ISSN 2079-3316 **ПРОГРАММНЫЕ СИСТЕМЫ: ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ** т. **12**, № 1(48), с. 3–19

ББК 32.972+22.379
ГРНТИ 27.35.57
УДК 519.688:004.942

А. Д. Панферов, Н. А. Новиков, А. А. Трунов

Моделирование поведения графена во внешних электрических полях

Аннотация. В работе представлены результаты, полученные при разработке программного комплекса для вычисления наблюдаемых параметров монослойного графена в условиях действия на него внешнего электрического поля. Используемая физическая модель позволяет детально воспроизводить такие параметры, но требует большого объёма вычислений для получения точных значений. Основой модели является система кинетических уравнений, обеспечивающих вычисление зависящей от времени функции распределения носителей заряда в двумерном импульсном пространстве. Требуемые вычислительные ресурсы пропорциональны количеству узлов расчетной сетки, покрывающей импульсное пространство. Характер поведения модели позволяет использовать локальные сетки, покрывающие только относительно небольшую часть полной области определения вычисляемой функции.

Применительно к моделированию результатов действия коротких высокочастотных импульсов электрического поля показано, что анализ поведения модели при максимальном уровне внешнего поля может использоваться для поиска и локализации областей в импульсном пространстве, определение функции распределения в которых достаточно для получения значений наблюдаемых. Даже в условиях действия слабых внешних электрических полей область локализации функции распределения можно определять по результатам вычисления её значений на относительно разреженных сетках.

Получение наблюдаемых параметров основано на вычислении интегральных характеристик функции распределения в двумерном импульсном пространстве. Реализация такого интегрирования одновременно с вычислением в параллельном режиме значений функции распределения на оптимизированной сетке избавляет от ненужного сохранения значений функции распределения, выдавая на выходе одномерные временные ряды, представляющие данные о динамике наблюдаемых параметров, интересных с точки зрения анализа поведения рассматриваемой модели.

Ключевые слова и фразы: численное моделирование, графен, функция распределения носителей заряда, оптимальный выбор расчетной сетки, вычисление наблюдаемых параметров.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-07-00778.

Введение

Интерес к графену, как одному из перспективных материалов для современной электроники, в значительной степени обусловлен особенностями его отклика на действие внешних электрических полей [1–4]. Для его практического использования необходимо уметь достаточно точно соотносить параметры действующего поля (частотный спектр, напряженность, зависимость от времени и т.п.) с результатами его действия на этот материал. Это требует адекватной теоретической модели и методов её использования. На основе классической модели безмассовых фермионов [5, 6] в работах [7–9] был предложен и развит подход, основанный на использовании квантового кинетического уравнения для описания на языке квантовой теории поля процессов образования и эволюции носителей заряда в псевдо-двумерном монослое графена в условиях действия внешнего классического электрического поля. В результате для функции распределения носителей $f(p_1, p_2, t)$ была определена в явном виде система обыкновенных дифференциальных уравнений (см., например, [7]) с выражающимися через параметры действующего поля переменными коэффициентами. Эта функция распределения определяется в двумерном импульсном пространстве $-\pi \leq p_1 \leq \pi, -\pi \leq p_2 \leq \pi$ (первая зона Бриллюэна) и характеризует вероятность обнаружить носитель заряда со значениями импульса $\{p_1, p_2\}$ в момент времени t. Зная эту функцию, можно вычислять наблюдаемые параметры, такие как поверхностные плотности носителей заряда и тока.

Трудности использования этой модели определяются тем обстоятельством, что лежащая в её основе система уравнений может решаться только численными методами и для каждой рассматриваемой точки импульсного пространства $\{p_1, p_2\}$ решение необходимо искать независимо. Это обуславливает высокую вычислительную сложность процедуры вычисления наблюдаемых величин и высокую актуальность поиска путей её минимизации. Подробное изложение трудностей использования данного подхода содержится в работе [10]. В ней демонстрируется возможность использования адаптивной сетки на основе квадродерева для вычисления конечного состояния $f(p_1, p_2, t \to \infty)$, формирующегося после завершения действия внешнего электрического поля с импульсным характером зависимости от времени. Представленная в этой работе процедура позволяет автоматизировать процесс построения сетки переменной плотности в области локализации максимальных значений функции распределения и обеспечить существенную экономию ресурсов по сравнению с использованием регулярных сеток. Однако проблема предварительного определения местоположения области локализации максимальных значений не имела эффективного решения.

В предлагаемой работе показывается, что характер зависимости $f(p_1, p_2)$ во время действия внешнего электрического поля существенно отличается от $f(p_1, p_2, t \to \infty)$. В присутствии внешнего поля значения $f(p_1, p_2)$ доступны для вычисления с использованием стандартной арифметики двойной точности во всей области определения $-\pi \leq p_1 \leq \pi, -\pi \leq p_2 \leq \pi$ или в достаточно большой её части. При этом $f(p_1, p_2)$ ведет себя гладко за исключением области максимальных значений. Такое поведение функции распределения позволяет определять местоположение области максимальных значений для использования в ней плотных регулярных сеток или адаптивной сетки. Отдельно исследован вопрос об особенностях моделирования действия слабых электрических полей. Представлены результаты реализации процедуры воспроизведения всей эволюции рассматриваемой модели из начального состояния $f(p_1, p_2, t \to -\infty) = 0$ в конечное состояние $f(p_1, p_2, t \to \infty) \neq 0$ и определения по этим данным динамики наблюдаемых характеристик.

1. Функция распределения носителей в импульсном пространстве в присутствии внешнего поля

Исходно в качестве цели использования кинетической модели [7] графена рассматривалось воспроизведение его состояния после завершения действия внешнего поля по аналогии с приложением этого подхода к квантовой электродинамике [11, 12]. Но при сопоставлении полученных результатов с данными экспериментальных исследований и результатами использования других теоретических моделей стало понятно, что протекающие во время действия поля процессы также крайне интересны и существенны [13–15]. Это стало поводом рассматривать время t как полноценный третий аргумент функции распределения и исследовать её поведение на всем интервале эволюции. С точки зрения проблемы выбора расчетных сеток в импульсном пространстве существенным оказалось то, что в присутствии даже относительно слабого внешнего поля характер поведения функции распределения претерпевает существенные изменения.

Рассмотрим в качестве примера моделирование результатов действия короткого импульса электрического поля вида

$$E_1(t) = E_0 \cos(\omega t) \exp\left(- \frac{t^2}{2(\frac{\sigma}{\omega})^2} \right), \; E_2(t) = 0, \tag{1}$$

где циклическая частота $\omega = 2\pi\nu$ определяется через частоту действующего поля ν, параметр σ определяет характерную длительность импульса, а амплитудное значение E_0 соответствует максимальной напряженности поля в момент времени $t = 0$. Поле имеет постоянное направление действия, с которым ассоциировано направление первой координатной оси.

Выберем следующие значения параметров: длительность $\sim 2 \times 10^{-12}$ с, частота несущей $\sim 2 \times 10^{12}$ Гц, амплитуда $\sim 3 \times 10^4$ В/см. Это достаточно характерный набор параметров, определяющий

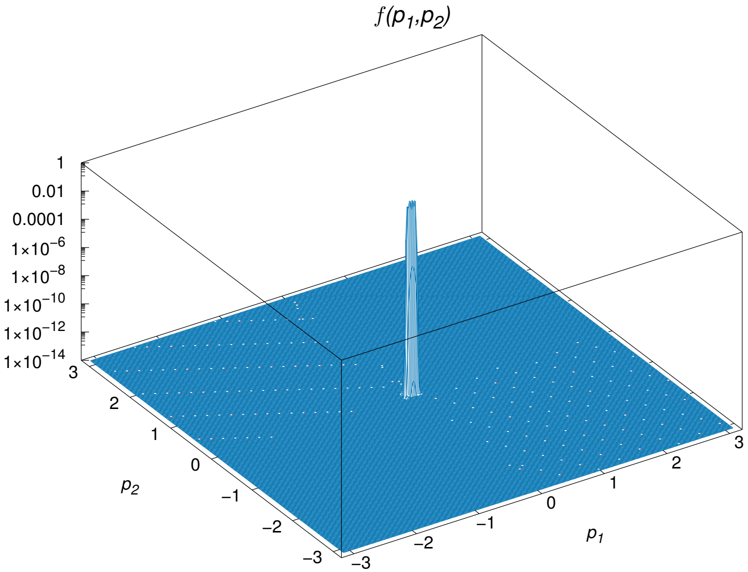


Рисунок 1. Функция распределения $f(p_1, p_2, t \to -\infty)$ после завершения действия импульса поля с параметрами: длительность $\sim 2 \times 10^{-12}$ с, частота несущей $\sim 2 \times 10^{12}$ Гц, амплитуда $\sim 3 \times 10^4$ В/см

очень короткий высокочастотный импульс с напряжённостью поля в окрестностях границы нелинейности. Результаты действия на графен импульсов с близкими параметрами экспериментально исследовались, например, в работе [2]. По завершению такого импульса функция распределения принимает вид $f(p_1, p_2, t \to \infty)$, представленный на рисунке 1. Для наглядности на этом рисунке на регулярной сетке размером 312×312 показана вся области определения $f(p_1, p_2)$. Не смотря на то, что логарифмическая шкала имеет диапазон значений $1.0 \times 10^{-14} \le f \le 1.0$, только в 62 точках (из представленных на рисунке 97344) значение функции распределения превышает порог отсечения 1.0×10^{-14}.

Более детальное представление о характере поведения $f(p_1, p_2)$ в центральной области импульсного пространства даёт рисунок 2. На нем на сетке с размерами 102×102 показана область локализации значений $f(p_1, p_2)$, определяющих наблюдаемые характеристики модели.

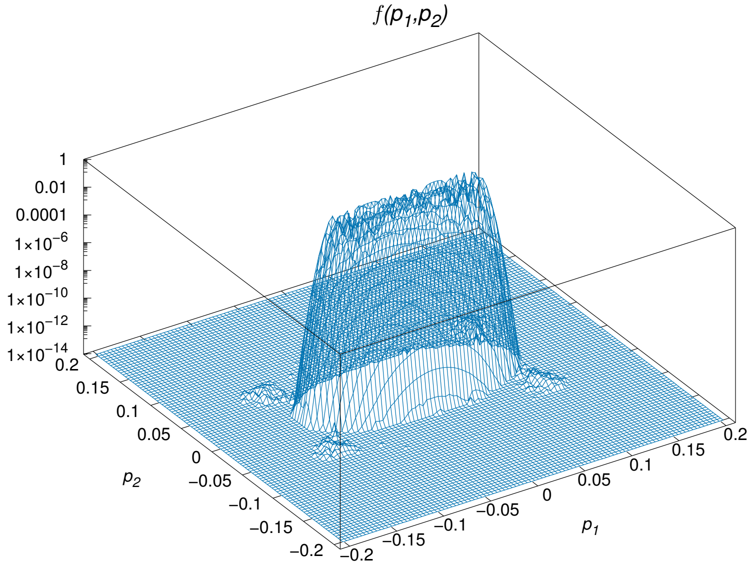


Рисунок 2. Детализация функции распределения $f(p_1, p_2, t \to -\infty)$, представленной на рисунке 1

В задаче точного воспроизведения $f(p_1, p_2, t \to -\infty)$ проблемой является поиск области локализации в отсутствии априорной информации о её местоположении. Большой набор существующих оптимизационных инструментов оказывается неприменимым, поскольку почти во всей области определения мы не просто не знаем значений этой функции, но и не имеем возможности их вычислить при условии ограничения использованием переменных типа *double* на 64-х разрядных вычислительных системах. Можно выйти за рамки этих ограничений и использовать “длинную арифметику” с произвольной точностью представления операндов [**16**]. Но это ведёт к неприемлемому для практического использования снижению быстродействия [**17**]. Поэтому исходно был реализован поиск областей локализации с последовательным перебором регулярных сеток увеличивающейся плотности [**10**].

Теперь рассмотрим поведение функции распределения в присутствии электрического поля. Для определенности и наглядности выберем момент времени $t = 0$, когда напряженность электрического поля (1) максимальна. При выбранных ранее параметрах $f(p_1, p_2, t = 0)$ имеет вид, представленный на рисунке 3.

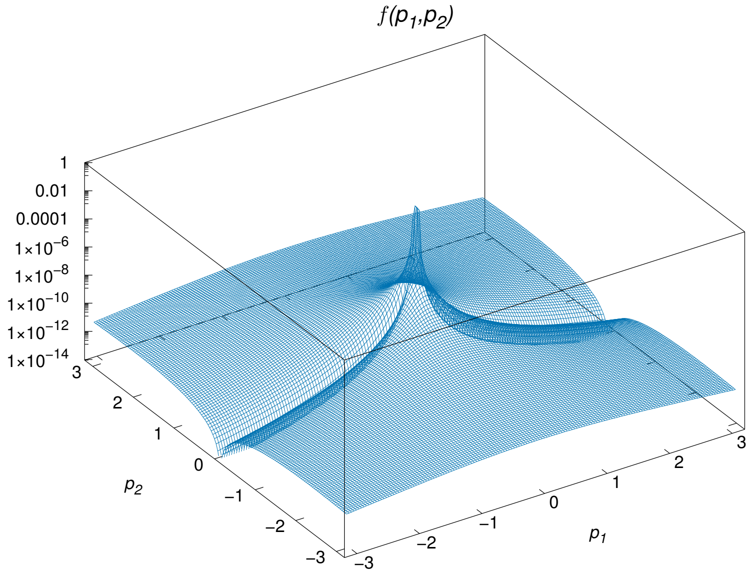


Рисунок 3. Функция распределения $f(p_1, p_2, t = 0)$ для момента времени с максимальным значением напряжённости внешнего поля. Остальные параметры аналогичны рисунку 1

Для полноты картины на рисунке 4 представлен аналогичный “предшественник” для рисунка 2.

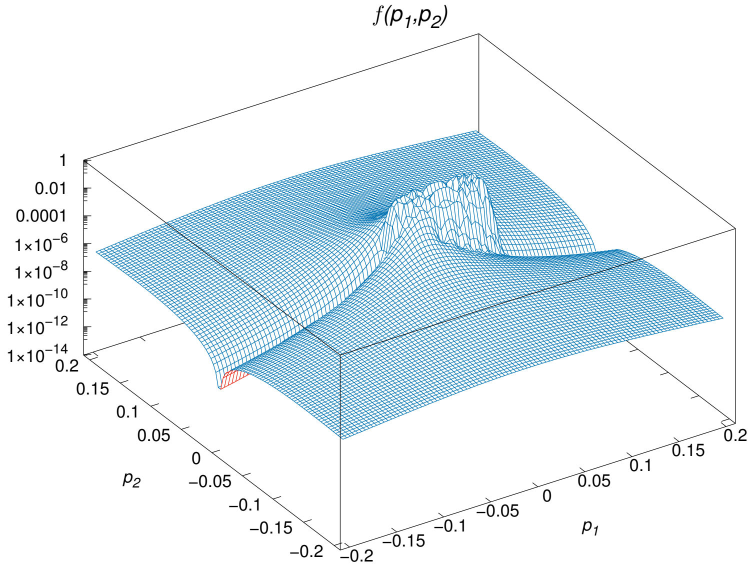


Рисунок 4. Детализация функции распределения $f(p_1, p_2, t = 0)$, представленной на рисунке 3, для центральной области импульсного пространства

Хотя область локализации относительно больших значений, близких или сопоставимых с максимально достижимым $f(p_1, p_2) \lesssim 1.0$, остаётся очень компактной, вне неё значения функции не уходят за пределы нижней границы 1.0×10^{-14} доступного для вычислений с использованием переменных типа *double* диапазона. При этом $f(p_1, p_2)$ ведет себя гладко.

Следовательно, рассматривая функцию распределения во время действия внешнего поля мы можем получить информацию, необходимую для поиска и локализации её максимальных, определяющих наблюдаемые параметры, значений. В том числе и в исходной постановке задачи, т.е. для конечного вида функции распределения, который она принимает по завершению действия внешнего поля.

2. Моделирование действия слабых внешних полей

Представленные результаты демонстрируют возможность эффективно локализовать и точно воспроизводить функцию распределения носителей, формируемую импульсом поля с напряженностью

$E_0 \sim 3 \times 10^4$ В/см. Моделирование действия полей с еще большими значениями не представляет принципиальных трудностей и требует только уверенности в адекватности используемой модели реальной физической системе.

Переход же к более низким значениям напряженности электрического поля ведет к усложнению задачи достаточно точного воспроизведения $f(p_1, p_2, t \to \infty)$, поскольку область её локализации быстро уменьшается. И даже в присутствии поля в условиях использования арифметики двойной точности область доступных для воспроизведения значений функции распределения оказывается ограниченной. Для оценки нижней границы доступных для моделирования полей был выполнен ряд численных экспериментов в диапазоне значений $3 \times 10^4 \leq E_0 \leq 3$ В/см. Результаты для $f(p_1, p_2, t = 0)$ при $E_0 = 3 \times 10^2$ В/см и $E_0 = 3$ В/см показаны на рисунках 5 и 6.

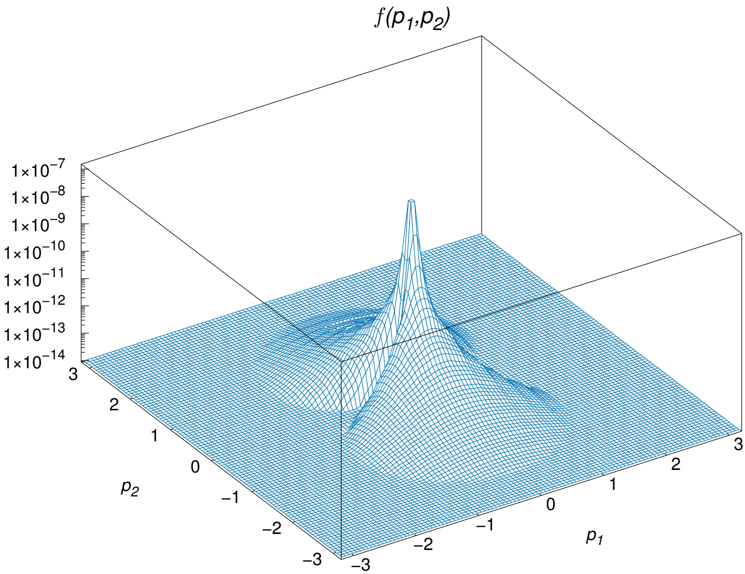


Рисунок 5. Функция распределения $f(p_1, p_2, t = 0)$ для момента времени с максимальным значением напряжённости внешнего поля 3×10^2 В/см. Остальные параметры аналогичны рисунку 3

Использовались точно такие же сетки, как и при получении результатов, представленных на рисунке 3.

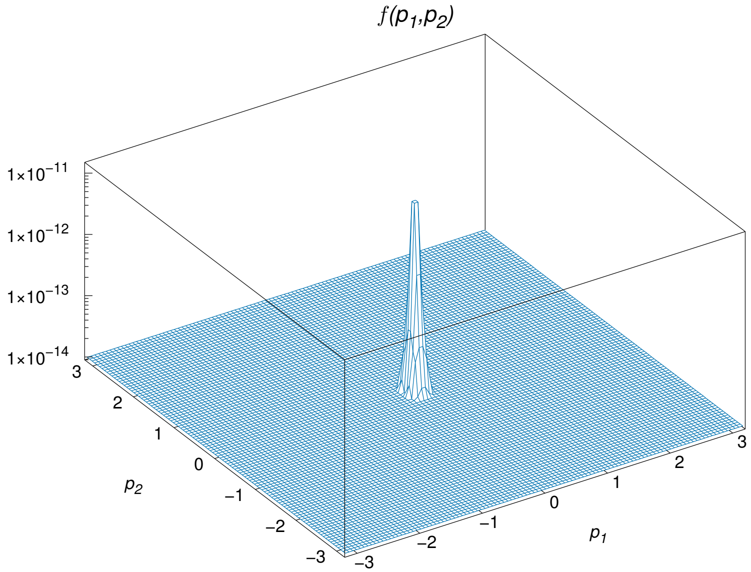


Рисунок 6. Функция распределения $f(p_1, p_2, t = 0)$ для момента времени с максимальным значением напряжённости внешнего поля 3 В/см. Остальные параметры аналогичны рисункам 3 и 5

Уже при $E_0 = 3 \times 10^2$ В/см и в присутствии внешнего поля в значительной части области $-\pi \le p_1 \le \pi, -\pi \le p_2 \le \pi$ значения функции распределения оказываются меньше порога 1.0×10^{-14}. Но доступная для воспроизведения часть значений функции распределения ведёт себя гладко, достигая максимальных значений $\sim 1.25 \times 10^{-7}$ в симметрично расположенных точках $p_1 \pm 0.025, p_2 \pm 0.025$. Это дает основания полагать, что определяемый некоторым пороговым значением функции распределения контур будет охватывать всю область локализации $f(p_1, p_2, t \to \infty)$. При выборе в качестве порогового значения $f(p_1, p_2, 0) = 1.0 \times 10^{-7}$ локализуется область $-0.05 \le p_1 \le 0.05, -0.05 \le p_2 \le 0.05$ за пределами которой значений $f(p_1, p_2, 0) \ge 1.0 \times 10^{-7}$ не существует. Такая оценка позволяет уменьшить площадь исследуемой области импульсного пространства с использованием более плотных сеток примерно в 4000 раз. Конкретный выбор используемого порогового значения, его соотнесение с границей доступных для вычисления значений $f(p_1, p_2, t \to \infty)$, зависимость этого порогового значения от характера зависимости электрического поля от времени требуют дальнейших исследований.

На нижней границе $E_0 = 3$ В/см рассматривавшегося диапазона область доступных для вычисления значений очень мала, а максимальные значения функции распределения составляют всего $f(p_1, p_2, 0) = 1.255 \times 10^{-11}$, которые достигаются в тех же точках $p_1 \pm 0.025, p_2 \pm 0.025$ (в использовавшейся сетке нет точек, расположенных ближе к началу координат). Тем не менее, этого достаточно для локализации функции распределения и точного её воспроизведения.

Представленные результаты показывают, что во всем рассматривавшемся диапазоне $3 \leq E_0 \leq 3 \times 10^4$ В/см обеспечивается возможность использования результатов вычисления функции распределения в присутствии внешнего поля для определения области локализации её максимальных значений.

3. Воспроизведение динамики наблюдаемых характеристик

Процедура моделирования позволяет получит исчерпывающую информацию как о $f(p_1, p_2, t \to \infty)$, так и о значениях функции распределения в любой промежуточный момент времени $f(p_1, p_2, t)$ начиная с момента включения внешнего поля. В общем случае это достаточно объёмные трехмерные массивы, данные из которых необходимо затем анализировать. При этом содержащаяся в $f(p_1, p_2, t)$ для каждого конкретного момента времени информация избыточна, так как в полном объеме не верифицируема экспериментально. Для оценки наблюдаемых параметров моделируемых процессов достаточно интегральных характеристик этой функции вида:

$$n(t) = A \int d^2p (2\pi\hbar)^{-2} f(\vec{p}, t), \tag{2}$$

$$j(t) = B \int d^2p (2\pi\hbar)^{-2} f(\vec{p}, t) F(p_1, p_2, E(t)). \tag{3}$$

Первый из приведенных интегралов определяет поверхностную плотность заряженных носителей в текущий момент времени, а второй - поверхностную плотность электрического тока, порождаемого этими носителями. В этих выражениях A и B являются константами, $F(p_1, p_2, E(t))$ - функция от координат в импульсном пространстве и напряженности электрического поля. Поскольку в рассматриваемой постановке задачи поле $E(t)$ зависит от времени, функция F также зависит от времени. Интегрирование выполняется по области определения $f(p_1, p_2)$, а фактически в пределах области, определяющей основной вклад в наблюдаемые интегральные характеристики.

Если мы точно знаем набор интегральных характеристик, поведение которых нас интересует, разделение процедуры вычисления и сохранения 3D массива значений $f(p_1, p_2, t)$ и процедуры интегрирования оказывается не целесообразным. В версию моделирующей системы, реализованную с использованием MPI, был введен вариант работы, обеспечивающий вычисление (и сохранение) для последовательности временных точек только заданного набора интегральных значений. Для этого используется процедура редукции, реализуемой средствами MPI. Это обеспечивает очень существенное сокращение требуемых ресурсов на хранение и последующую обработку данных, поскольку вместо 3D массива мы имеем дело только с несколькими 1D массивами задаваемой длины.

В качестве примера на рисунке 7 приведены результаты вычисления поверхностной плотности носителей зарядов (2) и поверхностной плотности тока (3) в условиях действия импульса внешнего поля с максимальным значением напряженности 3×10^2 В/см. Остальные параметры те-же, что использовались ранее. Эти массивы содержат по 361 значению. Каждое из значений соответствует определенному моменту времени с шагом примерно 5 фемтосекунд. На рисунках представлено поведение наблюдаемых параметров с начала появления внешнего поля (когда носители и ток отсутствуют) и до их выхода на фиксированные значения после выключения внешнего поля.

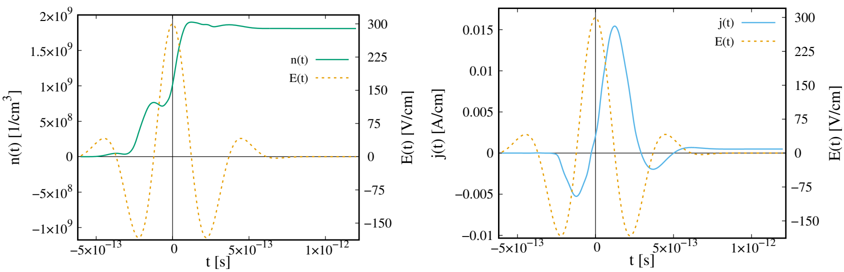


Рисунок 7. Поверхностная плотность носителей зарядов $n(t)$ (2) и поверхностная плотность тока $j(t)$ (3) в условиях действия импульса внешнего поля с максимальным значением напряженности 3×10^2 В/см

Для наглядности и понимания привязки протекающих процессов к зависимости от времени внешнего электрического поля, его значения также приведены на рисунках. Такое представление результатов моделирования удобно для понимания характера взаимосвязи наблюдаемых параметров и параметров действующего электрического поля.

Заключение

При численном моделировании действия на графен внешнего электрического поля воспроизведение и учет поведения используемой физической модели во времени предоставляет данные, анализ которых позволяет эффективно оптимизировать вычислительную процедуру. Это справедливо в том числе и при моделировании действия слабых электрических полей. В работе представлены также результаты реализации отказа от сохранения избыточных параметров поведения модели. Вывод по результатам счета только интегральных характеристик на порядки сокращает объём подлежащих сохранению данных и обеспечивает компактное и наглядное представление результатов.

Список литературы

[1] M. M. Glazov, S. D. Ganichev. “High frequency electric field induced nonlinear effects in graphene”, *Physics Reports*, **535**:3 (2014), pp. 101–138. doi ↑4

[2] P. Bowlan, E. Martinez-Moreno, K. Reimann, T. Elsaesser, M. Woerner. “Ultrafast terahertz response of multilayer graphene in the nonperturbative regime”, *Phys. Rev. B*, **89** (2014), 041408. doi ↑4,7

[3] M. Baudisch, A. Marini, J. D. Cox, T. Zhu, F. Silva, S. Teichmann, M. Massicotte, F. Koppens, L. S. Levitov, F. J. García de Abajo, J. Biegert. “Ultrafast nonlinear optical response of Dirac fermions in graphene”, *Nature Communications*, **9** (2018), 1018. doi ↑4

[4] Zi-Yu Chen, Rui Gin. “Circularly polarized extreme ultraviolet high harmonic generation in graphene”, *Optics Express*, **27**:3 (2019), pp. 3761–3770. doi ↑4

[5] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov. “Two-Dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene”, *Nature*, **438** (2005), pp. 197–200. doi ↑4

[6] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim. “The eletronic properties of graphene”, *Rev. Mod. Phys.*, **81** (2009), 109. doi ↑4

[7] S. A. Smolyansky, D. V. Churochkin, V. V. Dmitriev, A. D. Panferov, B. Kämpfer. “Residual currents generated from vacuum by an electric field

pulse in 2+1 dimensional QED models", *EPJ Web of Conferences*, **138** (2017), 06004, 5 pp. ↑4,5

[8] A. D. Panferov, S. A. Smolyansky, D. B. Blaschke, N. T. Gevorgyan. "Comparing two different descriptions of the I-V characteristic of graphene: theory and experiment", *EPJ Web of Conferences*, **204** (2019), 06008, 6 pp. ↑4

[9] S. A. Smolyansky, A. D. Panferov, D. B. Blaschke, N. T. Gevorgyan. "Nonperturbative kinetic description of electron-hole excitations in graphene in a time dependent electric field of arbitrary polarization", *Particles*, **2**:2 (2019), pp. 208–230. ↑4

[10] А. Д. Панферов, А. В. Маханьков, А. А. Трунов. «Использование адаптивной сетки на основе квадродерева для моделирования конечного состояния квантово-полевой системы при импульсном внешнем воздействии», *Программные системы: теория и приложения*, **11**:1(44) (2020), с. 79–92. ↑4,8

[11] D. B. Blaschke, B. Kämpfer, S. M. Schmidt, A. D. Panferov, A. V. Prozorkevich, S. A. Smolyansky. "Properties of the electron-positron plasma created from a vacuum in a strong laser field: Quasiparticle excitations", *Phys. Rev. D*, **88** (2013), 045017. ↑5

[12] A. D. Panferov, S. A. Smolyansky, A. Otto, B. Kämpfer, D. B. Blaschke, L. Juchnowski. "Assisted dynamical Schwinger effect: pair production in a pulsed bifrequent field", *Eur. Phys. J. D*, **70** (2016), 56. ↑5

[13] N. Yoshikawa, T. Tamaya, K. Tanaka. "High-harmonic generation in graphene enhanced by elliptically polarized light excitation", *Science*, **356**:6339 (2017), pp. 736–738. ↑5

[14] M. Taucer, T. J. Hammond, P. B. Corkum, G. Vampa, C. Couture, N. Thiré, B. E. Schmidt, F. Légaré, H. Selvi, N. Unsuree, B. Hamilton, T. J. Echtermeyer, M. A. Denecke. "Nonperturbative harmonic generation in graphene from intense midinfrared pulsed light", *Phys. Rev. B*, **96** (2017), 195420. ↑5

[15] S. A. Smolyansky, A. D. Panferov, D. B. Blaschke, N. T. Gevorgyan. "Kinetic equation approach to graphene in strong external fields", *Particles*, **3**:2 (2020), pp. 456–476. ↑5

[16] D. H. Bailey, J. M. Borwein. "High-precision arithmetic in mathematical physics", *Mathematics*, **3**:2 (2015), pp. 337–367. ↑8

[17] А. С. Коржавина, В. С. Князьков. «Реализация высокоточных вычислений в базисе модулярно-интервальной арифметики», *Программные системы: теория и приложения*, **10**:3(42) (2019), с. 81–127. ↑8

Поступила в редакцию 14.12.2020
Переработана 08.02.2021
Опубликована 02.03.2021

Рекомендовал к публикации *д.т.н. А. М. Цирлин*

Пример ссылки на эту публикацию:

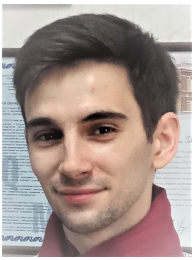
А. Д. Панферов, Н. А. Новиков, А. А. Трунов. «Моделирование поведения графена во внешних электрических полях». *Программные системы: теория и приложения*, 2021, **12**:1(48), с. 3–19.
10.25209/2079-3316-2021-12-1-3-19
http://psta.psiras.ru/read/psta2021_1_3-19.pdf

Об авторах:

Анатолий Дмитриевич Панферов

К.ф.-м.н., зам. начальника ПРЦНИТ Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского по научно-производственной деятельности. Научные интересы: высокопроизводительные вычисления, параллельное программирование, численное решение квантовых кинетических уравнений, моделирование процессов вакуумного рождение частиц в КЭД, генерации носителей в полупроводниках в том числе бесщелевых, процессов на ранних стадиях столкновения релятивистских ядер.

0000-0003-2332-0982
e-mail: panferovad@info.sgu.ru



Николай Андреевич Новиков

Магистрант Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского. Научные интересы: моделирование физических процессов на высокопроизводительных вычислительных системах, параллельное программирование.

0000-0003-2425-805X
e-mail: n_nik1997@mail.ru

Александр Алексеевич Трунов

Научные интересы: моделирование физических процессов на высокопроизводительных вычислительных системах, применение параллельного программирования для решения прикладных задач, моделирование виртуальных приборов в среде графического программирования LabVIEW.

0000-0003-2831-6763
e-mail: snek271@yandex.ru

CSCSTI 27.35.57
UDC 519.688:004.942

Anatolii D. Panferov, Nikolai A. Novikov, Alexandr A. Trunov. *Simulate the behavior of graphene in external electric fields.*

Abstract. The paper presents the results obtained in developing a complex for calculating the parameters of monolayer graphene under an external electric field's action. The used physical model allows detailed reproduction of such parameters but requires an extensive computation for exact values. The model is based on the system of kinetic equations that provide the calculation of the time-dependent distribution function of charge carriers in two-dimensional momentum space. The computational resource requirements are proportional to the number of the computational grid nodes that cover the momentum space. The model's behavior allows local grids that cover only a relatively small part of the computed function domain.

We model the results of the action of short high-frequency pulses of an electric field and analyze the behavior of the model at the maximum level of the external field to search and localize regions in momentum space, the determination of the distribution function in which is sufficient to obtain the values of the observables. Such localization of distribution functions from calculations on relatively sparse grids works even for weak external electric fields.

Obtaining the observed parameters requires calculating the integral characteristics of the distribution function in the two-dimensional momentum space. Its implementation in parallel with the simultaneous calculation of the distribution function's values on the optimized grid makes it unnecessary to preserve the values of the distribution function and possible to obtain only one-dimensional time series. Such representing data on the dynamics of the observed parameters is useful for analyzing the behavior of the model under consideration. (*In Russian*).

Key words and phrases: numerical simulation, graphene, distribution function of charge carriers, optimal choice of the computational grid, calculation of the observed parameters.

2020 *Mathematics Subject Classification:* 81T80; 35Q40, 81V10

Supported by RFBR according to the research project 18-07-00778.

References

[1] M. M. Glazov, S. D. Ganichev. "High frequency electric field induced nonlinear effects in graphene", *Physics Reports*, **535**:3 (2014), pp. 101–138. ↑4

[2] P. Bowlan, E. Martinez-Moreno, K. Reimann, T. Elsaesser, M. Woerner. "Ultrafast terahertz response of multilayer graphene in the nonperturbative regime", *Phys. Rev. B*, **89** (2014), 041408. ↑4,7

[3] M. Baudisch, A. Marini, J. D. Cox, T. Zhu, F. Silva, S. Teichmann, M. Massicotte, F. Koppens, L. S. Levitov, F. J. García de Abajo, J. Biegert. "Ultrafast nonlinear optical response of Dirac fermions in graphene", *Nature Communications*, **9** (2018), 1018. ↑4

[4] Zi-Yu Chen, Rui Gin. "Circularly polarized extreme ultraviolet high harmonic generation in graphene", *Optics Express*, **27**:3 (2019), pp. 3761–3770. ↑4

[5] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov. "Two-Dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene", *Nature*, **438** (2005), pp. 197–200. ↑4

[6] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim. "The eletronic properties of graphene", *Rev. Mod. Phys.*, **81** (2009), 109. ↑4

[7] S. A. Smolyansky, D. V. Churochkin, V. V. Dmitriev, A. D. Panferov, B. Kämpfer. "Residual currents generated from vacuum by an electric field pulse in 2+1 dimensional QED models", *EPJ Web of Conferences*, **138** (2017), 06004, 5 pp. ↑4,5

[8] A. D. Panferov, S. A. Smolyansky, D. B. Blaschke, N. T. Gevorgyan. "Comparing two different descriptions of the I-V characteristic of graphene: theory and experiment", *EPJ Web of Conferences*, **204** (2019), 06008, 6 pp. ↑4

[9] S. A. Smolyansky, A. D. Panferov, D. B. Blaschke, N. T. Gevorgyan. "Nonperturbative kinetic description of electron-hole excitations in graphene in a time dependent electric field of arbitrary polarization", *Particles*, **2**:2 (2019), pp. 208–230. ↑4

[10] A. D. Panferov, A. V. Makhankov, A. V. Trunov. "The use of an adaptive mesh based on a quadtree for modeling the final state of a quantum field system under pulsed external action", *Program Systems: Theory and Applications*, **11**:1(44) (2020), pp. 93–105. ↑4,8

[11] D. B. Blaschke, B. Kämpfer, S. M. Schmidt, A. D. Panferov, A. V. Prozorkevich, S. A. Smolyansky. "Properties of the electron-positron plasma created from a vacuum in a strong laser field: Quasiparticle excitations", *Phys. Rev. D*, **88** (2013), 045017. ↑5

[12] A. D. Panferov, S. A. Smolyansky, A. Otto, B. Kämpfer, D. B. Blaschke, L. Juchnowski. "Assisted dynamical Schwinger effect: pair production in a pulsed bifrequent field", *Eur. Phys. J. D*, **70** (2016), 56. ↑5

[13] N. Yoshikawa, T. Tamaya, K. Tanaka. "High-harmonic generation in graphene enhanced by elliptically polarized light excitation", *Science*, **356**:6339 (2017), pp. 736–738. ↑5

[14] M. Taucer, T. J. Hammond, P. B. Corkum, G. Vampa, C. Couture, N. Thiré, B. E. Schmidt, F. Légaré, H. Selvi, N. Unsuree, B. Hamilton, T. J. Echtermeyer, M. A. Denecke. "Nonperturbative harmonic generation in graphene from intense midinfrared pulsed light", *Phys. Rev. B*, **96** (2017), 195420. ↑5

[15] S. A. Smolyansky, A. D. Panferov, D. B. Blaschke, N. T. Gevorgyan. “Kinetic equation approach to graphene in strong external fields”, *Particles*, **3**:2 (2020), pp. 456–476. ↑5

[16] D. H. Bailey, J. M. Borwein. “High-precision arithmetic in mathematical physics”, *Mathematics*, **3**:2 (2015), pp. 337–367. ↑8

[17] A. S. Korzhavina, V. S. Knyaz’kov. “High-precision computations using residue-interval arithmetic on FPGAs”, *Program Systems: Theory and Applications*, **10**:3(42) (2019), pp. 81–127 (in Russian). ↑8

Sample citation of this publication:

Anatolii D. Panferov, Nikolai A. Novikov, Alexandr A. Trunov. “Simulate the behavior of graphene in external electric fields”. *Program Systems: Theory and Applications*, 2021, **12**:1(48), pp. 3–19. (*In Russian*). 10.25209/2079-3316-2021-12-1-3-19

http://psta.psiras.ru/read/psta2021_1_3-19.pdf