЦЭ} \tilde{E}_0 = 7.14 \cdot 10^6 \frac{B}{\text{м}} \tilde{E}_0,$$

то есть даже при $\tilde{E}_0 = 1$ мы имеем дело с достаточно сильными полями. Однако можно предположить, что именно достаточно сильные поля, влияние которых сравнимо с влиянием кулоновских взаимодействий в решетке, способны повлиять на структуру солитонов. Например, в

работе [9] исследуется возникновение нелинейных эффектов в графене при наложении внешнего поля $10^7 - 10^8 \frac{B}{\text{м}}$. Выбранные для числен-

ных расчетов значения \tilde{E}_0 приведены в табл.1. Варианты 3.0, 3.1 рассмотрены в качестве предельных вариантов численных расчетов с экстремально сильным полем.

В табл.1 приведены также начальные условия для градиента потенциала самосогласованного поля, выбранные таким образом, чтобы самосогласованное поле в солитоне могло уравновесить приложенное внешнее поле.

Таблица 1. Параметры, варьируемые при численных расчетах

№ варианта	\tilde{E}_0	$\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}}(0)$	$\frac{\partial \tilde{p}_p}{\partial \tilde{\xi}}(0)$	$\frac{\partial \tilde{\rho}_e}{\partial \tilde{\xi}}(0)$
1.0	10	10	0	0
1.1	10	10	10	-1
2.0	100	100	0	0
2.1	100	100	10	0
3.0	10000	10000	0	0
3.1	10000	10000	10	-1

3. Результаты численного решения системы гидродинамических уравнений

Последующие рисунки отражают результаты проведенных вычислений. На рисунках используются обозначения: ρ – плотность $\tilde{\rho}_p$, s – плотность $\tilde{\rho}_e$, u – скорость \tilde{v} , p – давление \tilde{p}_p , q – давление \tilde{p}_e , v – самосогласованный потенциал $\tilde{\varphi}$, $D(v)(t) = \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}}$. Независимая переменная t на оси абсцисс соответствует переменной $\tilde{\xi}$.

Напомним, что изначально в систему гидродинамических уравнений была введена переменная $\tilde{\xi} = \tilde{x} - \tilde{t}$, то есть мы искали объекты, движущиеся не разрушаясь с постоянной скоростью $\tilde{u} = 1$. Поэтому полученные решения имеют физический смысл в тех областях одномерного пространства, в которых с высокой точностью сохраняется постоянная гидродинамическая скорость. Поскольку никакие специальные граничные условия не используются в рассматриваемых расчетах, то размер области существования имеющего физический смысл решения позволяет судить о размерах возникающего солитона.

Рис. 1–10 соответствуют напряженности внешнего поля $\tilde{E}_0 = 10$, рис. 11–20 соответствуют напряженности внешнего поля $\tilde{E}_0 = 100$, и рис. 21–31 соответствуют экстремально сильным полям $\tilde{E}_0 = 10000$.

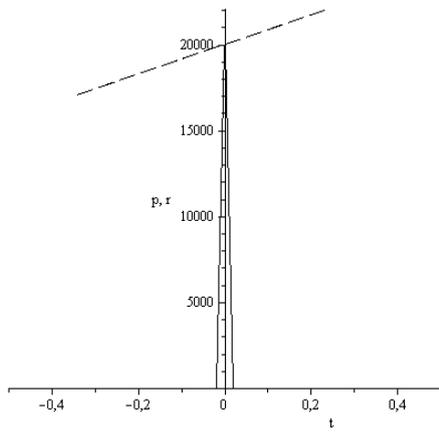


Рис. 1. γ – плотность положительных частиц (сплошная линия); p – давление положительных частиц (Вариант 1.0).

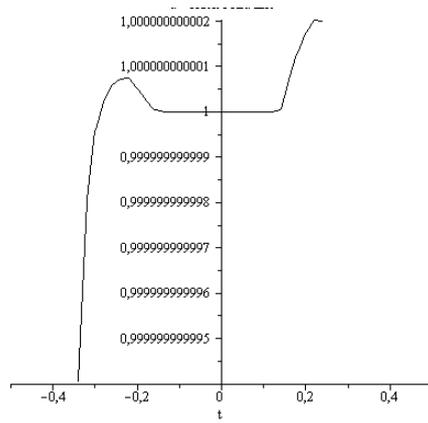


Рис. 2. u – скорость \tilde{u} (Вариант 1.0).

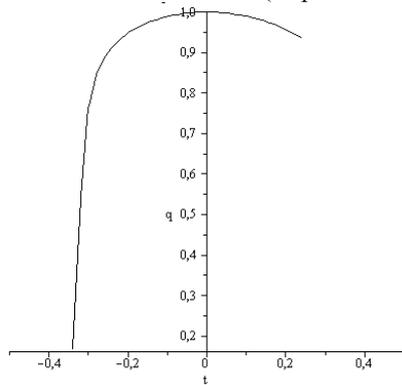


Рис. 3. q – электронное давление (Вариант 1.0).

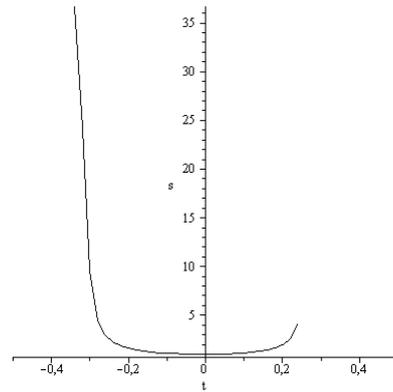


Рис. 4. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$ (Вариант 1.0).

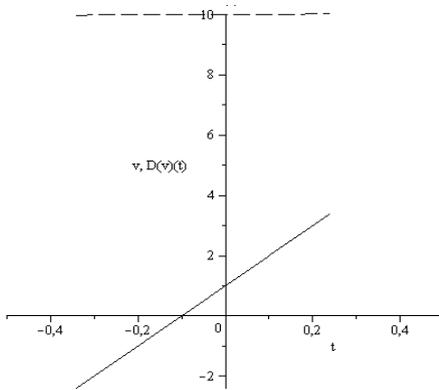


Рис. 5. v – потенциал $\tilde{\varphi}$ (сплошная линия); $D(v)(t)$ (Вариант 1.0).

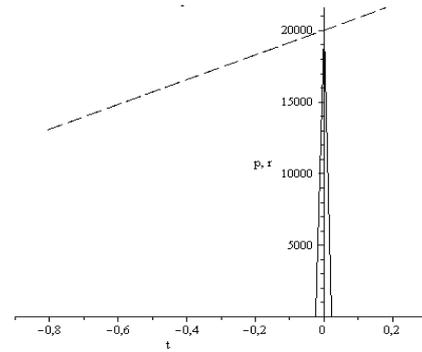


Рис. 6. γ – плотность положительных частиц (сплошная линия); p – давление положительных частиц (Вариант 1.1).

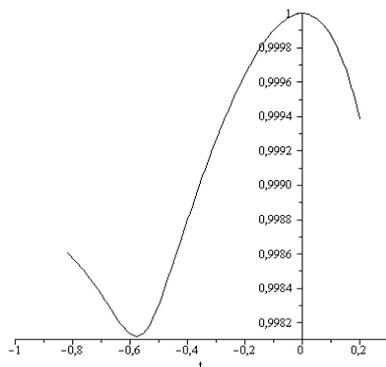


Рис. 7. u – скорость \tilde{u} (Вариант 1.1).

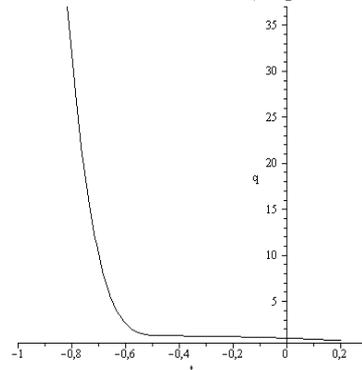


Рис. 8. q – электронное давление (Вариант 1.1).

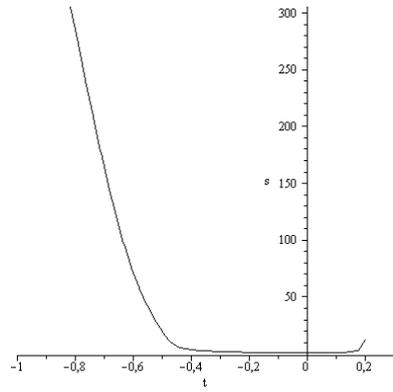


Рис. 9. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$ (Вариант 1.1).

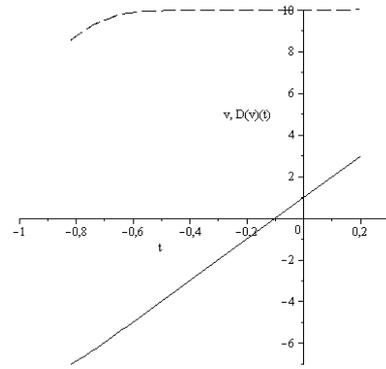


Рис. 10. v – потенциал $\tilde{\varphi}$ (сплошная линия); $D(v)(t)$ (Вариант 1.1).

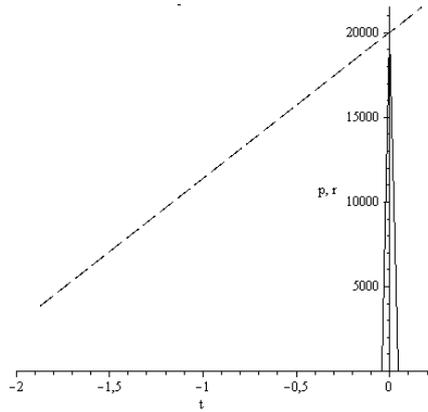


Рис. 11. r – плотность положительных частиц (сплошная линия); p – давление положительных частиц (Вариант 2.0).

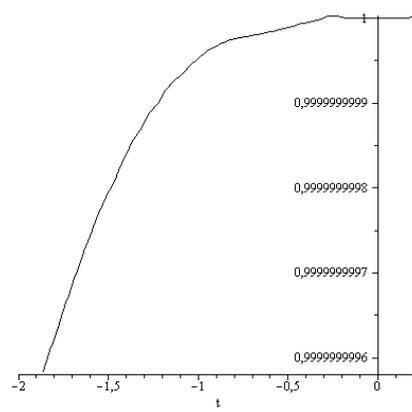


Рис. 12. u – скорость \tilde{u} (Вариант 2.0).

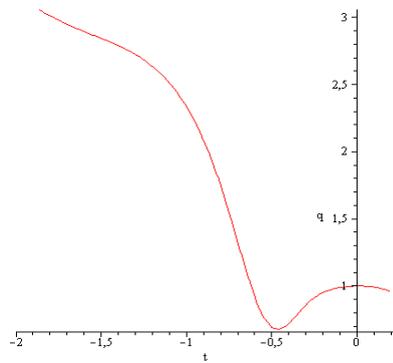


Рис. 13. q – электронное давление (Вариант 2.0).

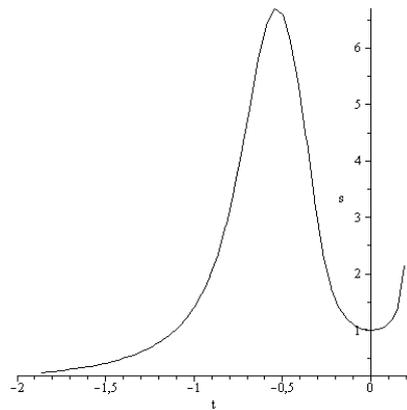


Рис. 14. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$ (Вариант 2.0).

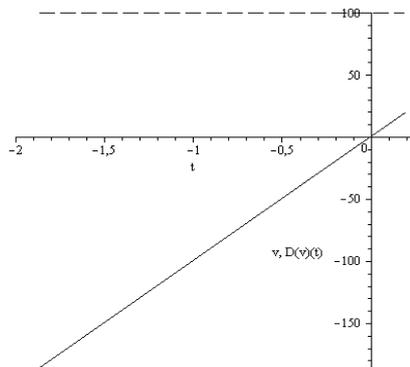


Рис. 15. v – потенциал $\tilde{\varphi}$ (сплошная линия); $D(v)(t)$ (вариант 2.0).

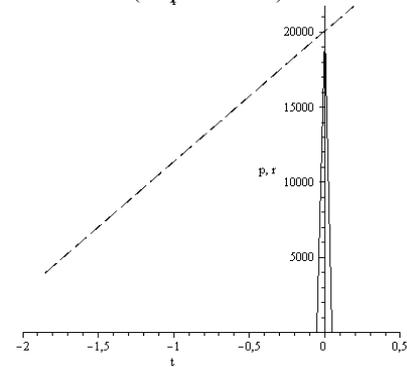


Рис. 16. r – плотность положительных частиц (сплошная линия); p – давление положительных частиц (Вариант 2.1).

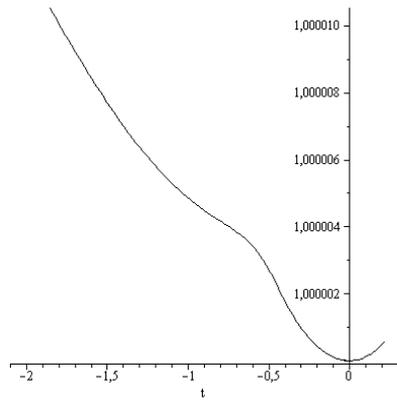


Рис. 17. u – скорость \tilde{u} (Вариант 2.1).

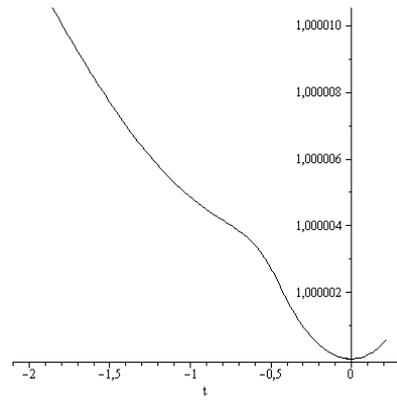


Рис. 18. q – электронное давление (Вариант 2.1).

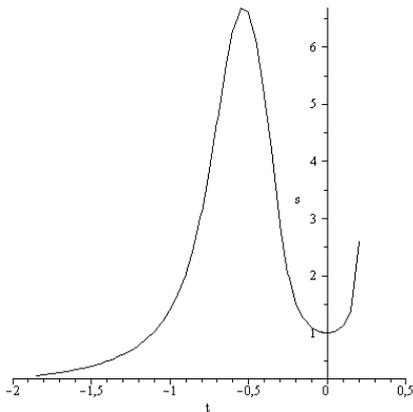


Рис. 19. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$ (Вариант 2.1).

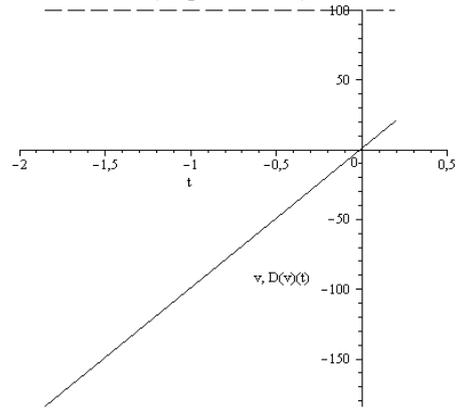


Рис. 20. v – потенциал $\tilde{\varphi}$ (сплошная линия); $D(v)(t)$ (Вариант 2.1).

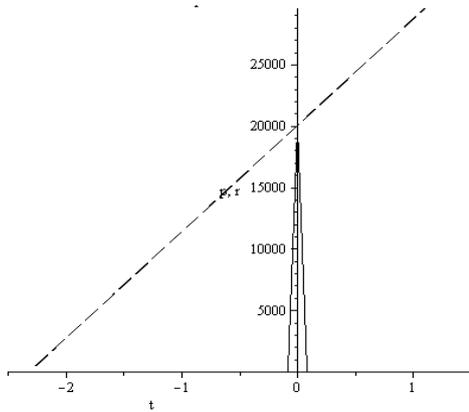


Рис. 21. r – плотность положительных частиц (сплошная линия); p – давление положительных частиц (Вариант 3.0).

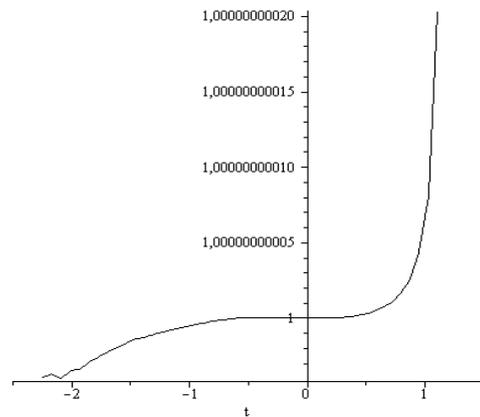


Рис. 22. u – скорость \tilde{u} (Вариант 3.0).

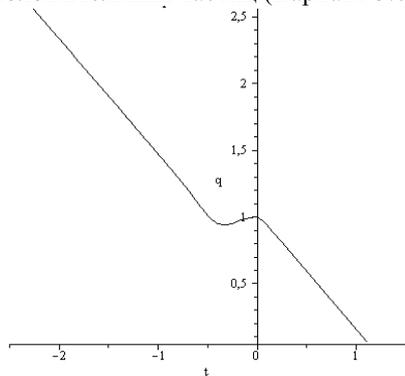


Рис. 23. q – электронное давление (Вариант 3.0).

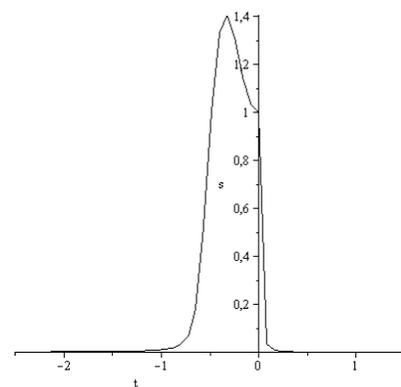


Рис. 24. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$ (Вариант 3.0).

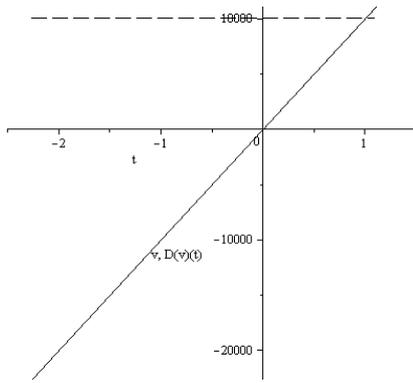


Рис. 25. v – потенциал $\tilde{\varphi}$ (сплошная линия); $D(v)(t)$ (Вариант 3.0).

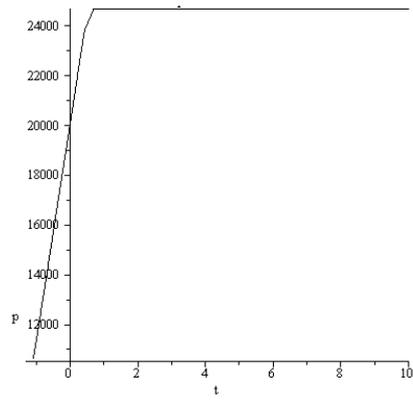


Рис. 26. p – давление положительных частиц (Вариант 3.1).

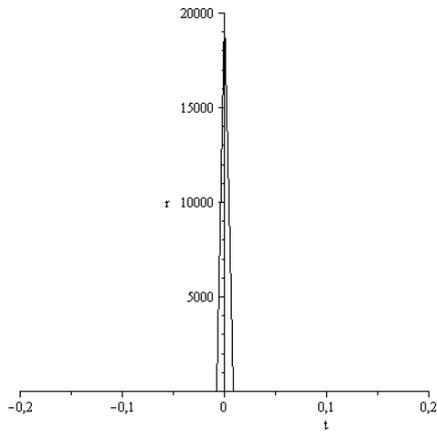


Рис. 27. r – плотность положительных частиц (Вариант 3.1).

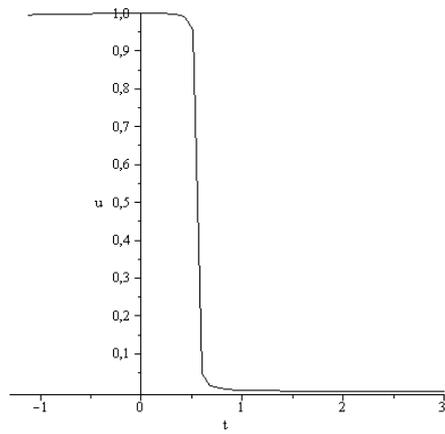


Рис. 28. u – скорость \tilde{u} (Вариант 3.1).

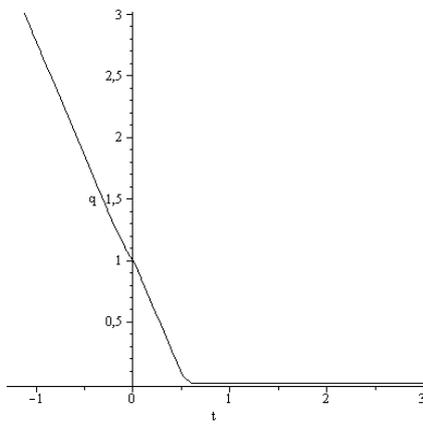


Рис. 29. q – электронное давление (Вариант 3.1).

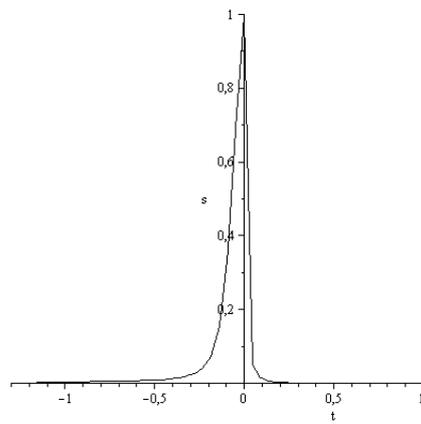


Рис. 30. s – электронная плотность (Вариант 3.1).

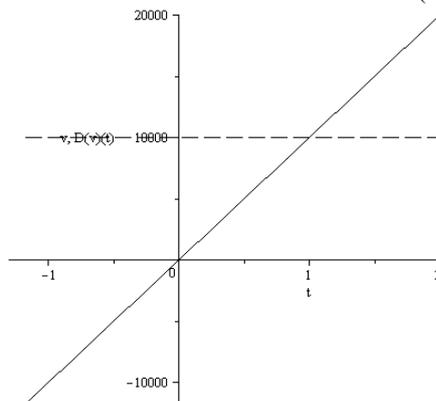


Рис. 31. v – потенциал $\tilde{\varphi}$ (сплошная линия); $D(v)(t)$ (Вариант 3.1).

Рассмотрим теперь основные свойства образующихся солитонов и зависимость их структуры от величины внешнего поля:

1) Размер солитона определяется областью, где гидродинамическая скорость $\tilde{u} = 1$ и не зависит от $\tilde{\xi}$. Это означает, что солитон не разрушается в процессе своего движения. Размер солитона практически не зависит от выбранного метода численных расчетов.

2) Иногда область существования солитона может не совпадать с интервалом, где формально существует численное решение системы (7)–(12) (см., например, рис. 26–31).

3) В области, где существует солитон, скорость \tilde{u} остается постоянной с очень высокой точностью, практически совпадающей с точностью используемого метода расчета (см. рис. 2, 7, 12, 17, 22, 28).

4) Как правило, наблюдается рост размера солитона с увеличением внешнего поля. Так, при $\tilde{E}_0 = 10$ размер солитона составлял порядка $0.6 - 1a$ (см. рис. 2,7), при $\tilde{E}_0 = 100$ – порядка $2a$ (см. рис. 12, 17).

5) Под влиянием внешнего поля электронное облако смещается в направлении, противоположном полю (в область отрицательных $\tilde{\xi}$) (см. рис. 4, 9, 14, 19, 24). При этом солитон теряет свою симметрию относительно начала координат ($\tilde{\xi} = 0$), где расположено положительное «ядро» (см. рис. 1, 6, 11, 16, 21, 27).

6) Перераспределение самосогласованного эффективного заряда создает внутри солитона самосогласованное поле, направленное противоположно приложенному внешнему полю (см. рис. 5, 10, 15, 20, 25, 31).

7) Квантовое давление положительных частиц \tilde{p}_p растет с ростом $\tilde{\xi}$ (см. рис. 1, 6, 11,

16, 21, 26). Электронное квантовое давление \tilde{p}_e при достаточно высоких полях и малых $\tilde{\xi}$ убывает с ростом $\tilde{\xi}$ (см. рис. 13, 18, 23, 29), в некоторых областях зависимость от $\tilde{\xi}$ более сложная. Можно предположить, что зависимость квантовых давлений \tilde{p}_p и \tilde{p}_e от $\tilde{\xi}$ определяется особенностями структурной перестройки частиц в процессе движения солитона.

8) Отметим, что изменение условий Коши для производных $\frac{\partial \tilde{p}_p}{\partial \tilde{\xi}}(0)$, $\frac{\partial \tilde{p}_e}{\partial \tilde{\xi}}(0)$ (см. результа-

ты расчетов по вариантам 1.0 и 1.1, 2.0 и 2.1, а также табл.1) практически не повлияло на основные характеристики солитонов. Некоторые отличия вариантов 3.0 и 3.1 могут объясняться экстремально большой величиной используемых в численных расчетах полей.

Заключение

Таким образом, с помощью численного решения системы нелокальных гидродинамических уравнений установлено, что наложение на кристаллическую структуру графена внешнего электрического поля, вплоть до экстремально высоких напряженностей, не разрушает образующиеся объекты солитонного типа, а лишь приводит к их структурной перестройке и некоторому увеличению размеров до 2-3 межатомных расстояний. Другими словами, нелокальная гидродинамика численно описывает движение флуктуаций типа волн зарядовой плотности в кристаллической решетке, в том числе в электрических полях. Это дает возможность применять данный подход для моделирования высокотемпературной сверхпроводимости и сопутствующих ей эффектов в графене и других веществах.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Садовский М.В. Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках // Успехи физ. наук. 2001. Т. 171. № 5. С. 539–564.
2. Kohsaka Y., Hanaguri T., Azuma M., Takano M., Davis J.C., Takagi H. Visualization of the emergence of the pseudogap state and the evolution to superconductivity in a lightly hole-doped Mott insulator // Nature Physics. 2012. V. 8. № 7. P. 534–538. doi:10.1038/nphys2321.
3. Chang J, Blackburn E., Holmes A.T., Christensen N.B., Larsen J., Mesot J, Ruixing Liang, Bonn D.A., Hardy W.N., Watenphul A., v. Zimmermann M., Forgan E.M., Hayden S.M. Direct observation of competition between superconductivity and charge density wave order in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$. 2012. ArXiv: 1206.4333v2[cond-mat.supr-con].
4. Алексеев Б.В. К нелокальной теории высокотемпературной сверхпроводимости // Вестник МИТХТ. 2012. Т. 7. № 3. С. 3–21.
5. Алексеев Б.В., Овчинникова И.В. Гидродинамическое описание движения электронов в кристаллической решетке графена // Вестник МИТХТ. 2013. Т. 8. № 5. С. 20–39.
6. Pathak S., Shenoy V.B., Baskaran G. Possibility of high T_c superconductivity in doped graphene. 2008. ArXiv: 0809.0244v1[cond-mat.supr-con].
7. Savini G., Ferrari A.C., Giustino F. Doped graphane: a prototype high- T_c electron-phonon superconductor. 2010. ArXiv:1002.0653v1[cond-mat.mtrl-sci].

8. Loktev V.M., Turkowski V. Possible high-temperature superconductivity in multilayer graphane: Can the cuprates be beaten? 2011. ArXiv:1102.4596v1[cond-mat.supr-con].

9. Белоненко М.Б., Лебедев Н.Г., Пак А.В., Янющкина Н.Н. Спонтанное поперечное поле в примесном графене // Журн. техн. физики. Т. 81. Вып. 8. С. 64–69.

ABOUT THE CHARGE TRANSFER IN THE GRAPHENE LATTICE

B.V. Alexeev[®], I.V. Ovchinnikova

M.V. Lomonosov Moscow State University of Fine Chemical Technologies, Moscow, 119571 Russia

[®] *Corresponding author e-mail: boris.vlad.alexeev@gmail.com*

The charged particles motion in graphene under the influence of an external electric field in the frame on the non-local quantum hydrodynamic description is considered. With the help of the numerical solution of a system of non-local hydrodynamic equations the dependence of the soliton structures on the external electric field is investigated.

Keywords: *quantum non-local hydrodynamics, theory of transport processes in graphene, solitons.*