

ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ 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 в рамках квантового нелокального гидродинамического описания. В результате численного решения системы нелокальных гидродинамических уравнений установлено, что частицы формируют объекты солитонного типа. Исследована зависимость размеров и структуры солитонов от различных физических параметров.

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

Введение

Применение нелокальных гидродинамических уравнений дает хорошие результаты в различных областях физики [1, 2]. В частности, рассмотрение движения электронов и ионов в плазме в самосогласованном электрическом поле приводит к появлению решений солитонного типа [3, 4]. Такого же типа решения были получены и для движения заряженных частиц в металле при наличии внешнего электрического поля [5]. Можно предположить, что образование солитонов является причиной высокой подвижности заряженных частиц. В частности, в работе [6] отмечается, что ряд экспериментальных данных и теоретических соображений указывает на возможность расслоения фаз в системах с высокотемпературной проводимостью. Это расслоение происходит на микроскопических масштабах, и в системе возникают «металлические» (сверхпроводящие) домены с характерными размерами порядка нескольких межатомных расстояний. Возможно, именно эти сверхпроводящие области описываются решениями солитонного типа. В последнее время были проведены [7] прямые наблюдения образования сверхпроводящих областей на примере купратов типа $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ с помощью электронных микроскопов. Эти области визуализируются как упорядоченные структуры солитонного типа.

Известно, что графен является перспективным материалом для современной электроники, обладающим уникальными свойствами вследствие особенностей его зонной структуры [8, 9]. В частности, подвижность носителей в графене теоретически может достигать $2 \cdot 10^6 \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$. Данные ряда исследований [10] указывают на возможность существования высокотемпературной сверхпроводимости в графене. Представляет интерес рассмотреть движение электронов в графене с помощью системы нелокальных гидродина-

мических уравнений методами нелокальной квантовой гидродинамики.

1. Обобщенные квантовые гидродинамические уравнения для движения солитона в кристаллической решетке

Рассмотрим кристалл графена, в котором индуцированы электроны проводимости (например, подачей положительного напряжения на изолированный затвор). Будем рассматривать движение частиц в кристаллической решетке графена в рамках следующей модели. Будем считать, что движение электрона проводимости по кристаллу сопровождается перемещением положительного поляризационного заряда, возникающего в результате воздействия электрона на близлежащий атом с его электронной оболочкой. Этот поляризационный заряд в первом приближении будем рассматривать как квазичастицу (совокупность квазичастиц) с зарядом e и эффективной массой m_p . Таким образом, в рамках этого подхода проводимость в графене сопровождается перемещением положительных ($+e$, m_p) и отрицательных ($-e$, m_e) зарядов. Будем искать решения солитонного типа системы обобщенных гидродинамических уравнений для двухкомпонентной смеси [1, 3, 4]. Поскольку кристаллическая решетка графена является плоской структурой, данную систему уравнений будем рассматривать в двумерном случае (в координатах x и y). Предположим, что солитон движется по оси x со скоростью $u_0 = \text{const}$, и введем переменную $\xi = x - u_0 t$, то есть перейдем в подвижную систему координат.

Гидродинамические уравнения выпишем в безразмерном виде, введя масштабы для физических величин. Значком «тильда» будем указывать, что соответствующая переменная является безразмерной.

Имеем: $u = u_0 \tilde{u}$ – гидродинамическая скорость; $\xi = x_0 \tilde{\xi}$, $y = x_0 \tilde{y}$; $\varphi = \varphi_0 \tilde{\varphi}$ – самосогласованный электрический потенциал; $\rho_e = \rho_0 \tilde{\rho}_e$, $\rho_p = \rho_0 \tilde{\rho}_p$ –

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 да-
 вление и давление положительных частиц, где
 V_{0e} , V_{0p} – масштабы тепловой скорости для
 электронов и положительных частиц; $F_e = \frac{e\varphi_0}{m_e x_0} \tilde{F}_e$,

$F_p = \frac{e\varphi_0}{m_p x_0} \tilde{F}_p$ – силы, действующие на единицу
 массы электронов и положительных частиц,
 где m_e , m_p – массы электронов и положи-
 тельных частиц.

Для параметров нелокальности принимаем (см. также [1, 3])

$$\tau_e = \frac{x_0 H}{u_0 \tilde{u}^2}, \tau_p = \frac{m_e x_0 H}{m_p u_0 \tilde{u}^2}, \frac{1}{\tau_{ep}} = \frac{1}{\tau_e} + \frac{1}{\tau_p} = \frac{u_0}{x_0} \frac{\tilde{u}^2}{H} \left(1 + \frac{m_p}{m_e}\right). \quad (1)$$

Здесь введен безразмерный параметр $H = \frac{N_R \hbar}{m_e x_0 u_0}$, N_R – целое число. Введем также безразмерные
 параметры

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

С учетом введенных обозначений и параметров безразмерная система нелокальных
 гидродинамических уравнений для двумерного солитона в подвижной системе координат имеет вид
 (см. также [3]):

Безразмерное уравнение Пуассона для самосогласованного потенциала электрического поля

$$\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{y}^2} = -4\pi R \left\{ \frac{m_e}{m_p} \left[\tilde{\rho}_p - \frac{m_e H}{m_p \tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_p (\tilde{u} - 1)) \right] - \left[\tilde{\rho}_e - \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_e (\tilde{u} - 1)) \right] \right\}. \quad (3)$$

Уравнение неразрывности для положительных частиц

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_p (1 - \tilde{u})] + \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_p (\tilde{u} - 1)^2] \right\} + \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \tilde{p}_p - \frac{m_e}{m_p} E \tilde{\rho}_p \tilde{F}_{p\xi} \right] \right\} + \\ & + \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \tilde{p}_p - \frac{m_e}{m_p} E \tilde{\rho}_p \tilde{F}_{py} \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Уравнение неразрывности для электронов

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_e (1 - \tilde{u})] + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_e (\tilde{u} - 1)^2] \right\} + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \tilde{p}_e - \tilde{\rho}_e E \tilde{F}_{e\xi} \right] \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \tilde{p}_e - \tilde{\rho}_e E \tilde{F}_{ey} \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

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 \tilde{F}_{p\xi} - \tilde{\rho}_e E \tilde{F}_{e\xi} + \\ & + \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) - \frac{m_e}{m_p} \tilde{\rho}_p E \tilde{F}_{p\xi} (1 - \tilde{u}) \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) - \tilde{\rho}_e E \tilde{F}_{e\xi} (1 - \tilde{u}) \right] \right\} + \frac{H}{\tilde{u}^2} E \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^2 \tilde{F}_{p\xi} \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_p (\tilde{u} - 1)) \right) + \\ & + \frac{H}{\tilde{u}^2} E \tilde{F}_{e\xi} \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\} - \\ & - \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} (\tilde{p}_p \tilde{u}) \right\} - \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} (\tilde{p}_e \tilde{u}) \right\} + \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} E [\tilde{F}_{p\xi} \tilde{\rho}_p \tilde{u}] \right\} + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} E [\tilde{F}_{e\xi} \tilde{\rho}_e \tilde{u}] \right\} + \\ & + \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} E [\tilde{F}_{py} \tilde{\rho}_p \tilde{u}] \right\} + \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} E [\tilde{F}_{ey} \tilde{\rho}_e \tilde{u}] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Уравнение энергии для положительных частиц

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial \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 \tilde{F}_{p\xi} \tilde{u} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{m_e}{m_p} \left[\frac{\partial}{\partial \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. \\
 & \left. \left. - 2 \frac{m_e}{m_p} E \tilde{F}_{p\xi} \tilde{\rho}_p \tilde{u} (1 - \tilde{u}) + \frac{m_e}{m_p} \tilde{\rho}_p \tilde{u}^2 E \tilde{F}_{p\xi} + 5 \frac{m_e}{m_p} \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \tilde{p}_p E \tilde{F}_{p\xi} \right] - \right\} - \\
 & - \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{m_e}{m_p} \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\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) - \frac{m_e}{m_p} \tilde{\rho}_p E \tilde{F}_{p\eta} \tilde{u}^2 - 5 \frac{m_e}{m_p} \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \tilde{p}_p E \tilde{F}_{p\eta} \right] - \right\} - \\
 & - 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^2 E \tilde{F}_{p\xi} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\tilde{\rho}_p \tilde{u} (1 - \tilde{u})) \right] - 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^3 \tilde{\rho}_p E^2 \left[(\tilde{F}_{p\xi})^2 + (\tilde{F}_{p\eta})^2 \right] + \\
 & + 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^2 E \tilde{F}_{p\xi} \left[\frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \tilde{p}_p \right] + 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^2 E \tilde{F}_{p\eta} \left[\frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \tilde{p}_p \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} \quad (7)$$

Уравнение энергии для электронов

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\tilde{\rho}_e \tilde{u}^2 (\tilde{u} - 1) + 5 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \tilde{u} - 3 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \right] - 2 \tilde{\rho}_e E \tilde{F}_{e\xi} \tilde{u} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(-\tilde{\rho}_e \tilde{u}^2 (1 - \tilde{u})^2 + 7 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \tilde{u} (1 - \tilde{u}) + 3 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e (\tilde{u} - 1) - \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \tilde{u}^2 - 5 \frac{V_{0e}^4}{u_0^4} \frac{\tilde{p}_e^2}{\tilde{\rho}_e} \right) - \right. \right. \\
 & \left. \left. - 2 E \tilde{F}_{e\xi} \tilde{\rho}_e \tilde{u} (1 - \tilde{u}) + \tilde{\rho}_e \tilde{u}^2 E \tilde{F}_{e\xi} + 5 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e E \tilde{F}_{e\xi} \right] - \right\} - \\
 & - \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e \tilde{u}^2 + 5 \frac{V_{0e}^4}{u_0^4} \frac{\tilde{p}_e^2}{\tilde{\rho}_e} \right) - \tilde{\rho}_e E \tilde{F}_{e\eta} \tilde{u}^2 - 5 \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \tilde{p}_e E \tilde{F}_{e\eta} \right] - \right\} - \\
 & - 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} E \tilde{F}_{e\xi} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (\tilde{\rho}_e \tilde{u} (1 - \tilde{u})) \right] - 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} \tilde{\rho}_e E^2 \left[(\tilde{F}_{e\xi})^2 + (\tilde{F}_{e\eta})^2 \right] + \\
 & + 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} E \tilde{F}_{e\xi} \left[\frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \tilde{p}_e \right] + 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} E \tilde{F}_{e\eta} \left[\frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \tilde{p}_e \right] = - \frac{\tilde{u}^2}{Hu_0^2} (V_{0e}^2 \tilde{p}_e - V_{0p}^2 \tilde{p}_p) \left(1 + \frac{m_p}{m_e} \right)
 \end{aligned} \quad (8)$$

На частицы действует самосогласованное поле с потенциалом φ , периодический потенциал U , связанный со структурой кристаллической решетки, а также внешнее поле напряженностью $\mathbf{E}$. Тогда

$$\begin{aligned}
 \tilde{F}_{p\xi} &= -\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} - \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \xi} + \tilde{E}_\xi, \quad \tilde{F}_{e\xi} = \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \xi} - \tilde{E}_\xi, \\
 \tilde{F}_{p\eta} &= -\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \eta} - \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \eta} + \tilde{E}_\eta, \quad \tilde{F}_{e\eta} = \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \eta} + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \eta} - \tilde{E}_\eta.
 \end{aligned} \quad (9)$$

Графен – двумерная модификация углерода, образованная слоем атомов углерода толщиной в один атом, соединенных в гексагональную двумерную кристаллическую решетку. Расстояние между ближайшими атомами углерода в графене $a=0.142$ нм. Кристаллическая решетка графена изображена на рис. 1.

В элементарной ячейке содержатся два атома (например, А и В, см. рис. 1), трансляционные векторы $\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3; \sqrt{3})$, $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3; -\sqrt{3})$.

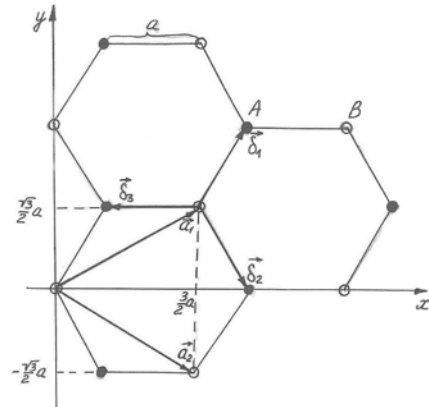


Рис. 1. Кристаллическая решетка графена.

Координаты ближайших соседей к данному атому даются векторами $\delta_1 = \frac{a}{2}(1; \sqrt{3})$, $\delta_2 = \frac{a}{2}(1; -\sqrt{3})$, $\delta_3 = -a(1; 0)$. Шесть соседей второго порядка находятся в узлах, определяемых векторами $\delta'_1 = \pm \mathbf{a}_1$, $\delta'_2 = \pm \mathbf{a}_2$, $\delta'_3 = \pm(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)$. Выберем первый атом элементарной ячейки в точке пересечения осей x и y (рис. 1) и разложим радиус-вектор второго атома базиса по векторам $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$:

$$\mathbf{r}_1 = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 = u\left(3\frac{a}{2}\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\frac{a}{2}\mathbf{e}_y\right) + v\left(3\frac{a}{2}\mathbf{e}_x - \sqrt{3}\frac{a}{2}\mathbf{e}_y\right). \quad (10)$$

Найдем u и v , зная, что

$$\mathbf{r}_1 = \delta_1 = \frac{a}{2}(1; \sqrt{3}) = \frac{a}{2}\mathbf{e}_x + \frac{a}{2}\sqrt{3}\mathbf{e}_y. \quad (11)$$

Приравняв (10) и (11), получим $u = \frac{2}{3}$,

$$v = -\frac{1}{3}, \text{ то есть}$$

$$\mathbf{r}_1 = \frac{2}{3}\mathbf{a}_1 - \frac{1}{3}\mathbf{a}_2. \quad (12)$$

Пусть $V_1(\mathbf{r})$ – периодический потенциал, создаваемый одной подрешеткой. Тогда потенциал кристалла

$$V(\mathbf{r}) = V_1(\mathbf{r}) + V_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) = \sum_{n=0} V_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n). \quad (13)$$

Для приближенного расчета ограничимся членами ряда с $|g_1| \leq 2$, $|g_2| \leq 2$. Получим

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) = & 2V_{1,(00)} + \\ & + 4V_{1,(10)} \left(\cos\left(\frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r}\right) \cos\left(\frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r}\right) + \cos\left(\frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r} + \frac{2\pi}{3}\right) \cos\left(\frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r}\right) \right) + \\ & + 2V_{1,(11)} \left(\cos((\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r}) + \cos\left((\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r} - \frac{2\pi}{3}\right) + 2\cos((\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r}) \right) - \\ & - 4V_{1,(20)} \cos((\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1) \cdot \mathbf{r}) \cos\left((\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_1) \cdot \mathbf{r} + \frac{2\pi}{3}\right) + 2V_{1,(12)} \left(2\cos((\mathbf{b}_1 + 2\mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r}) + 2\cos((2\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r}) + \right. \\ & + \cos((\mathbf{b}_1 - 2\mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r} - \frac{\pi}{3}) - \cos\left((2\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r} - \frac{2\pi}{3}\right) \left. \right) + 2V_{1,(22)} \left(2\cos(2(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r}) - \cos\left(2(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r} - \frac{2\pi}{3}\right) \right). \end{aligned} \quad (19)$$

Перейдем в (19) к координатам x и y , подставив векторы обратной решетки $\mathbf{b}_1$ и $\mathbf{b}_2$ из (15). Получим:

$$\begin{aligned} V(x, y) = & 2V_{1,(00)} + 4V_{1,(10)} \cos\left(\frac{2\pi}{3a}x + \frac{\pi}{3}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{3a}\sqrt{3}y\right) + 2V_{1,(11)} \left(\cos\left(\frac{4\pi}{3a}x - \frac{\pi}{3}\right) + 2\cos\left(\frac{4\pi}{3a}\sqrt{3}y\right) \right) - \\ & - 4V_{1,(20)} \cos\left(\frac{4\pi}{3a}\sqrt{3}y\right) \cos\left(\frac{4\pi}{3a}x + \frac{2\pi}{3}\right) + 4V_{1,(12)} \left(2\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{3a}\sqrt{3}y\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{3a}x - \frac{\pi}{6}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{a}\sqrt{3}y\right) \right) + \\ & + 2V_{1,(22)} \left(2\cos\left(\frac{8\pi}{3a}\sqrt{3}y\right) - \cos\left(\frac{8\pi}{3a}x - \frac{2\pi}{3}\right) \right). \end{aligned} \quad (20)$$

Поскольку атомы в кристалле расположены периодически, то электростатический потенциал в кристалле является периодической функцией $V_1(\mathbf{r}) = V_1(\mathbf{r} + \mathbf{a}_m)$, где для двумерной структуры $\mathbf{a}_m = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2$, m_1 и m_2 – любые целые числа. Разлагая $V_1(\mathbf{r})$ в ряд Фурье, имеем

$$V_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) = \sum_{\mathbf{b}} V_{\mathbf{b}} e^{i\mathbf{b} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)}. \quad (14)$$

В нашем случае оба атома базиса ($n=0,1$) одинаковы.

Здесь $\mathbf{b} = g_1\mathbf{b}_1 + g_2\mathbf{b}_2$, векторы $\mathbf{b}_1$ и $\mathbf{b}_2$ – трансляционные векторы обратной решетки. Для графена

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1; \sqrt{3}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1; -\sqrt{3}). \quad (15)$$

Тогда

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}} \sum_{n=0}^1 V_{1\mathbf{b}} e^{i\mathbf{b} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)} = \sum_{\mathbf{b}} V_{\mathbf{b}} e^{i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}}, \quad (16)$$

где $V_{\mathbf{b}} = V_{1\mathbf{b}} \cdot \sum_n e^{-i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}_n} = V_{1\mathbf{b}} \cdot S_{\mathbf{b}}$. Структурный множитель $S_{\mathbf{b}}$ для графена:

$$S_{\mathbf{b}} = e^{-i\mathbf{b} \cdot 0} + e^{-i\mathbf{b} \cdot \left(\frac{2}{3}\mathbf{a}_1 - \frac{1}{3}\mathbf{a}_2\right)} = 1 + e^{i\frac{2\pi}{3}(g_2 - 2g_1)}. \quad (17)$$

Тогда

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{g_1, g_2} V_{1g_1, g_2} e^{i(g_1\mathbf{b}_1 + g_2\mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{r}} \left(1 + e^{i\frac{2\pi}{3}(g_2 - 2g_1)} \right) \quad (18)$$

Вычислив соответствующие производные и перейдя к безразмерной форме записи, имеем:

$$\begin{aligned}
 -\frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{\xi}} &= \tilde{U}'_{10} \sin\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{x} + \frac{\pi}{3}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) + \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{x} - \frac{\pi}{3}\right) - \\
 &- \tilde{U}'_{20} \cos\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{x} + \frac{2\pi}{3}\right) + \tilde{U}'_{12} \left(6 \sin\left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{x}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) + \right. \\
 &\left. + \cos\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{x} - \frac{\pi}{6}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right)\right) - \tilde{U}'_{22} \sin\left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{x} - \frac{2\pi}{3}\right).
 \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned}
 -\frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{y}} &= \tilde{U}'_{10} \sqrt{3} \cos\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{x} + \frac{\pi}{3}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) + \tilde{U}'_{11} 2\sqrt{3} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) - \\
 &- \sqrt{3} \tilde{U}'_{20} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) \cos\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{x} + \frac{2\pi}{3}\right) + \tilde{U}'_{12} \left(2\sqrt{3} \cos\left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{x}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) - \right. \\
 &\left. - 3\sqrt{3} \sin\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{x} - \frac{\pi}{6}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right)\right) + 2\sqrt{3} \tilde{U}'_{22} \sin\left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right),
 \end{aligned} \quad (22)$$

где введены обозначения:

$$\tilde{U}'_{10} = \frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{V}_{1,(10)}, \quad \tilde{U}'_{11} = \frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{V}_{1,(11)}, \quad \tilde{U}'_{20} = \frac{16\pi}{3\tilde{a}} \tilde{V}_{1,(20)}, \quad \tilde{U}'_{12} = \frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{V}_{1,(12)}, \quad \tilde{U}'_{22} = \frac{16\pi}{3\tilde{a}} \tilde{V}_{1,(22)} \quad (23)$$

В качестве приближения рассмотрим силы при $\tilde{t} = 0$, когда $\tilde{\xi} = \tilde{x}$. Тогда, поставляя (21) и (22) в (9), получим выражения для сил, действующих на единицу массы положительных частиц, в виде:

$$\begin{aligned}
 \tilde{F}_{p\xi} &= -\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{10} \sin\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) + \tilde{U}'_{11} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3}\right) - \\
 &- \tilde{U}'_{20} \cos\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3}\right) + \tilde{U}'_{12} \left(6 \sin\left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) + \right. \\
 &\left. + \cos\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6}\right) \cos\left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right)\right) - \tilde{U}'_{22} \sin\left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3}\right) + \tilde{E}_{\xi},
 \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{F}_{py} &= -\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{y}} + \tilde{U}'_{10} \sqrt{3} \cos\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) + \tilde{U}'_{11} 2\sqrt{3} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) - \\
 &- \sqrt{3} \tilde{U}'_{20} \sin\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) \cos\left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3}\right) + \tilde{U}'_{12} \left(2\sqrt{3} \cos\left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) - \right. \\
 &\left. - 3\sqrt{3} \sin\left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right)\right) + 2\sqrt{3} \tilde{U}'_{22} \sin\left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \sqrt{3}\tilde{y}\right) + \tilde{E}_y.
 \end{aligned} \quad (25)$$

Аналогично можно выписать

$$\tilde{F}_{e\xi} = -\tilde{F}_{p\xi}, \quad \tilde{F}_{ey} = -\tilde{F}_{py} \quad (26)$$

Полученные силы (24)–(26) входят в систему гидродинамических уравнений (3)–(8).

Пусть напряженность внешнего поля $\mathbf{E}$ равна нулю. Усредним полученную систему уравнений по $\tilde{y}$, например, по одной шестиугольной ячейке кристаллической решетки. Для этого рассчитаем

$$\frac{1}{\sqrt{3}\tilde{a}} \int_{-\frac{\sqrt{3}}{2}\tilde{a}}^{\frac{\sqrt{3}}{2}\tilde{a}} d\tilde{y} \quad (\text{см. рис. 1}) \quad \text{от правой и левой частей}$$

гидродинамических уравнений. При этом учтем,

$$\text{что } \frac{1}{\sqrt{3}\tilde{a}} \int_{-\frac{\sqrt{3}}{2}\tilde{a}}^{\frac{\sqrt{3}}{2}\tilde{a}} \frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{y}} d\tilde{y} = 0 \quad \text{для любой функции } \Psi,$$

характеризующей состояние системы, что следует из симметрии задачи. Кроме того, при усреднении будем считать, что физические величины, характеризующие состояние системы, не зависят от $\tilde{y}$.

В результате усреднения получим следующую систему уравнений:

Уравнение Пуассона для самосогласованного потенциала электрического поля φ

$$\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}^2} = -4\pi R \left\{ \frac{m_e}{m_p} \left[\tilde{\rho}_p - \frac{m_e H}{m_p \tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_p (\tilde{u} - 1)) \right] - \left[\tilde{\rho}_e - \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} (\tilde{\rho}_e (\tilde{u} - 1)) \right] \right\}. \quad (27)$$

Уравнение неразрывности для положительных частиц

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_p (1 - \tilde{u})] + \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_p (\tilde{u} - 1)^2] \right\} + \frac{m_e}{m_p} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \tilde{p}_p - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{m_e}{m_p} \tilde{\rho}_p E \left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) - \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \right) \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (28)$$

Уравнение неразрывности для электронов

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_e (1 - \tilde{u})] + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} [\tilde{\rho}_e (\tilde{u} - 1)^2] \right\} + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{V_{0e}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \tilde{p}_e - \right. \right. \\ & \left. \left. - \tilde{\rho}_e E \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}} - \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) + \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \right) \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (29)$$

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{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \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{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \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. \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{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \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. \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{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \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{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \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{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \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{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \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{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \right) \tilde{\rho}_e \tilde{u} \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (30)$$

Уравнение энергии для положительных частиц

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial \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 \xi} + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) - \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \right) \tilde{u} + \\
& + \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{m_e}{m_p} \left[\frac{\partial}{\partial \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(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} + \right. \\
& + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) - \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \left. \right) \left. \right\} + 2 \frac{H}{\tilde{u}^2} E \left(\frac{m_e}{m_p} \right)^2 \left[-\frac{\partial}{\partial \xi} (\tilde{\rho}_p \tilde{u} (1 - \tilde{u})) + \right. \\
& + \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \tilde{p}_p \left. \right] \left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) - \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \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 \xi} + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) - \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \right)^2 + \right. \\
& + \frac{1}{2} \left(\tilde{U}'_{10} \sin \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) + 6 \tilde{U}'_{12} \sin \left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi} \right) \right)^2 + \frac{1}{2} (\tilde{U}'_{12})^2 \cos^2 \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6} \right) + \\
& + \frac{1}{2} (\tilde{U}'_{02})^2 \sin^2 \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) - \frac{4}{3\pi} \tilde{U}'_{02} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) \left(\tilde{U}'_{10} \sin \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) + 6 \tilde{U}'_{12} \sin \left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi} \right) \right) - \\
& - \frac{12}{5\pi} \tilde{U}'_{02} \tilde{U}'_{12} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6} \right) + \frac{3}{2} \left(\tilde{U}'_{10} \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) + 2 \tilde{U}'_{12} \cos \left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi} \right) \right)^2 + \\
& + \frac{3}{2} \left(2 \tilde{U}'_{11} - \tilde{U}'_{02} \cos \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) \right)^2 + \frac{27}{2} (\tilde{U}'_{12})^2 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6} \right) + 6 (\tilde{U}'_{22})^2 + \\
& + \frac{8}{\pi} \left(\tilde{U}'_{10} \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) + 2 \tilde{U}'_{12} \cos \left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi} \right) \right) \left(2 \tilde{U}'_{11} - \tilde{U}'_{02} \cos \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) \right) - \\
& - \frac{96}{15\pi} \left(\tilde{U}'_{10} \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) + 2 \tilde{U}'_{12} \cos \left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi} \right) \right) \tilde{U}'_{22} - \\
& - \frac{72}{5\pi} \tilde{U}'_{12} \left(2 \tilde{U}'_{11} - \tilde{U}'_{02} \cos \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) \right) \sin \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6} \right) - \frac{288}{7\pi} \tilde{U}'_{12} \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6} \right) \left. \right] = \\
& = -\frac{\tilde{u}^2}{Hu_0^2} \left(V_{0p}^2 \tilde{p}_p - \tilde{p}_e V_{0e}^2 \right) \left(1 + \frac{m_p}{m_e} \right).
\end{aligned} \tag{31}$$

Уравнение энергии для электронов

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial \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 \xi} - \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) + \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ \frac{H}{\tilde{u}^2} \left[\frac{\partial}{\partial \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(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} - \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) + \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \right) \right\} + \\
& + E \left(-2 \frac{H}{\tilde{u}^2} \frac{\partial}{\partial \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 \xi} \tilde{p}_e \right) \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} - \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) + \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \right) - \\
& - 2E^2 \frac{H}{\tilde{u}^2} \tilde{\rho}_e \left[\left(-\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} + \tilde{U}'_{11} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{3} \right) - \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{8\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{2\pi}{3} \right) \right)^2 + \right. \\
& + \frac{1}{2} \left(\tilde{U}'_{10} \sin \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) + 6 \tilde{U}'_{12} \sin \left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi} \right) \right)^2 + \frac{1}{2} (\tilde{U}'_{12})^2 \cos^2 \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6} \right) + \\
& + \frac{1}{2} (\tilde{U}'_{02})^2 \sin^2 \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) - \frac{4}{3\pi} \tilde{U}'_{02} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) \left(\tilde{U}'_{10} \sin \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) + 6 \tilde{U}'_{12} \sin \left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi} \right) \right) - \\
& - \frac{12}{5\pi} \tilde{U}'_{02} \tilde{U}'_{12} \sin \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6} \right) + \frac{3}{2} \left(\tilde{U}'_{10} \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) + 2 \tilde{U}'_{12} \cos \left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi} \right) \right)^2 + \\
& + \frac{3}{2} \left(2 \tilde{U}'_{11} - \tilde{U}'_{02} \cos \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) \right)^2 + \frac{27}{2} (\tilde{U}'_{12})^2 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6} \right) + 6 (\tilde{U}'_{22})^2 + \\
& + \frac{8}{\pi} \left(\tilde{U}'_{10} \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) + 2 \tilde{U}'_{12} \cos \left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi} \right) \right) \left(2 \tilde{U}'_{11} - \tilde{U}'_{02} \cos \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) \right) - \\
& - \frac{96}{15\pi} \left(\tilde{U}'_{10} \cos \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{\pi}{3} \right) + 2 \tilde{U}'_{12} \cos \left(\frac{2\pi}{\tilde{a}} \tilde{\xi} \right) \right) \tilde{U}'_{22} - \\
& - \frac{72}{5\pi} \tilde{U}'_{12} \left(2 \tilde{U}'_{11} - \tilde{U}'_{02} \cos \left(\frac{4\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} + \frac{2\pi}{3} \right) \right) \sin \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6} \right) - \frac{288}{7\pi} \tilde{U}'_{12} \tilde{U}'_{22} \sin \left(\frac{2\pi}{3\tilde{a}} \tilde{\xi} - \frac{\pi}{6} \right) \Big] = \\
& = - \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{32}$$

2. Оценка численных значений параметров

Для решения системы квантовых гидродинамических уравнений (27) – (32) необходимо оценить численные значения введенных безразмерных параметров. В свою очередь, безразмерные параметры зависят от выбора независимых масштабов при обезразмеривании физических величин. Выберем независимые масштабы, соответствующие данной физической задаче.

Пусть поверхностная плотность электронов в графене составляет $\tilde{n}_e \approx 10^{10} \text{ см}^{-2}$ [11], толщина графеновой пленки порядка 1 нм. Тогда концентрация электронов $n_e \approx 10^{17} \text{ см}^{-3}$,

плотность электронов $\rho_e = m_e n_e \approx 10^{-10} \text{ г/см}^3$.

Выберем масштаб плотности $\rho_0 = 10^{-10} \text{ г/см}^3$.

При таком масштабе плотности при типичных для графена параметрах имеем $\tilde{\rho}_e \sim 1$ (такие оценки необходимы нам для постановки условий Коши).

Пусть при поляризации атомов углерода образуются условные положительные частицы, причем концентрация $n_p \approx n_e$. Будем считать, что условная масса этих частиц порядка массы атома углерода, то есть $m_p \approx 2 \cdot 10^{-23} \text{ г}$. Таким

образом, $\frac{L}{T} = \frac{m_e}{m_p} \approx 5 \cdot 10^{-5}$.

Тогда $\rho_p = m_p n_p \approx 2 \cdot 10^{-6} \text{ з/см}^3$, и при выбранном ρ_0 имеем $\tilde{\rho}_p \sim 2 \cdot 10^4$.

Выберем масштабы тепловых скоростей для электронов и положительных частиц.

При $T=300^\circ\text{K}$

$$V_{0e} \sim \sqrt{\frac{k_B T}{m_e}} \approx 6.4 \cdot 10^6 \text{ см/с}, \text{ выберем } V_{0e} = 5 \cdot 10^6 \text{ см/с}.$$

$$V_{0p} \sim \sqrt{\frac{k_B T}{m_p}} \approx 4.5 \cdot 10^4 \text{ см/с}, \text{ выберем } V_{0p} = 5 \cdot 10^4 \text{ см/с}.$$

Теоретическая подвижность в графене достигает

$$10^6 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}. \text{ Выберем } u_0 = 5 \cdot 10^6 \text{ см/с}. \text{ Тогда}$$

$$N = \frac{V_{0e}^2}{u_0^2} = 1, \quad P = \frac{V_{0p}^2}{u_0^2} = 10^{-4}.$$

Оценим значения E и R . Для этого надо оценить потенциал φ_0 . Примем $\varphi_0 \approx \delta \frac{e}{a}$, где δ – некий «коэффициент экранирования». Принимаем $x_0 = a = 0.142 \text{ нм}$ – расстояние между ближайшими атомами в графене, тогда $\tilde{a} = 1$. Поскольку потенциал точно не известен, рассмотрим два предельных случая:

1) $\delta \sim 1$.

$$\text{Тогда } E = \frac{e\varphi_0}{m_e u_0^2} \sim 1000, \quad R = \frac{e\rho_0 x_0^2}{m_e \varphi_0} \sim 3 \cdot 10^{-7}.$$

2) $\delta = 0.0001$.

$$\text{Тогда } E = \frac{e\varphi_0}{m_e u_0^2} \sim 0.1, \quad R = \frac{e\rho_0 x_0^2}{m_e \varphi_0} \sim 3 \cdot 10^{-3}.$$

Рассмотрим теперь члены, описывающие влияние решетки. Для этого надо оценить соответствующие коэффициенты (23). При этом для обезразмеривания V используем ту же постоянную φ_0 , что и для обезразмеривания самосогласованного потенциала φ , то есть $V = \varphi_0 \tilde{V}$. Рассмотрим три возможных случая:

1) $V \sim \varphi_0$

$$\text{Выберем } U = \tilde{U}'_{10} \sim 10, \quad F = \tilde{U}'_{11} \sim 10, \quad J = \tilde{U}'_{20} \sim \pm 5, \quad B = \tilde{U}'_{12} \sim \pm 2.5, \quad G = \tilde{U}'_{22} \sim \pm 5.$$

Здесь коэффициенты «второго порядка» предполагаются меньшими, чем коэффициенты «первого порядка».

2) $V \ll \varphi_0$ (влияние решетки мало),

$$\text{Выберем } U = \tilde{U}'_{10} \sim 0.1, \quad F = \tilde{U}'_{11} \sim 0.1, \\ J = \tilde{U}'_{20} \sim 0.05, \quad B = \tilde{U}'_{12} \sim 0.025, \quad G = \tilde{U}'_{22} \sim 0.05.$$

3) $V \gg \varphi_0$ (влияние решетки велико),

$$\text{Выберем } U = \tilde{U}'_{10} \sim 1000, \quad F = \tilde{U}'_{11} \sim 1000, \\ J = \tilde{U}'_{20} \sim 500, \quad B = \tilde{U}'_{12} \sim 250, \quad G = \tilde{U}'_{22} \sim 500.$$

Варьирование параметров U, F, J, B, G в широких пределах связано с отсутствием в настоящее время достоверных методов расчета потенциала в кристаллической решетке графена.

$$\text{Оценим значение } H = \frac{N_R \hbar}{m_e x_0 u_0}. \text{ Рассмотрим}$$

два предельных случая:

1) $N_R = 1$, тогда $H \sim 15$.

2) $N_R = 100$, тогда $H \sim 1500$.

Для постановки начальных условий необходимо также оценить электронное давление и давление положительных частиц.

Электронное давление $p_e = \rho_0 V_{0e}^2 \tilde{p}_e$. Принимая $p_e = n_e k_B T \sim n_e m_e V_{0e}^2 = \rho_e V_{0e}^2 \sim \rho_0 V_{0e}^2$, имеем $\tilde{p}_e \sim 1$. Давление условных положительных частиц $p_p = \rho_0 V_{0p}^2 \tilde{p}_p$. Принимая $p_p = n_p k_B T \sim n_p m_p V_{0p}^2 = \rho_p V_{0p}^2$, имеем $p_p \sim 2 \cdot 10^4 \rho_0 V_{0p}^2$, $\tilde{p}_p \sim 2 \cdot 10^4$.

В табл. 1, 2 представлены значения начальных условий и параметров, остававшиеся неизменными при численном моделировании.

Таблица 1. Начальные условия

$\tilde{\rho}_e(0)$	$\tilde{\rho}_p(0)$	$\tilde{\varphi}(0)$	$\tilde{p}_e(0)$	$\tilde{p}_p(0)$	$\frac{\partial \tilde{\rho}_e}{\partial \tilde{\xi}}(0)$	$\frac{\partial \tilde{\rho}_p}{\partial \tilde{\xi}}(0)$	$\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{\xi}}(0)$	$\frac{\partial \tilde{p}_e}{\partial \tilde{\xi}}(0)$	$\frac{\partial \tilde{p}_p}{\partial \tilde{\xi}}(0)$
1	$2 \cdot 10^4$	1	1	$2 \cdot 10^4$	0	0	0	0	0

Таблица 2. Постоянные параметры

$\tilde{a}$	L	T	N	P
1	1	$2 \cdot 10^4$	1	10^{-4}

В табл. 3 приведены значения параметров, которые варьировались при численном моделировании, для 6 различных случаев.

Таблица 3. Варьируемые параметры

№ варианта	E	R	H	U	F	J	B	G
1	0.1	0.003	15	10	10	5	2.5	5
2	0.1	0.003	15	0.1	0.1	0.05	0.025	0.05
3	0.1	0.003	15	10	10	-5	-2.5	-5
4	1000	$3 \cdot 10^{-7}$	15	10	10	5	2.5	5
5	0.1	0.003	1500	10	10	5	2.5	5
6	0.1	0.003	15	1000	1000	500	250	500

3. Результаты математического моделирования

Вычисления проводились на основе системы уравнений (27) – (32) при значениях начальных условий и параметров, приведенных в табл. 1–3. Расчеты проводились с помощью пакета Maple 9 и старших версий. Последующие рисунки отражают результаты проведенных вычислений. На рисунках используются обозначения: ρ – плотность $\tilde{\rho}_p$, s – плотность $\tilde{\rho}_e$, u – скорость $\tilde{u}$, p – давление $\tilde{p}_p$, q – давление $\tilde{p}_e$ и v – самосогласованный потенциал $\tilde{\phi}$. Независимая переменная t на оси абсцисс соответствует переменной $\tilde{\xi}$.

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 $\tilde{u} = 1$.

В результате математического моделирования было установлено, что действительно существуют ограниченные области одномерного пространства, в которых с высокой точностью сохраняется постоянная гидродинамическая скорость. Именно в этих областях полученные решения имеют физический смысл. Поскольку никакие специальные граничные условия не используются в рассматриваемых расчетах, то по полученным результатам можно судить о размерах возникающего солитона.

На рис. 2–9 показаны некоторые результаты расчетов с параметрами, соответствующими варианту 1 (табл.3), в первом и втором приближении. В первом приближении учитывались только члены ряда (18) с $|g_1| \leq 1$, $|g_2| \leq 1$ (то есть коэффициенты U и F). Во втором приближении учтены все члены ряда с $|g_1| \leq 2$, $|g_2| \leq 2$ (то есть коэффициенты U, F, J, B и G).

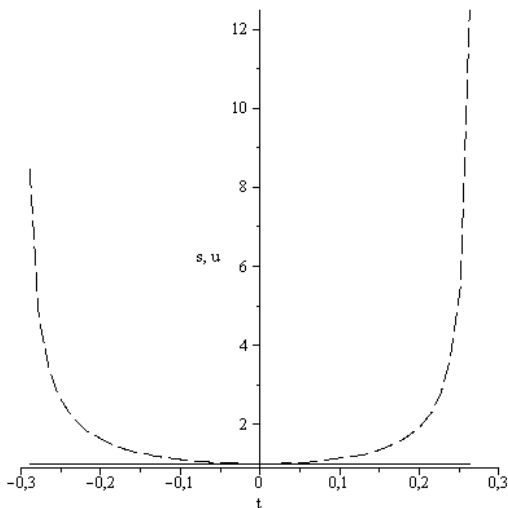


Рис. 2. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$, u – скорость $\tilde{u}$ (сплошная линия) (первое приближение, вариант 1).

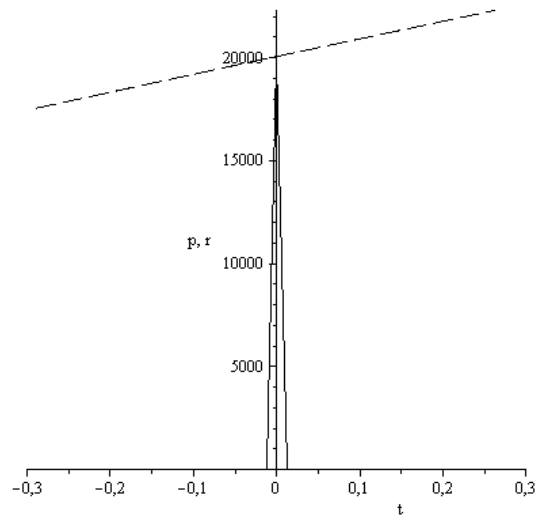


Рис. 3. ρ – плотность положительных частиц, (сплошная линия); p – давление положительных частиц (первое приближение, вариант 1).

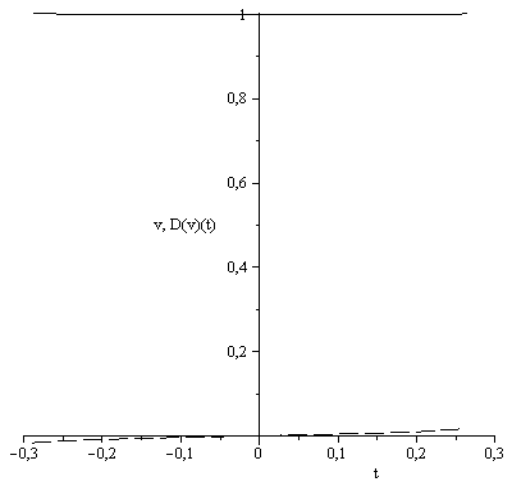


Рис. 4. v – потенциал $\tilde{\phi}$ (сплошная линия),
 $D(v)(t)$ – производная от потенциала $\tilde{\phi}'$
 (первое приближение, вариант 1).

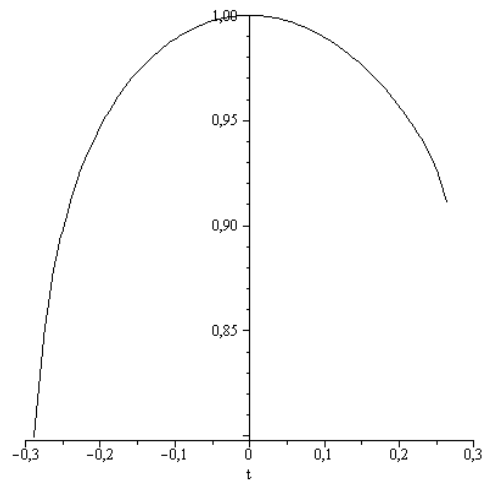


Рис. 5. q – давление отрицательных частиц
 (первое приближение, вариант 1).

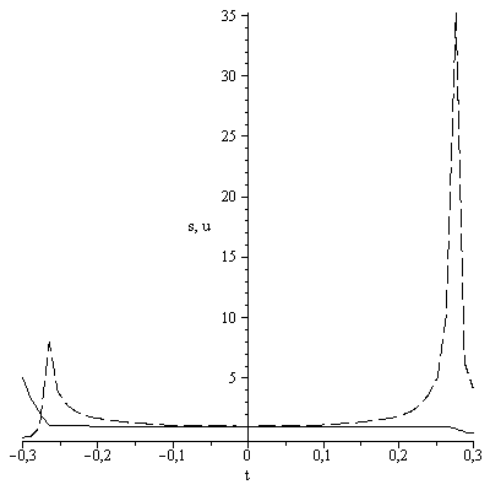


Рис. 6. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$,
 u – скорость $\tilde{u}$ (сплошная линия)
 (второе приближение, вариант 1).

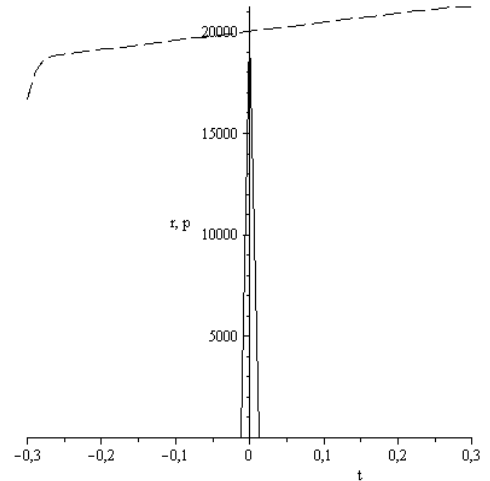


Рис. 7. g – плотность положительных частиц,
 (сплошная линия),
 p – давление положительных частиц
 (второе приближение, вариант 1).

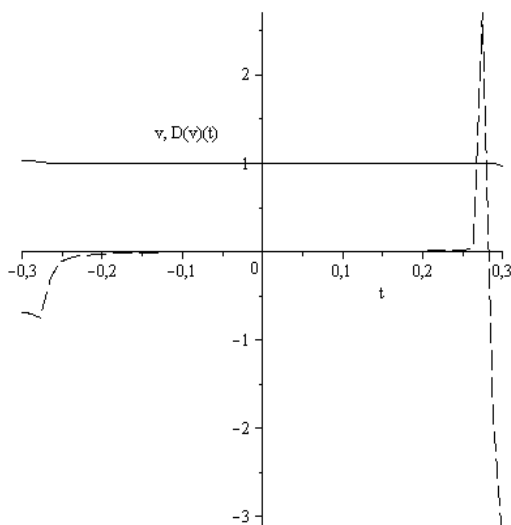


Рис. 8. v – потенциал $\tilde{\phi}$ (сплошная линия),
 $D(v)(t)$ – производная от потенциала $\tilde{\phi}'$
 (второе приближение, вариант 1).

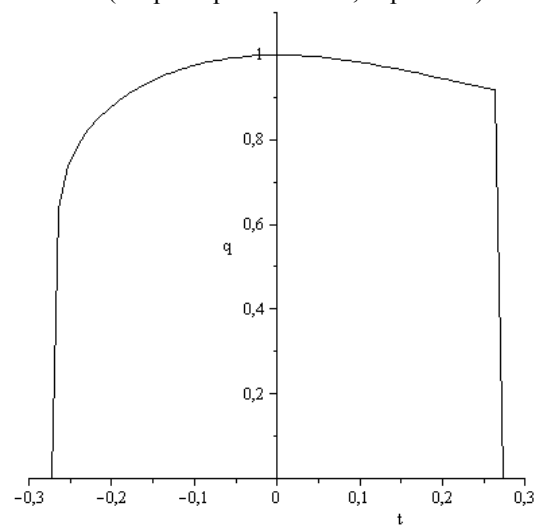


Рис. 9. q – давление отрицательных частиц
 (второе приближение, вариант 1).

Из рис. 2–9 видно, что размеры образовавшегося солитона составляют порядка $0.5a$, где $a=0.142$ нм. При этом из рис. 3 и 7 следует, что размер области, занимаемой поляризационным положительным зарядом, составляет порядка $0.025a$. В то же время отрицательный заряд распределен по всему солитону (рис. 2, 6), однако ближе к краям его плотность резко увеличивается. Таким образом, образовавшийся солитон напоминает одномерный атом с положительным ядром и отрицательной оболочкой.

Отметим, что самосогласованный потенциал $\tilde{\varphi}$ остается практически постоянным в пределах солитона (рис. 4, 8). Наблюдается небольшой рост давления положительных частиц в направлении оси x , что может быть связано с тем, что гидродинамическая скорость также направлена по x и перестройка поляризационных частиц происходит быстрее перед «фронтом» солитона.

Сравнивая рис. 2–5, 6–9, видим, что результаты расчетов в первом и втором приближении отличаются мало. Кажущееся различие рис. 2 и рис. 6, заключающееся в спаде

электронной плотности по краям солитона на рис. 6, не имеет физического смысла, так как наблюдается за пределами области $u = \text{const}$, в которой искали и получили решение солитонного типа. Таким образом, можно считать оправданным ограничение двумя приближениями, считая, что использование трех и более приближений не приведет к принципиальным изменениям решения. Вместе с тем нельзя говорить о том, что второе приближение однозначно лучше первого, поскольку и первое, и второе приближение включают лишь ограниченное число членов бесконечного ряда, численные значения коэффициентов в котором точно неизвестно.

На рис. 10–15 приведены расчеты, соответствующие варианту 3 (табл. 3). В первом приближении вариант 3 идентичен варианту 1 (коэффициенты $J = B = G = 0$), поэтому приведены расчеты только во втором приближении. Эти расчеты оказались существенно сложнее с вычислительной точки зрения, поэтому каждая расчетная кривая изображена на отдельном рисунке.

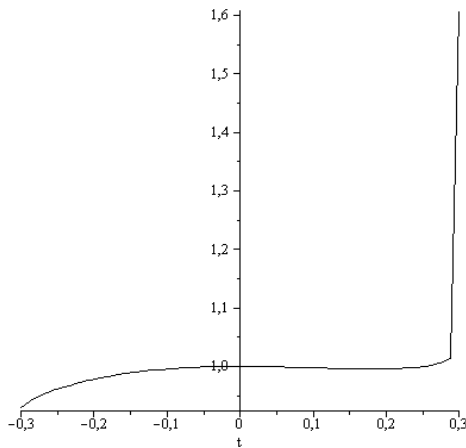


Рис. 10. u – скорость $\tilde{u}$
(второе приближение, вариант 3).

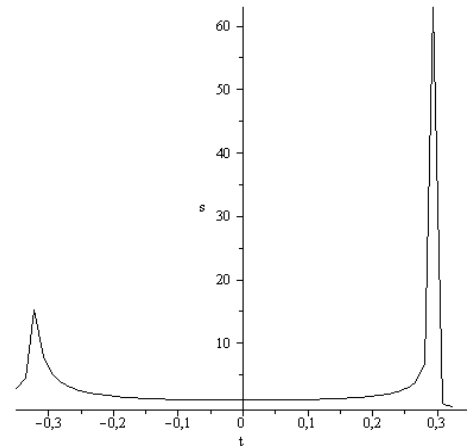


Рис. 11. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$
(второе приближение, вариант 3).

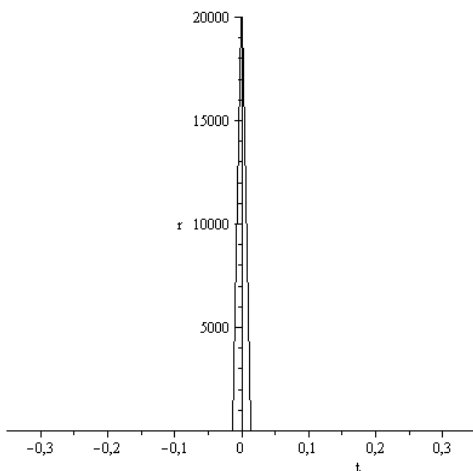


Рис. 12. r – плотность положительных частиц
(второе приближение, вариант 3).

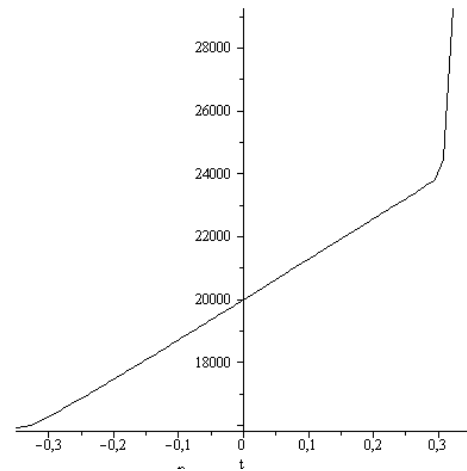


Рис. 13. p – давление положительных частиц
(второе приближение, вариант 3).

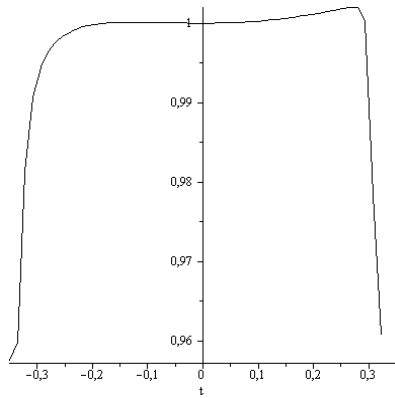


Рис. 14. v – потенциал $\tilde{\varphi}$
(второе приближение, вариант 3).

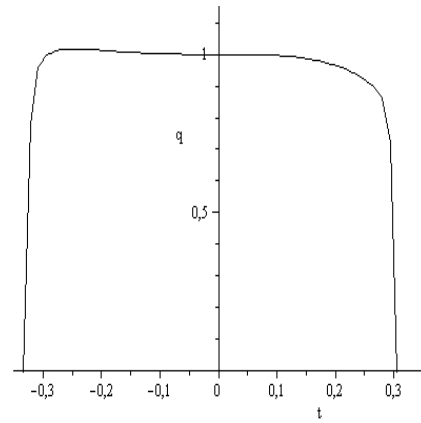


Рис. 15. q – давление отрицательных частиц
(второе приближение, вариант 3).

В то время как распределение плотности электронов и положительных частиц, а также распределение давлений мало отличается от того, что наблюдалось при расчетах по варианту 1, график зависимости гидродинамической скорости $\tilde{u}$ от $\tilde{\xi}$ (рис.10) показывает, что левый край солитона разрушается. При $\tilde{\xi} < 0$ скорость $\tilde{u}$ уже не является постоянной. Таким образом, выбранный в варианте 3 вид потенциала решетки

(были изменены знаки при коэффициентах второго порядка по сравнению с вариантом 1) является неблагоприятным для движения солитонов, а значит и для образования сверхпроводящих структур.

Вариант 2 (табл.3) соответствует численному уменьшению потенциала решетки (приблизительно в 100 раз) при неизменном по порядку величины самосогласованном потенциале. Расчеты по варианту 2 приведены на рис. 16–23.

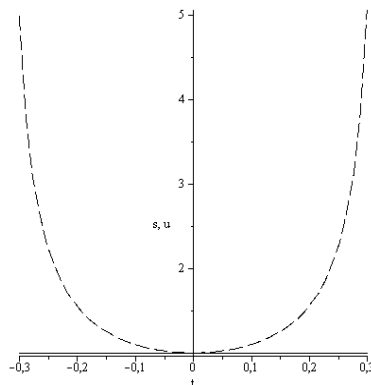


Рис. 16. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$,
 u – скорость $\tilde{u}$ (сплошная линия)
(первое приближение, вариант 2).

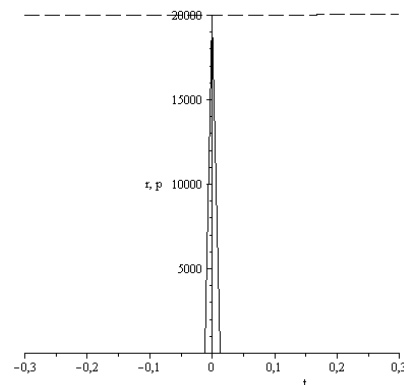


Рис. 17. r – плотность положительных частиц,
(сплошная линия); p – давление положительных
частиц (первое приближение, вариант 2).

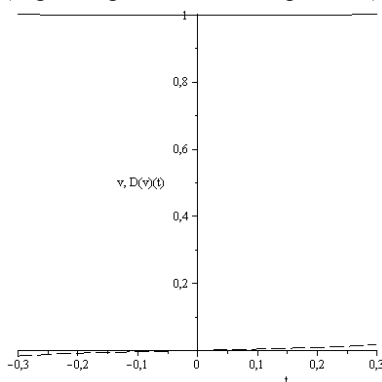


Рис. 18. v – потенциал $\tilde{\varphi}$ (сплошная линия)
 $D(v)(t)$ производная от потенциала $\tilde{\varphi}'$
(первое приближение, вариант 2).

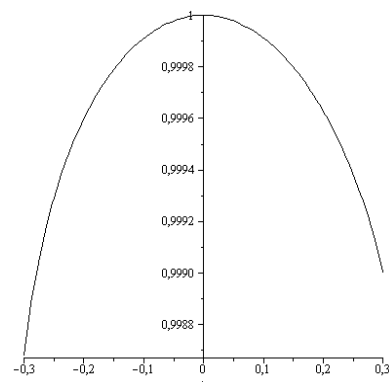


Рис. 19. q – давление отрицательных частиц
(первое приближение, вариант 2).

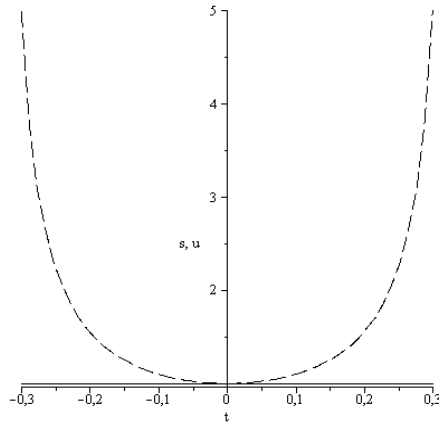


Рис. 20. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$, u – скорость $\tilde{u}$ (сплошная линия) (второе приближение, вариант 2).

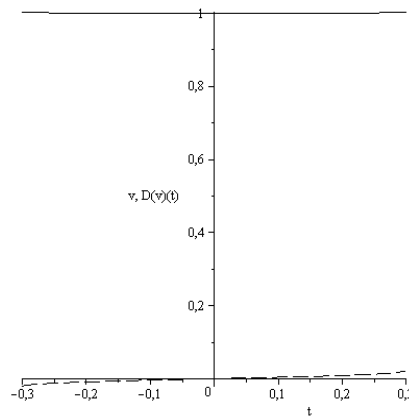


Рис. 22. v – потенциал $\tilde{\phi}$ (сплошная линия), $D(v)(t)$ производная от потенциала $\tilde{\phi}'$ (второе приближение, вариант 2).

При сравнении рисунков 2–9 и 16–23 видно, что численное уменьшение потенциала решетки при неизменном по порядку величины самосогласованном потенциале не влияет на размеры образующегося солитона, но вместе с тем солитоны становятся еще более симметричными. Таким образом, можно пред-

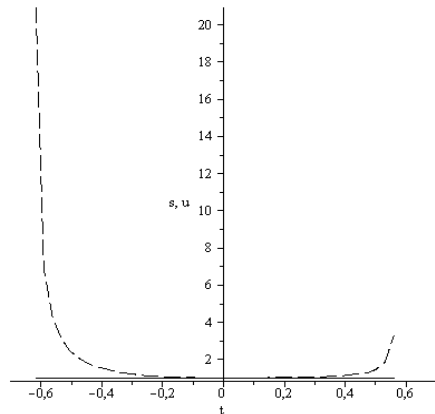


Рис. 24. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$, u – скорость $\tilde{u}$ (сплошная линия) (первое приближение, вариант 5).

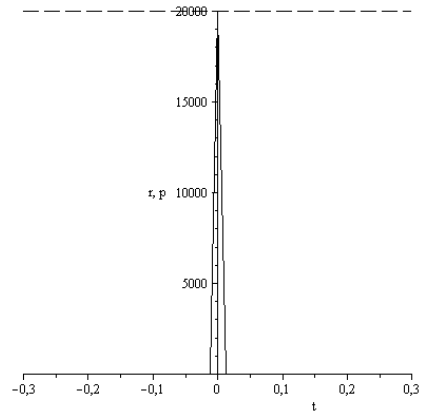


Рис. 21. g – плотность положительных частиц, (сплошная линия); p – давление положительных частиц (второе приближение, вариант 2).

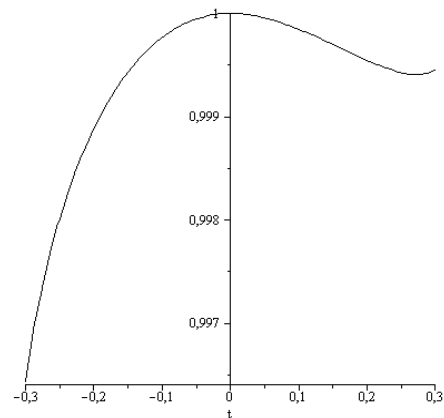


Рис. 23. q – давление отрицательных частиц (второе приближение, вариант 2).

положить, что основную роль в формировании солитона играет самосогласованный потенциал. Проанализируем теперь влияние параметра H , то есть фактически параметра нелокальности. Результаты расчетов по варианту 5, соответствующему увеличению H в 100 раз по сравнению с вариантом 1, приведены на рис. 24–31.

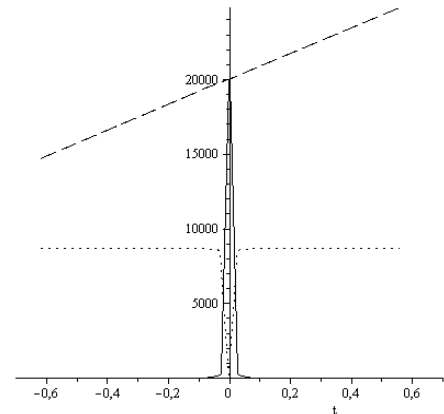


Рис. 25. g – плотность положительных частиц, (сплошная линия); p – давление положительных частиц (пунктирная линия), $D(p)(t)$ – точечная линия (первое приближение, вариант 5).

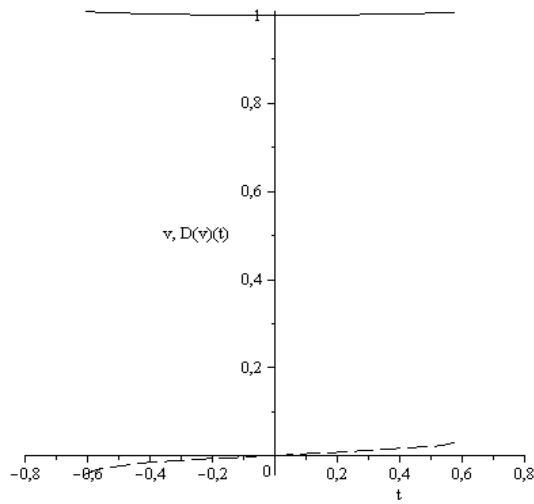


Рис. 26. v – потенциал $\tilde{\varphi}$ (сплошная линия)
 $D(v)(t)$ (первое приближение,
вариант 5).

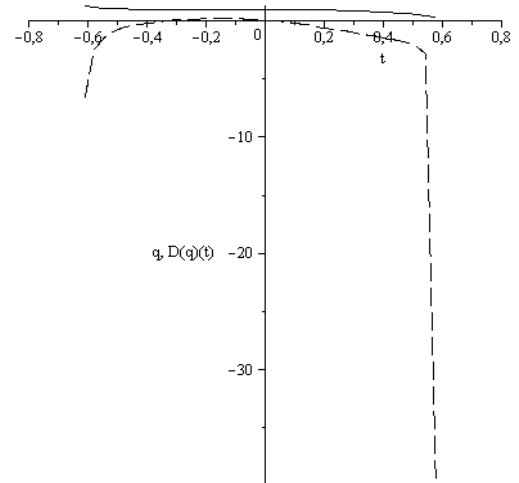


Рис. 27. q – давление отрицательных частиц
(сплошная линия), $D(q)(t)$ (первое
приближение, вариант 5).

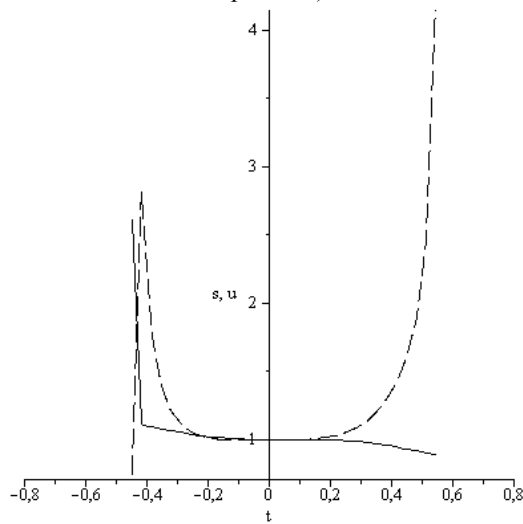


Рис. 28. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$,
 u – скорость $\tilde{u}$ (сплошная линия)
(второе приближение, вариант 5).

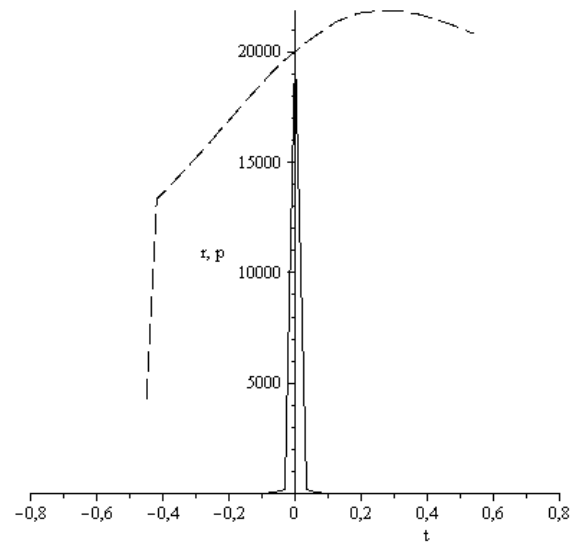


Рис. 29. r – плотность положительных частиц,
(сплошная линия); p – давление положительных
частиц (второе приближение, вариант 5).

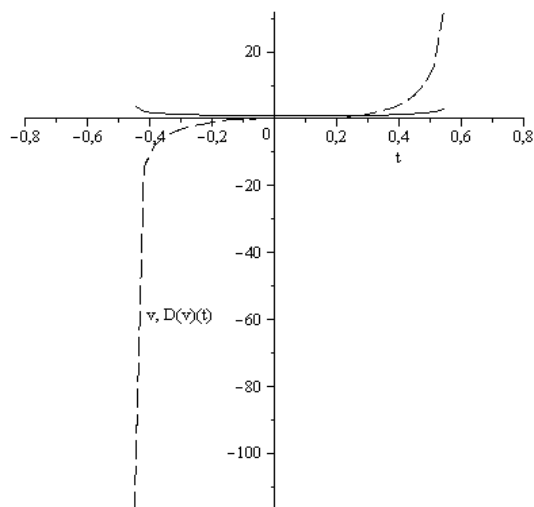


Рис. 30. v – потенциал $\tilde{\varphi}$ (сплошная линия),
 $D(v)(t)$ (второе приближение, вариант 5).

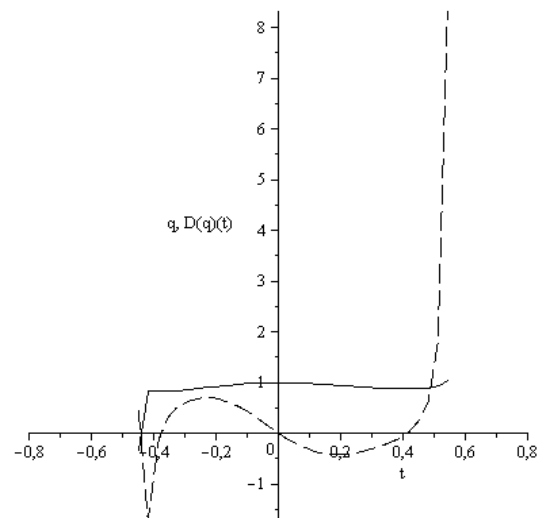


Рис. 31. q – давление отрицательных частиц
(сплошная линия), $D(q)(t)$ (второе приближение,
вариант 5).

Сравнение рисунков 2–5 и рисунков 24–27 показывает, что в первом приближении увеличение на два порядка параметра нелокальности увеличивает размеры солитона приблизительно в 2 раза. При этом структура солитона практически не меняется. Если же сравнить расчеты по варианту 1 и по варианту 5 во втором приближении, то видно, что область, в которой гидродинамическая скорость остается постоянной, приблизительно одинакова по размеру в обоих случаях (см. рис.6 и рис.28). Таким образом, усложнение вида потенциала решетки препятствует увеличению размеров солитона, несмотря на рост параметра нелокальности.

Рассмотрим теперь расчеты, соответствующие варианту 4 (табл. 3). Увеличение в 10^4 раз постоянной обезразмеривания φ_0 , озна-

чающее рост как самосогласованного потенциала, так и потенциала решетки, приводит к резкому уменьшению размера солитона. Из рис. 32–35 для расчетов в первом приближении видно, что в этом случае размер солитона составляет порядка $10^{-4}a = 1.42 \cdot 10^{-12}$ см, то есть лишь в несколько раз превышает размер ядра атома. Положительное «ядро» солитона уменьшается в меньшей степени и занимает теперь примерно половину размера солитона, что естественно, так как нижней границей для размера области сосредоточения положительного заряда является размер ядра атома. Применение второго приближения, то есть усложнение вида потенциальной функции решетки, сильно деформирует солитон, нарушая его симметрию, при этом размеры солитона остаются такими же малыми (см. рис. 36–39).

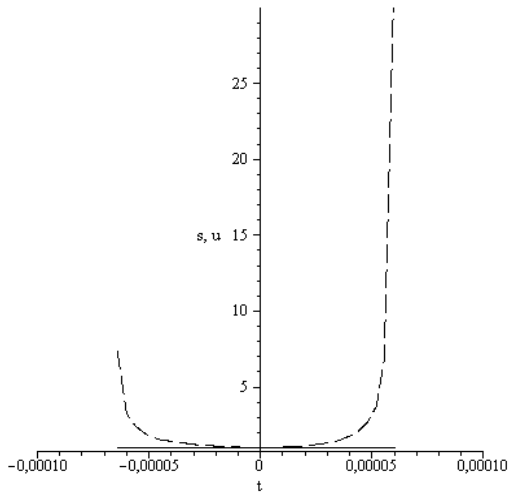


Рис. 32. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$, u – скорость $\tilde{u}$ (сплошная линия) (первое приближение, вариант 4).

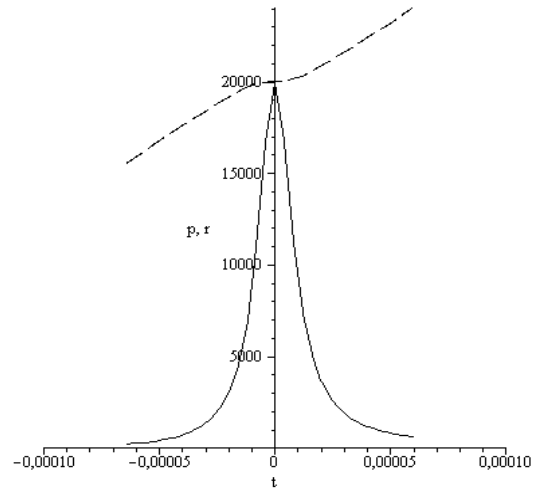


Рис. 33. r – плотность положительных частиц, p – давление положительных частиц (первое приближение, вариант 4).

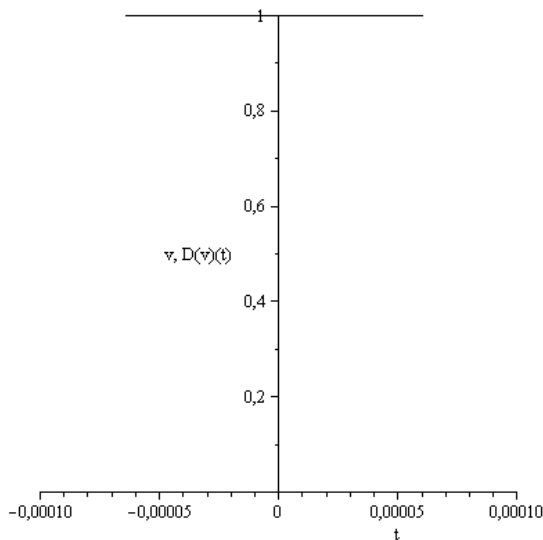


Рис. 34. v – потенциал $\tilde{\varphi}$ (сплошная линия) (первое приближение, вариант 4).

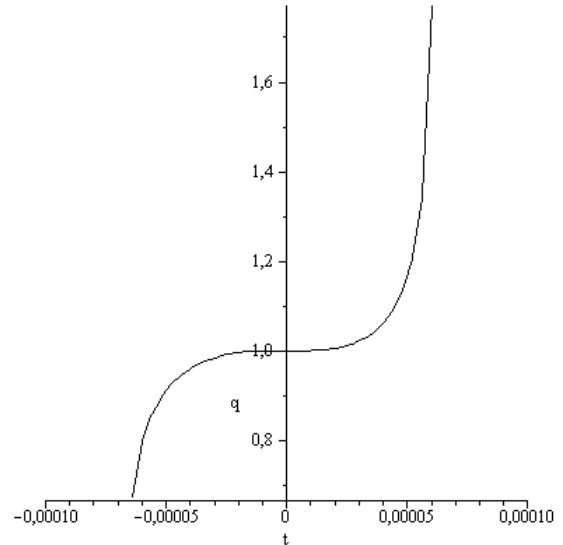


Рис. 35. q – давление отрицательных частиц (первое приближение, вариант 4).

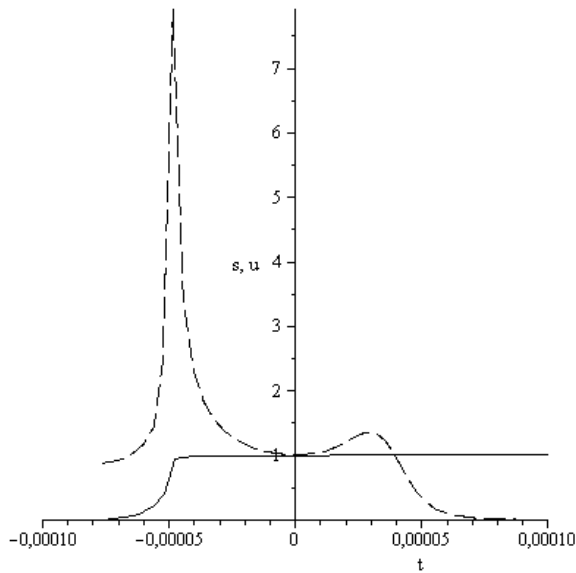


Рис. 36. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$,
 u – скорость $\tilde{u}$ (сплошная линия)
(второе приближение, вариант 4).

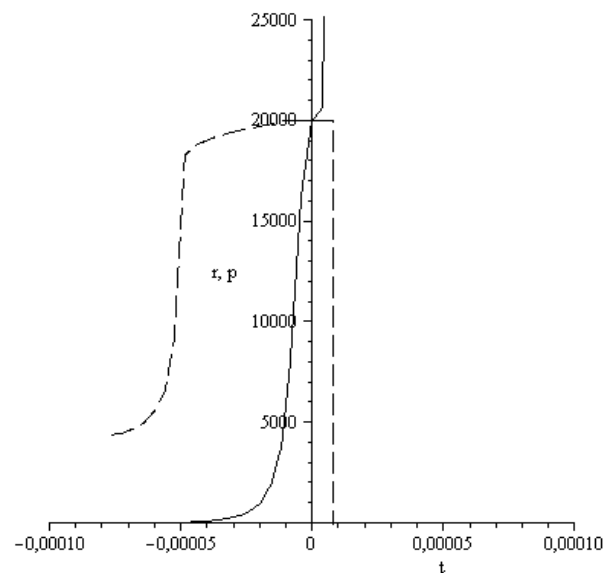


Рис. 37. r – плотность положительных частиц,
(сплошная линия); p – давление положительных
частиц (второе приближение, вариант 4).

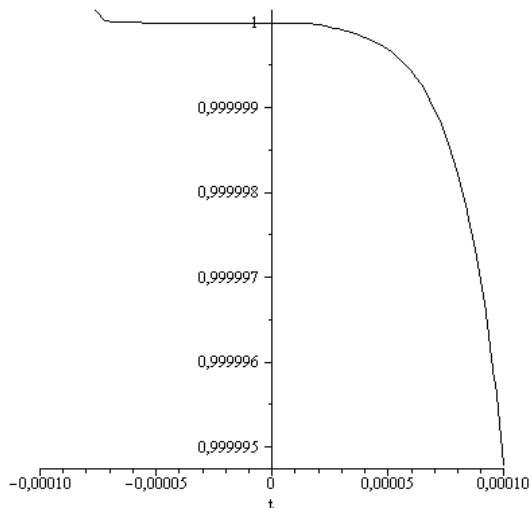


Рис. 38. v – потенциал $\tilde{\phi}$ (сплошная линия)
(второе приближение, вариант 4).

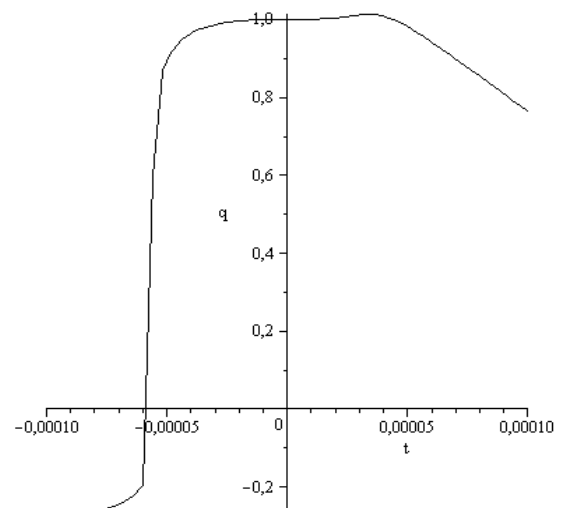


Рис. 39. q – давление отрицательных частиц.
(второе приближение, вариант 4).

К уменьшению размера солитонов приводит также резкое увеличение (в ~ 100 раз) периодического потенциала, связанного с влиянием кристаллической решетки, по сравнению с самосогласованным потенциалом. Из рис. 40–48 (соответствующих расчетам по варианту 6, табл. 3) видно, что размер солитона уменьшается до $10^{-2}a$. Однако при таком увеличении периодического потенциала еще не наблюдается относительного увеличения «ядра» солитонов. Не наблюдается также деформации солитонов во втором приближении (рис. 45–48). Из рис. 41 видно, насколько устойчивым образованием является солитон и с какой высокой точностью мы можем говорить о постоянстве его скорости. Флуктуации скорости составляют порядка $10^{-16}\tilde{u}$.

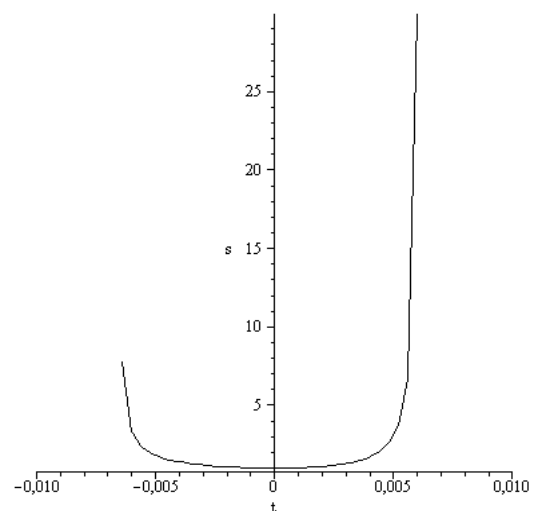


Рис. 40. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$ (первое
приближение, вариант 6).

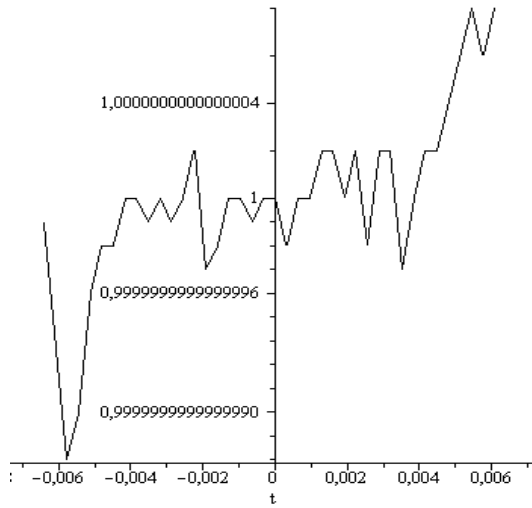


Рис. 41. u – скорость $\tilde{u}$
(первое приближение, вариант 6).

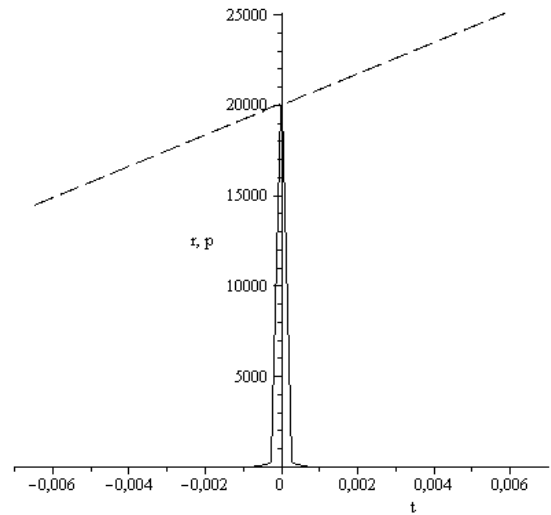


Рис. 42. g – плотность положительных частиц, (сплошная линия); p – давление положительных частиц (первое приближение, вариант 6).

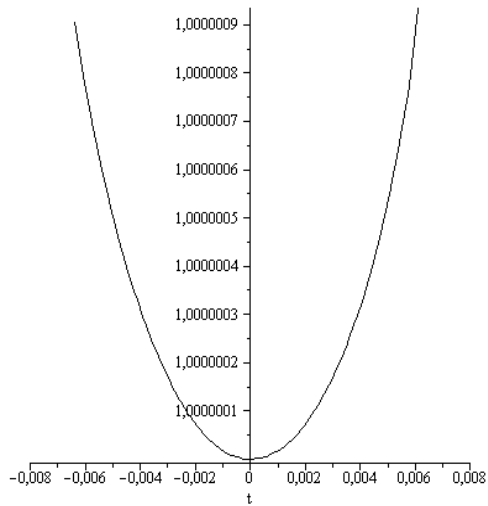


Рис. 43. v – потенциал $\tilde{\varphi}$
(первое приближение, вариант 6).

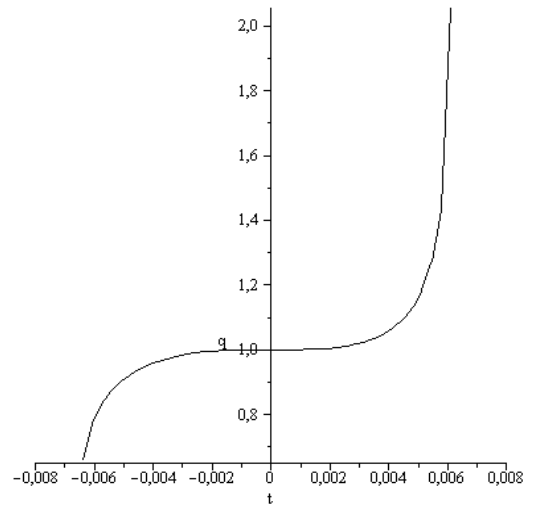


Рис. 44. q – давление отрицательных частиц
(первое приближение, вариант 6).

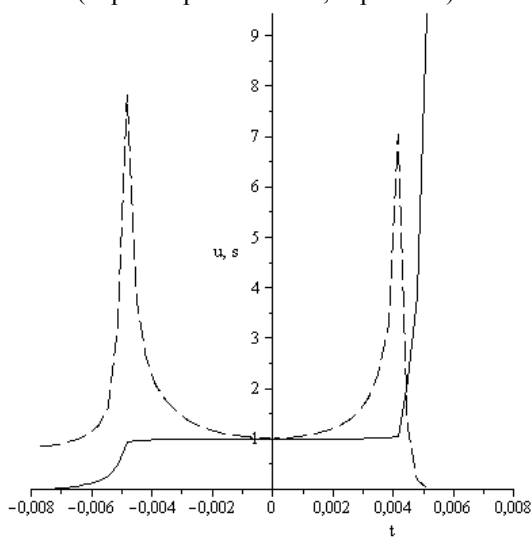


Рис. 45. s – электронная плотность $\tilde{\rho}_e$,
 u – скорость $\tilde{u}$ (сплошная линия)
(второе приближение, вариант 6).

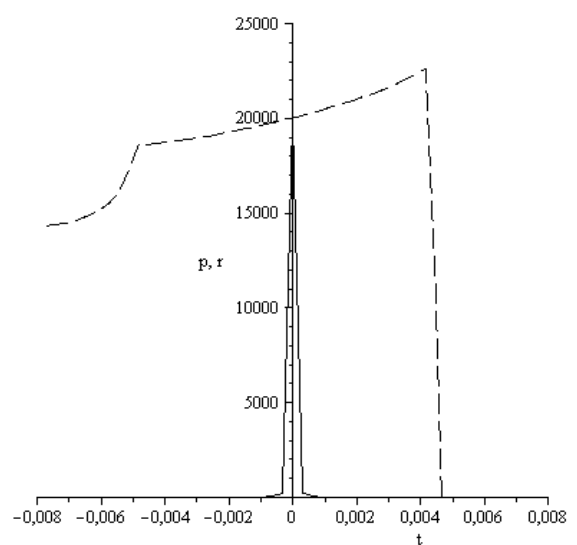


Рис. 46. g – плотность положительных частиц, (сплошная линия); p – давление положительных частиц (второе приближение, вариант 6).

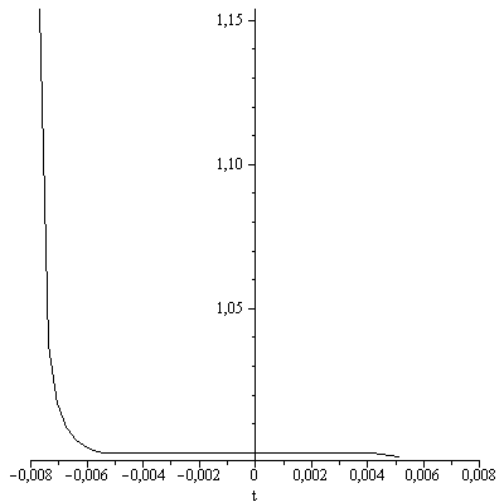


Рис. 47. v – потенциал $\tilde{\varphi}$
(второе приближение, вариант б).

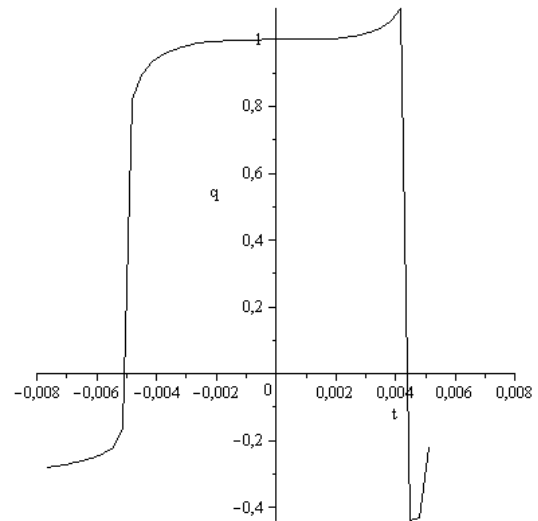


Рис. 48. q – давление отрицательных частиц
(второе приближение, вариант б).

Заключение

Таким образом, в результате математического моделирования установлено, что в графене может распространяться, не меняя своей структуры, совокупность отрицательного и связанного с ним положительного поляризационного заряда. При этом положительный заряд находится в центре данного солитона, а плотность отрицательного заряда увеличивается по мере приближения к краям солитона. Размер солитона сравним с межатомным расстоянием.

Как известно, существуют два теоретических сценария образования псевдощелевого состояния высокотемпературных сверхпроводников и последующего перехода вещества в состояние высокотемпературной сверхпроводимости. Первый из них основан на модели формирования куперовских пар. Второй предполагает образование антиферромагнитных флуктуаций и волн зарядовой плотности (CDW). Первый сценарий в теории высокотемпературной сверхпроводимости неудовлетворителен [6]. Изложенные выше результаты свидетельствуют в пользу второго возможного

сценария и являются его обоснованием методами нелокальной квантовой гидродинамики.

Можно предположить, что решающую роль в образовании солитона играет самосогласованное поле, причем его величина в пределах солитона практически не меняется. С ростом параметра нелокальности размеры солитона увеличиваются. Установлено, что использование в расчетах высоких численных значений потенциала приводит к разрушению солитона или, во всяком случае, к резкому уменьшению его размеров. Деформация и частичное разрушение солитонов наблюдается также при некотором виде потенциальных функций, описывающих периодический потенциал. Возможно, образование солитонов является причиной высокой подвижности зарядов в графене и других материалах.

Изложенное выше математическое моделирование на основе квантовой гидродинамики солитонов предлагает, по сути, схему поиска параметров реализации высокотемпературной сверхпроводимости и, как надеются авторы, к последующим интенсивным исследованиям в рамках развитой теории.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Алексеев Б.В. Нелокальная физика. Нерелятивистская теория. – Saarbrücken: Lambert, 2011. 499 p.
2. Алексеев Б.В., Овчинникова И.В. Нелокальная физика. Релятивистская теория. – Saarbrücken: Lambert, 2011. 406 p.
3. Alexeev B.V. Application of generalized quantum hydrodynamics in the theory of quantum soliton's evolution // J. Nanoelectronics & Optoelectronics. 2008. V. 3. № 3. P. 316–328.
4. Алексеев Б.В. Обобщенная квантовая гидродинамика // Вестник МИТХТ. 2008. Т. 3. № 3. С. 3–19.
5. Алексеев Б.В. К нелокальной теории высокотемпературной сверхпроводимости // Вестник МИТХТ. 2012. Т. 7. № 3. С. 3–21.
6. Садовский М.В. Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках // Успехи физич. наук. 2001. Т. 171. № 5. С. 539–564.

7. 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
8. Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R., Novoselov K.S., Geim A.K. The electronic properties of grafene // *Rev. Modern Physics*. 2009. V. 81. P. 109–162.
9. Морозов С.В., Новоселов К.С., Гейм А.К. Электронный транспорт в графене // *Успехи физич. наук*. 2008. Т. 178. № 7. С. 776–780.
10. Pathak S., Shenoy V.B., Baskaran G. Possibility of high T_c superconductivity in doped grapheme / 2008. arXiv:0809.0244v1[cond-mat.supr-con].
11. Завьялов Д.В., Крючков С.В., Тюлькина Т.А. Численное моделирование эффекта выпрямления тока, индуцированного электромагнитной волной в графене // *Физика и техника полупроводников*. 2010. Т. 44. Вып. 7. С. 910–914.

HYDRODYNAMIC DESCRIPTION OF THE ELECTRON MOTION IN THE GRAPHEN CRYSTAL 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 motion of the charged particles in graphen in the frame of the quantum non-local hydrodynamic description is considered. It is shown as results of the mathematical modeling that the mentioned motion is realizing in the soliton forms. The dependence of the size and structure of solitons on the different physical parameters is investigated.

Key words: *quantum non-local hydrodynamics, theory of transport processes in graphen, soliton.*