


УДК 519.688:519.876.5

 10.25209/2079-3316-2024-15-3-3-22

Воспроизведение отклика графена на действие внешнего электрического поля с использованием модели сильно взаимодействующих ближайших соседей

Анатолий Дмитриевич **Панферов**^{1✉}, Николай Андреевич **Новиков**²,
Анастасия Алексеевна **Ульянова**³

¹⁻³ Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, Саратов, Россия

[✉] panferovad@sgu.ru

Аннотация. Численное моделирование взаимодействия электромагнитного излучения с графеном позволяет воспроизводить быстро протекающие нелинейные процессы и их наблюдаемые проявления. В работе представлены результаты, полученные в процессе разработки программного решения для расчета параметров таких процессов.

Для физики графена классическим является приближение безмассовых фермионов. Однако при исследовании процессов с высокой плотностью энергии модель на основе этого приближения может оказаться за пределами своей применимости и получаемые на её основе результаты нельзя считать достоверными. Для решения этой проблемы выполнен переход к существенно более точному описанию свойств электронной подсистемы исследуемого материала, основанному на строгом учете сильного взаимодействия ближайших соседей в его кристаллической решетке.

Проведенное сравнительное тестирование двух моделей показало, что при низких энергетических характеристиках внешнего возмущения результаты совпадают. Однако, с ростом напряженности воздействующего электромагнитного поля проявляются и становятся существенными различия.

Новая точная модель имеет более сложную математическую формулировку и её использование требует больше вычислительных ресурсов. При одинаковых параметрах решаемой задачи это выражается в увеличении необходимого для выполнения расчетов времени. Относительные и абсолютные значения увеличения времени счета приведены для ряда примеров.

Полученные результаты позволяют расширить область параметров для моделирования нелинейных процессов в графене, например, генерации высокочастотных гармоник и обеспечить достоверность получаемых результатов.

Ключевые слова и фразы: численное моделирование, нелинейные процессы, квантовое кинетическое уравнение, модель сильно взаимодействующих ближайших соседей

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-21-00047, <https://rscf.ru/project/23-21-00047/>

Для цитирования: Панферов А. Д., Новиков Н. А., Ульянова А. А. *Воспроизведение отклика графена на действие внешнего электрического поля с использованием модели сильно взаимодействующих ближайших соседей* // Программные системы: теория и приложения. 2024. Т. 15. № 3(62). С. 3–22. https://psta.psir.ru/read/psta2024_3_3-22.pdf

Введение

Появление экспериментальных установок для генерации в широком диапазоне частот мощных и при этом очень коротких импульсов сделало возможным исследовать сверхбыструю динамику электронов твердых тел. В том числе двумерных кристаллов, среди которых выделяется своей необычной зонной структурой графен. Например, развивается такое новое направление, как прямое экспериментальное исследование зонной структуры различных материалов. Впервые это стало возможно при использовании фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением [1]. Новыми являются применимые в условиях естественной среды чисто оптические методы: томография зонной структуры с использованием боковой полосы гармоник [2], спектроскопия высокочастотных гармоник [3, 4], и интерферометрия Блоховских электронов [5]. Для их успешного применения необходимо уметь точно моделировать нестационарную квантовую динамику электронной подсистемы материала в сильных внешних электрических полях с произвольной зависимостью от времени. Такое моделирование может реализовываться с использованием подходов, в основе которых лежит переход от рассмотрения многочастичной системы к одночастичной задаче, решаемой с использованием зависящего от времени уравнение Шредингера в той или иной форме. Точность доступных результатов будет определяться на этапе задания гамильтониана одночастичной модели. Так, применительно к графену наиболее простым и при этом эффективным вариантом является использование приближения безмассовых Дираковских фермионов (MLF – Massless Fermions) [6, 7].

Близость модели MLF к квантовой электродинамике, описывающей реальные и виртуальные электроны и позитроны, взаимодействующие посредством электромагнитного поля, позволило адаптировать для моделирования процессов в графене подход на основе квантового кинетического уравнения [8–10]. Однако приближение MLF корректно только в непосредственной окрестности точек Дирака при энергии рассматриваемых состояний не более примерно 0.5 эВ. Необходимость при моделировании мощных и высокочастотных импульсов работать с состояниями в пределах всех возможных энергий (всей зоны Бриллюэна) требует перехода к строгому учету сильного взаимодействия ближайших соседей (TBM – Tight Binding Model).

Универсальность подхода на основе квантового кинетического уравнения позволяет выполнить такой переход. В статье представлена реализация полученной модели. Выполнено сравнение предсказываемой динамики заселенности электронных состояний с результатами приближения MLF

в условиях воздействия внешнего импульсного электрического поля. В области применимости приближения MLF показана близость получаемых результатов. За её пределами демонстрируются различия в поведении моделей. На основании вычислительных экспериментов получена оценка роста ресурсоемкости задачи моделирования при использовании более точной модели.

1. Кинетическое уравнение для модели сильно взаимодействующих ближайших соседей

Отклик графена на действие внешнего электрического поля определяется нестационарной квантовой эволюцией его электронов, выражающейся в их перераспределении по доступным состояниям. В рамках одноэлектронного приближения совокупность таких состояний можно рассматривать как двухуровневую систему со специфической зависимостью энергии от импульса (законом дисперсии). Существуют различные подходы для описания и моделирования таких процессов. Можно непосредственно использовать уравнение Шредингера с явной зависимостью от времени [11], методы функций Грина [12, 13] или зависящего от времени функционала плотности [14, 15]. Удобным с точки зрения реализации численных методов является квантовое кинетическое уравнение [8–10]

$$(1) \quad \begin{cases} \dot{f}(\bar{p}, t) = \frac{1}{2} \lambda(\bar{p}, t) u(\bar{p}, t), \\ \dot{u}(\bar{p}, t) = \lambda(\bar{p}, t) (1 - 2f(\bar{p}, t)) - \frac{2\epsilon(\bar{p}, t)}{\hbar} v(\bar{p}, t), \\ \dot{v}(\bar{p}, t) = \frac{2\epsilon(\bar{p}, t)}{\hbar} u(\bar{p}, t), \end{cases}$$

Оно независимо определяет вероятность заселения $f(\bar{p}, t)$ каждого из доступных состояний \bar{p} в двумерном импульсном пространстве и вспомогательные функции $u(\bar{p}, t)$ и $v(\bar{p}, t)$ если нам известен явный вид коэффициентов $\lambda(\bar{p}, t)$ и $\epsilon(\bar{p}, t)$. Определяя состояние $f(\bar{p}, t_{in})$, $u(\bar{p}, t_{in})$ и $v(\bar{p}, t_{in})$ в некоторый начальный момент времени t_{in} и решая задачу Коши, можно получить всю необходимую информацию о последующей эволюции. Далее начальное состояние будет определяться «вакуумными» условиями

$$(2) \quad f(\bar{p}, t_{in}) = u(\bar{p}, t_{in}) = v(\bar{p}, t_{in}) = 0.$$

В этом состоянии в отсутствие внешнего возмущающего воздействия система может находиться неограниченно долго. Поскольку нас интересует нетривиальная эволюция системы в условиях действия внешнего электрического поля, t_{in} должно предшествовать моменту его включения. Как правило, предметом рассмотрения являются короткие импульсы поля, после которых система переходит в новое стационарное состояние.

Конкретная процедура выбора используемого значения t_{in} зависит от способа задания возмущающего импульса и его характеристик.

Для получения целостной картины о поведении моделируемой системы необходимо рассматривать достаточно представительную выборку состояний (точек в импульсном пространстве) и для каждого из них решать уравнение (1). Независимость квантовой эволюции состояний обеспечивает возможность эффективного распараллеливания вычислительной процедуры. Проблематика построения выборок состояний для задач данного типа, обеспечивающих компромисс между точностью получаемых результатов и используемыми вычислительными ресурсами, рассматривалась в работах [16, 17].

Явный вид функций $\lambda(\vec{p}, t)$ и $\epsilon(\vec{p}, t)$ определяется гамильтонианом рассматриваемой системы и видом зависимости от времени внешнего возмущающего электрического поля. Интерес к графену с момента первых экспериментальных тестов был обусловлен свойствами его зонной структуры в окрестностях особых точек, в которых имеет место соприкосновение валентной зоны и зоны проводимости. Теория, развитая для описания наблюдаемых проявлений этих особенностей, эффективно использовала приближение безмассовых фермионов и соответствующий этой модели гамильтониан. Этот гамильтониан был использован и при адаптации метода квантового кинетического уравнения для графена. В этом случае

$$(3) \quad \lambda_{MLF}(\vec{p}, t) = eV_F^2 \frac{E_2(t)P_1 - E_1(t)P_2}{\epsilon_{MLF}^2(\vec{p}, t)},$$

$$(4) \quad \epsilon_{MLF} = V_F \sqrt{P_1^2 + P_2^2}.$$

Для обозначения этой версии коэффициентов использована аббревиатура MLF, e – элементарный заряд, V_F – скорость Ферми, E_1 и E_2 – компоненты внешнего электрического поля. Величины

$$(5) \quad P_1 = p_1 - eA_1(t), \quad P_2 = p_1 - eA_2(t)$$

это компоненты псевдоимпульса, соответствующего рассматриваемому состоянию, A_1 и A_2 – компоненты векторного потенциала внешнего электрического поля. Связь между компонентами векторного потенциала и вектора напряженности электрического поля, по определению, выражается соотношением:

$$(6) \quad E_i(t) = -\frac{\partial A_i(t)}{\partial t}, \quad i = 1, 2.$$

Однозначность определения векторного потенциала обеспечивается использованием Гамильтоновой калибровки. Приведенные выражения (3) и (4)

справедливы в системе координат с началом в одной из точек Дирака. При этом в данном приближении все такие точки эквивалентны. В ряде работ была продемонстрирована возможность использования разработанного подхода для моделирования отклика на внешние возмущения различного типа [8, 9, 18].

С ростом интереса к нелинейным явлениям в твердых телах в сильных электрических полях и появлением импульсных источников инфракрасного диапазона, способных генерировать очень короткие импульсы с высокой плотностью энергии, появилась потребность в моделировании таких процессов применительно к графену. В этом случае необходимо рассматривать и учитывать динамику состояний не только в непосредственной окрестности точек Дирака, где энергии состояний малы. Результаты, которые дает в этом случае приближение безмассовых фермионов, будут заведомо не точны.

Для решения этой проблемы необходимо использовать строгую модель ТВМ [19, 20], точно учитывающую взаимодействие с ближайшими соседями для каждого из атомов в гексагональной решетке графена. В этой модели точки Дирака формируют две неэквивалентные подрешетки и их необходимо рассматривать независимо. По этой причине удобно использовать систему отсчета с началом, расположенным между парой неэквивалентных точек Дирака. В такой системе отсчета выражения для коэффициентов системы уравнений (1) для ТВМ принимают вид [9, 21]:

$$(7) \quad \lambda_{ТВМ}(\bar{p}, t) = -\frac{4e\hbar V_F^2}{9a\varepsilon_{ТВМ}^2(\bar{p}, t)} \left(E_1(t)\sqrt{3} \left(\cos\left(\frac{\sqrt{3}aP_1}{2\hbar}\right) \cos\left(\frac{aP_2}{2\hbar}\right) + \cos\left(\frac{aP_2}{\hbar}\right) \right) + E_2(t)3 \sin\left(\frac{\sqrt{3}aP_1}{2\hbar}\right) \sin\left(\frac{aP_2}{2\hbar}\right) \right),$$

$$(8) \quad \varepsilon_{ТВМ} = \frac{2\hbar V_F}{\sqrt{3}a} \sqrt{3 - 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}aP_1}{2\hbar}\right) \cos\left(\frac{aP_2}{2\hbar}\right) + 2 \cos\left(\frac{aP_2}{\hbar}\right)},$$

где \hbar – приведенная постоянная Планка, $a = 0.246$ нм – постоянная решетки графена. Здесь и далее в качестве единичного значения для P_1, p_1, P_2, p_2 используется \hbar/a .

2. Верификация в области малых энергий

В силу того, что гамильтониан приближения MLF является результатом разложения гамильтониана ТВМ в окрестностях одной из точек Дирака (в которых энергия состояний принимает нулевое значение) с сохранением

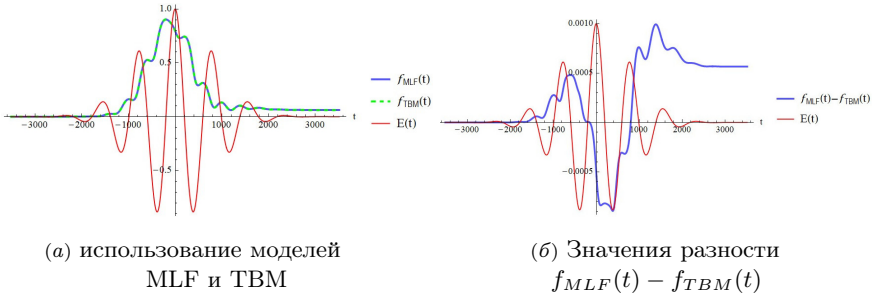
только линейных по p_1 и p_2 членов [20], результаты для версий (3), (4) и (7), (8) при моделировании ограниченных по энергии возбуждаемых состояний возмущений должны совпадать.

Энергия, которую внешняя электромагнитная волна может передать электронам материала, зависит от её частоты и амплитуды. Так, при частоте $\nu = 5 \times 10^{12}$ Гц и амплитуде электрического поля $E_0 = 3 \times 10^5$ В/м энергия генерируемых возбуждений не будет превышать примерно 2×10^{-2} эВ. Рассмотрим короткий импульс с такими параметрами, определяя его через компоненты векторного потенциала в форме

$$(9) \quad \begin{aligned} A_1(t) &= -\frac{E_0}{2\pi\nu} \sin(2\pi\nu t) \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right), \\ A_2(t) &= 0. \end{aligned}$$

Это линейно поляризованный импульс с гауссовой огибающей с длительностью τ , которую определим условием $2\pi\nu\tau = 6$.

Результаты воспроизведения поведения функции распределения для состояния с $p_1 = 0.0$, $p_2 = 2.0975$ в окрестностях точки Дирака с энергией 0.0083 эВ в условиях действия импульса внешнего поля (9) представлены на рисунке 1а. На всех графиках в статье масштабы для напряженности электрического поля $E(t)$ и единица шкалы времени условны.



(а) использование моделей
MLF и TBM

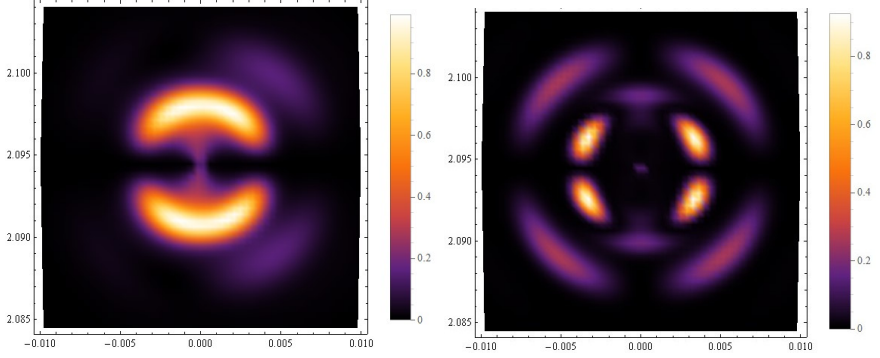
(б) Значения разности
 $f_{MLF}(t) - f_{TBM}(t)$

Рисунок 1. Результаты воспроизведения эволюции функций распределения для состояния в окрестности точки Дирака с энергией 0.0083 эВ;

Для наглядности функции распределения показаны вместе с зависящим от времени полем возмущающего импульса. В масштабе рисунка $f_{MLF}(t)$ и $f_{TBM}(t)$ совпадают на всем интервале значений времени. Однако между ними нет строгого равенства, значения и зависимость от времени разности $f_{MLF}(t) - f_{TBM}(t)$ показано на рисунке 1б. Она относительно невелика, но наблюдаема и воспроизводима при использовавшейся точности

моделирования. Так, в конечном стационарном состоянии после завершения действия поля $f_{MLF}(t_{end}) = 0.0618699$ и $f_{TBM}(t_{end}) = 0.0613054$.

Обобщенная картина $f(\vec{p})$ в двумерном импульсном пространстве (пространстве состояний) приведена на рисунке 2а для момента времени $t = 0$, когда напряженность внешнего поля максимальна, а на рисунке 2б – для момента времени t_{end} , когда действие возмущения завершено.



(а) в момент максимума внешнего поля при $t = 0$ (б) после завершения действия импульса поля

Рисунок 2. Функции распределения для области состояний $-0.01 < p_1 < 0.01, 2.084 < p_2 < 2.104$

В силу близости и визуальной неразличимости результатов для моделей MLF и TBM приведены результаты для первой модели. Различия показаны на рисунке 3.

Они малы и локализованы в окрестностях точки Дирака (центр показанной области). На этом рисунке проявляется характерное отличие TBM модели – её анизотропия. Хотя наложение симметрии распределения возбуждений в линейно поляризованном поле смазывает картину, на рисунках различимо проявление трехлучевой симметрии этой модели.

3. Выход за границы применимости приближения безмассовых фермионов

Для сравнения моделей в условиях возбуждения состояний с более высокими уровнями энергии увеличим напряженность электрического поля в десять раз до $E_0 = 3 \times 10^6$ В/м не меняя другие параметры импульса. При таких параметрах приближение безмассовых фермионов должно еще

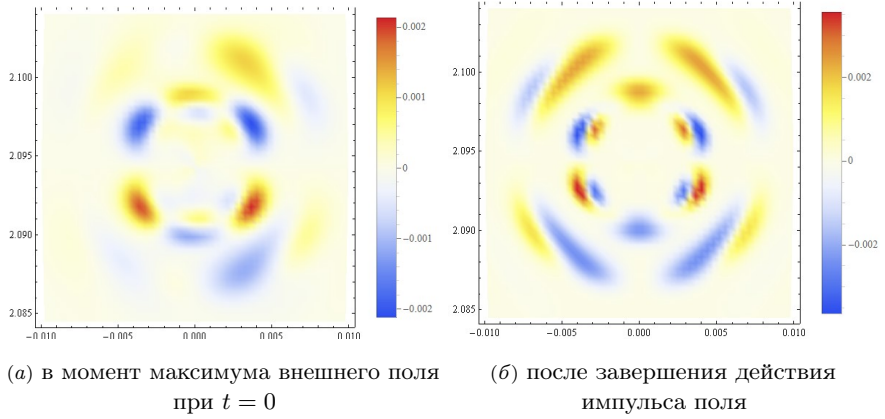


Рисунок 3. Распределение различий в результатах использования моделей $f_{MLF}(\vec{p}, t) - f_{TBM}(\vec{p}, t)$ для области состояний $-0.01 < p_1 < 0.01, 2.084 < p_2 < 2.104$

достаточно точно описывать реакцию материала. Действительно, результаты моделирования функции распределения для моментов максимума внешнего поля при $t = 0$ и после завершения действия импульса визуально не различимы.

Они представлены на рисунке 4. Показанная здесь область импульсного

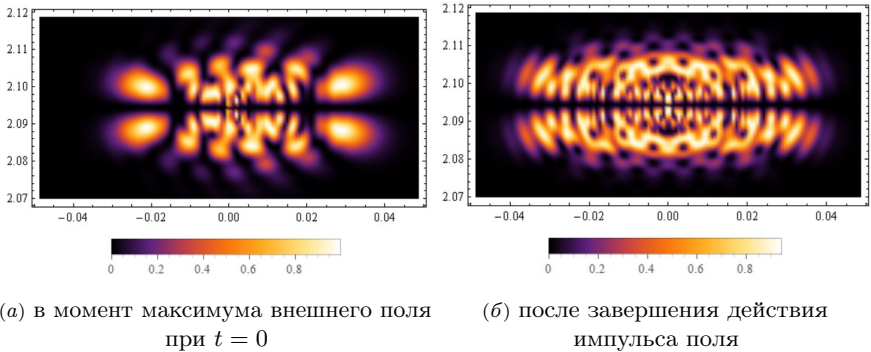
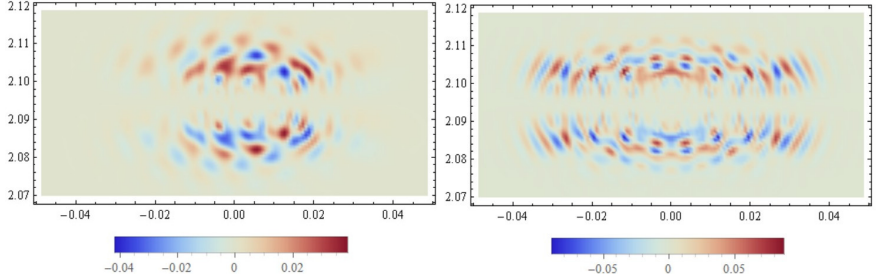


Рисунок 4. Функция распределения при $E_0 = 3 \times 10^6$ В/м для области состояний $-0.05 < p_1 < 0.05, 2.069 < p_2 < 2.119$.

пространства больше чем на рисунке 3 по вертикальной оси в 2.5 раза, а по горизонтальной оси в 5 раз. Наблюдается распространение возбуждений далее от точки Дирака, расположенной в центре. Растянutosть вдоль

горизонтальной оси соответствует направлению действия внешнего поля.

Различия результатов для рассматриваемых моделей показаны на рисунке 5.

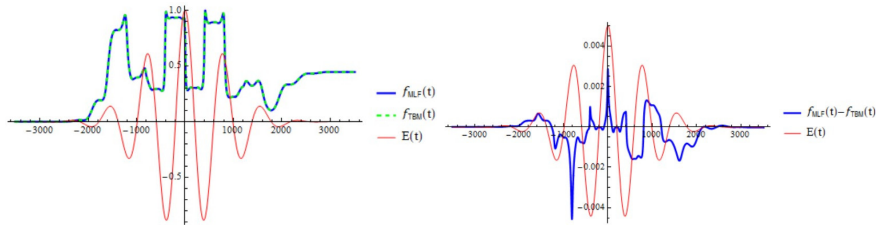


(а) в момент максимума внешнего поля при $t = 0$ (б) после завершения действия импульса поля

Рисунок 5. Распределение различий между $f_{MLF}(\vec{p}, t)$ и $f_{TBM}(\vec{p}, t)$ в окрестности точки Дирака при $E_0 = 3 \times 10^6$ В/м для области состояний $-0.05 < p_1 < 0.05$, $2.069 < p_2 < 2.119$.

Распределение разностных значений ассоциировано с распределением максимальных значений функций $f_{MLF}(\vec{p}, t)$ и $f_{TBM}(\vec{p}, t)$. При этом диапазон наблюдаемых разностных значений $f_{MLF}(\vec{p}, t) - f_{TBM}(\vec{p}, t)$ достигает почти 0.1 в то время как в предыдущем случае он не превышал 0.006. Меняется и характер поведения функций распределения во времени.

Для демонстрации этого на рисунке 6 представлены результаты для той же точки в импульсном пространстве с энергией состояния 0.0083 эВ, что и на рисунке 1.



(а) функций распределения (б) разности $f_{MLF}(t) - f_{TBM}(t)$

Рисунок 6. Поведение в окрестности точки Дирака с энергией 0.0083 эВ при $E_0 = 3 \times 10^6$ В/м

Зависимость от времени в окрестностях максимума импульса приобретает ступенчатый характер с резкими скачками значений, совпадающими по времени с максимумами напряженности поля. Увеличение амплитуды поля еще в десять раз до $E_0 = 3 \times 10^7$ В/м выводит за границы применимости модели MLF. Получающийся результат для функции распределения приведен на рисунке 7.

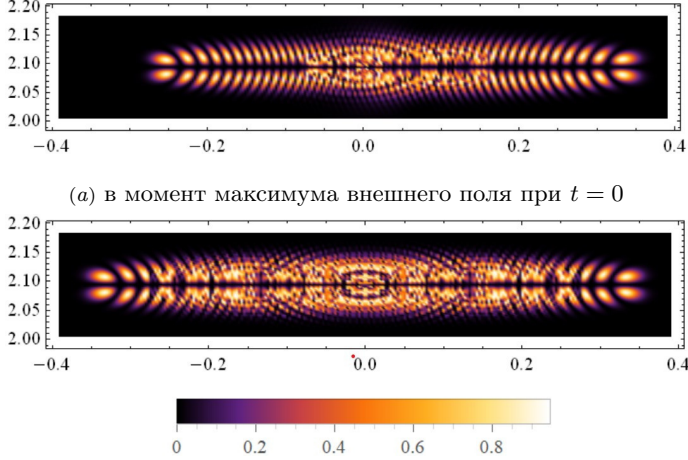
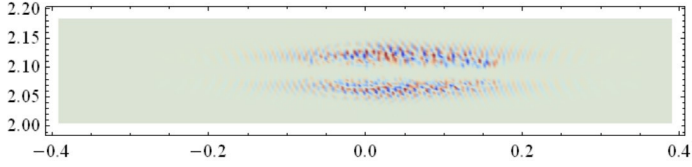


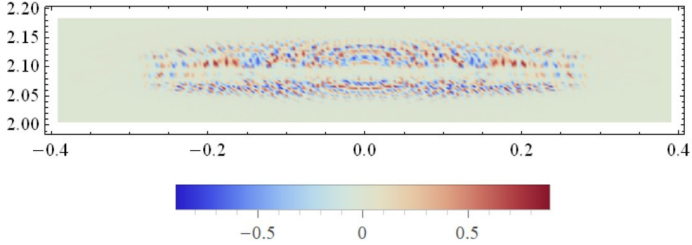
РИСУНОК 7. Функция распределения $f_{MLF}(\bar{p}, t)$ при $E_0 = 3 \times 10^7$ В/м для области состояний $-0.09 < p_1 < 0.09$, $1.869 < p_2 < 2.319$.

Теперь в процесс вовлечены состояния далекие от точки Дирака. Как и в предыдущих случаях приведены распределения только для $f_{MLF}(\bar{p}, t)$. Хотя различия между $f_{MLF}(\bar{p}, t)$ и $f_{TBM}(\bar{p}, t)$ существенны, в силу сложной структуры распределения возбужденных состояний и доминирования симметрии обусловленной направлением поля, их визуальное выявление затруднительно и приведено в форме распределения разностных значений на рисунке 8.

Теперь диапазон $-1 \lesssim f_{MLF}(\bar{p}, t) - f_{TBM}(\bar{p}, t) \lesssim 1$ охватывает все допустимые значения с учетом того, что, по определению, для фермионов $0 \leq f(\bar{p}, t) \leq 1$. Особенности поведения $f_{MLF}(\bar{p}, t)$ и $f_{TBM}(\bar{p}, t)$ во времени в условиях действия сильного внешнего поля проиллюстрированы



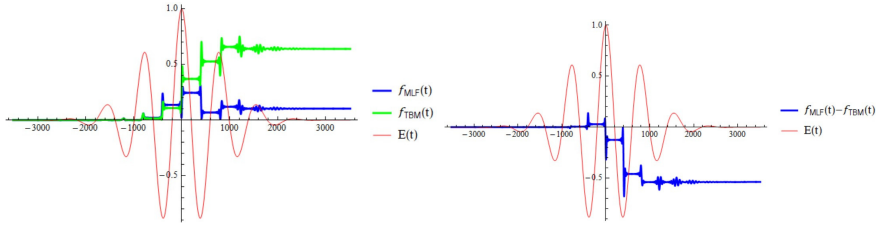
(а) в момент максимума внешнего поля при $t = 0$



(б) после завершения действия импульса поля

Рисунок 8. Распределение различий между $f_{MLF}(\bar{p}, t)$ и $f_{TBM}(\bar{p}, t)$ при $E_0 = 3 \times 10^7$ В/м для области состояний $-0.09 < p_1 < 0.09, 1.869 < p_2 < 2.319$.

на примере состояния с большой разностью конечных значений в точке $p_1 = 0.0, p_2 = 2.138$ на рисунке 9.



(а) использование моделей
MLF и TBM

(б) Значения разности
 $f_{MLF}(t) - f_{TBM}(t)$

Рисунок 9. Поведение функций распределения для состояния с $p_1 = 0.0, p_2 = 2.138$ при $E_0 = 3 \times 10^7$ В/м

Отмеченные для рисунка 6 особенности теперь проявляются более явно. Каждый текущий максимум внешнего поля вызывает осцилляции

и последующий резкий переход к новому, относительно стабильному значению. Это свидетельствует о жестком поведении системы уравнений при используемом наборе параметров.

4. Варианты реализации и требования к ресурсам

При переходе к новой модели (7), (8) необходимо оценить возможные изменения в потребных вычислительных ресурсах. Поскольку изменения заключаются только в переопределении аналитического представления коэффициентов системы уравнений (1) при прочих равных условиях время решения аналогичных задач не должно существенно измениться.

В таблице 1 приведены значения времени выполнения заданий на тестовой системе с характеристиками: процессор 11th Gen *Intel®Core®* i5-11400 @ 2.60GHz (шесть физических ядер), оперативная память 32.0 Гб.

Таблица 1. Результаты тестов на время выполнения моделирования

	тест 1	тест 2	тест 3	tes 4
Число состояний	24616	51184	67900	24616
Время для модели MLF, с.	96.895	297.85	8042.8	401.39
Время для модели TBM, с.	106.70	337.85	8970.9	447.91
Увеличение времени счета	10.12%	13.43%	11.54%	11.59%

Система функционирует под управлением ОС Windows 11 Pro. Моделирование выполнялось в версии системы, реализованной средствами Wolfram Mathematica. Обеспечивалось независимое решение системы уравнений (1) для различных состояний на шести физических ядрах процедурой *NDSolve* с установленными параметрами точности решения *AccuracyGoal* \rightarrow 10 и *PrecisionGoal* \rightarrow 10.

Физические параметры моделируемого воздействия соответствуют представлявшимся выше. Так, тест 1 выполнялся для амплитуды электрического поля $E_0 = 3 \times 10^5$ В/м, тест 2 для $E_0 = 3 \times 10^6$ В/м, тест 3 и тест 4 для $E_0 = 3 \times 10^7$ В/м. Частота во всех случаях оставалась постоянной $\nu = 5 \times 10^{12}$ Гц. Для каждого набора параметров формировалась собственная сетка состояний по процедуре, являющейся модификацией

процедуры, описанной в [17]. Поэтому число моделируемых состояний в тестах различно. Увеличение их числа коррелировано с усложнением наблюдаемой картины распределения возбужденных состояний. Последний тест выполнялся при параметрах внешнего поля, тех же что и в третьем случае, но на сетке состояний из первого теста.

Из представленных данных следует, что в рассматриваемом случае усложнение модели приводит к увеличению времени счета не более чем на 14%. Однако необходимо отметить, что на время счета влияют и физические параметры моделируемого процесса. При сравнении результатов тестов 1–3 видно, что время выполнения задания растет существенно быстрее роста количества состояний в используемой сетке. Выше, при сравнении рисунка 1, рисунка 6 и рисунка 9 на качественном уровне отмечалось усложнение поведения $f(\bar{p}, t)$ во времени. Именно это является причиной роста времени на воспроизведение поведения функции распределения в каждом состоянии при наложенных фиксированных требованиях к точности решения.

Для явной демонстрации этого факта был выполнен тест с номером 4. В нем использован тот же набор состояний, что и в тесте 1, но напряженность внешнего поля больше на два порядка. Это приводит к более чем четырехкратному росту времени счета. Причем и для старой, и для новой модели.

Высокие требования решаемой задачи к вычислительным ресурсам делают необходимым использование высокопроизводительных кластерных систем. Поэтому вычислительная процедура была реализована на языке C++ средствами библиотеки Boost с распределением воспроизведения эволюции рассматриваемых состояний по параллельным процессам средствами MPI. Влияние выбора модели на время счета для этой реализации было протестировано на примере линейно поляризованного импульса со следующим набором параметров: частота $\nu = 80 \times 10^{12}$ Гц, амплитуда электрического поля $E_0 = 1.6 \times 10^9$ В/м и $2\pi\nu t = 12$. Использовались сетки с числом состояний от 1180 до 75672. При запуске задачи с распараллеливанием на 40 процессов на вычислительном узле с двумя CPU Intel® Xeon® Gold 6338 @ 2.00GHz (32 физических ядра, гипертрейдинг), оперативная память 768.0 Гб были получены следующие результаты, представленные в таблице 2.

При запуске теста для счета 75672 состояний с распараллеливанием на 128 процессов с использованием двух нод приведенной конфигурации

Таблица 2. Результаты для кластерной реализации

Число состояний	1180	4728	18916	75672
Время для модели MLF, с.	10.108	40.702	124.53	501.86
Время для модели ТВМ, с.	11.784	50.003	156.66	616.54
Увеличение времени счета	16.58%	22.85%	25.80%	22.85%

увеличение времени счета для новой модели составило 24.18%, что близко к результатам, показанным в таблице 2.

Заключение

В работе представлены результаты тестирования модели для описания поведения графена в условиях действия на него высокочастотных электромагнитных импульсов с высокой плотностью энергии. Основой является кинетическое уравнение, обеспечивающее возможность численного воспроизведения нестационарной квантовой эволюции электронов рассматриваемой физической системы. Явный вид уравнения определен с точным учетом параметров взаимодействия ближайших соседей в кристаллической решетке материала. В отличие от использовавшегося ранее приближения безмассовых фермионов, ограниченного в применимости процессами с малой энергией возбуждаемых электронных состояний, эта модель свободна от такого ограничения и может быть использована для исследования нелинейных процессов в более широком диапазоне параметров.

Сравнительное тестирование показало совпадение результатов с приближением безмассовых фермионов в условиях, удовлетворяющих требованиям применимости обеих моделей. Если же параметры моделируемого воздействия не удовлетворяют таким требованиям, предсказываемые результаты квантовой эволюции электронных состояний становятся различны вплоть до полного несовпадения. Последнее подтверждает корректность мотивации о необходимости перехода к новой модели для получения в этих условиях правильных результатов.

Представленная модель первоначально была реализована средствами Wolfram Mathematica и протестирована в многопоточном режиме на рабочей станции. Кластерная версия реализации выполнена на C++

с использованием МРІ и библиотеки Boost. Результаты её тестирования также представлены.

Разработанные решения предоставляют новые возможности для моделирования поведения графена в условиях действия на него электромагнитного излучения высокой интенсивности.

Список использованных источников

- [1] Zhang H., Pincelli T., Jozwiak Ch., Kondo T., Ernstorfer R., Sato T., Zhou S. *Angle-resolved photoemission spectroscopy* // Nature Reviews Methods Primers.– 2022.– Vol. **2**.– id. 54.– 22 pp. doi ↑4
- [2] Mikhailov S. A. *Non-linear electromagnetic response of graphene* // Europhysics Letters.– 2007.– Vol. **79**.– id. 27002.– 5 pp. doi ↑4
- [3] Ishikawa K. L. *Nonlinear optical response of graphene in time domain* // Phys. Rev. B.– 2010.– Vol. **82**.– id. 201402. doi ↑4
- [4] Yoshikawa N. *High-harmonic generation in graphene enhanced by elliptically polarized light excitation* // Science.– 2017.– Vol. **356**.– No. 6339.– Pp. 736–738. doi ↑4
- [5] Cha S., Kim M., Kim Y., Choi Sh., Kang S., Kim H., Yoon S., Moon G., Kim T., Lee Y. W., Cho G. Y., Park M. J., Kim Ch-J., Kim B. J., Lee JD., Jo M-H., Kim J. *Gate-tunable quantum pathways of high harmonic generation in graphene* // Nature Communication.– 2022.– Vol. **13**.– id. 6630.– 10 pp. doi ↑4
- [6] Novoselo K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Katsnelson M. I., Grigorieva I. V., Dubonos S. V., Firsov A. A. *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene* // Nature.– 2005.– Vol. **438**.– Pp. 197–200. doi ↑4
- [7] Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S., Geim A. K. *The electronic properties of graphene* // Rev. Mod. Phys.– 2009.– Vol. **81**.– No. 1.– id. 109. doi ↑4
- [8] Panferov A., Smolyansky S., Blaschke D., Gevorgyan N. *Comparing two different descriptions of the I-V characteristic of graphene: theory and experiment*, XXIV International Baldin Seminar on High Energy Physics Problems “Relativistic Nuclear Physics and Quantum Chromodynamics” (Baldin ISHEPP XXIV) // EPJ Web Conf.– 2019.– Vol. **204**.– id. 06008.– 6 pp. doi ↑4, 5, 7
- [9] Smolyansky S., Panferov A., Blaschke D., Gevorgyan N. *Nonperturbative kinetic description of electron-hole excitations in graphene in a time dependent electric field of arbitrary polarization* // Particles.– 2019.– Vol. **2**.– No. 2.– Pp. 208–230. doi ↑4, 5, 7
- [10] Smolyansky S. A., Blaschke D. B., Dmitriev V. V., Panferov A. D., Gevorgyan N. T. *Kinetic equation approach to graphene in strong external fields* // Particles.– 2020.– Vol. **3**.– No. 2.– Pp. 456–476. doi ↑4, 5

- [11] Boolakee T., Heide Ch., Wagner F., Ott Ch., Schlecht M., Ristein J., Weber H., Hommelhoff P. *Length-dependence of light-induced currents in graphene* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.– 2020.– Vol. **53**.– No. 15.– id. 154001.– 5 pp. doi ↑5
- [12] Ke M., Asmar M. M., Tse W. K. *Nonequilibrium RKKY interaction in irradiated graphene* // Physical Review Research.– 2020.– Vol. **2**.– No. 3.– id. 033228. doi ↑5
- [13] Li J., Han J. E. *Nonequilibrium excitations and transport of Dirac electrons in electric-field-driven graphene* // Phys. Rev. B.– 2018.– Vol. **97**.– No. 20.– id. 205412. doi ↑5
- [14] Chen Zi-Yu., Qin R. *Circularly polarized extreme ultraviolet high harmonic generation in graphene* // Optics Express.– 2019.– Vol. **27**.– No. 3.– Pp. 3761–3770. doi ↑5
- [15] Li P., Shi R., Lin P., Ren X. *First-principles calculations of plasmon excitations in graphene, silicene, and germanene* // Phys. Rev. B.– 2023.– Vol. **107**.– No. 3.– id. 035433. doi ↑5
- [16] Панферов А. Д., Новиков Н. А., Трунов А. А. *Моделирование поведения графена во внешних электрических полях* // Программные системы: теория и приложения.– 2021.– Т. **12**.– № 1(38).– С. 3–19. URL doi ↑6
- [17] Панферов А. Д., Поснова Н. В., Ульянова А. А. *Моделирование поведения двухуровневой квантовой системы с использованием масштабируемых регулярных сеток* // Программные системы: теория и приложения.– 2023.– Т. **14**.– № 2(57).– С. 27–47. URL doi ↑6, 15
- [18] Панферов А. Д., Новиков Н. А. *Характеристики индуцированного излучения в условиях действия на графен коротких высокочастотных импульсов* // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика.– 2023.– Т. **23**.– № 3.– С. 254–264. doi ↑7
- [19] Reich S., Maultzsch J., Thomsen C., Ordejon P. *Tight-binding description of graphene* // Phys. Rev. B.– 2002.– Vol. **66**.– No. 3.– id. 035412. doi ↑7
- [20] Katsnelson M. I. *The Physics of Graphene*, 2nd ed.– Cambridge University Press.– 2020.– ISBN 9781108617567.– id. 425. doi ↑7, 8
- [21] Панферов А. Д., Щербаков И. А. *Реализация квантового кинетического уравнения для графена на основе модели сильного взаимодействия ближайших соседей* // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика.– 2024.– Т. **24**.– № 3.– С. 198–208. doi ↑7

Поступила в редакцию	01.04.2024;
одобрена после рецензирования	29.05.2024;
принята к публикации	09.08.2024;
опубликована онлайн	10.09.2024.

Рекомендовал к публикации


к.т.н. Д. В. Зубов

Информация об авторах:



Анатолий Дмитриевич Панферов

к.ф.-м.н., зам. начальника УЦИТ Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского. Научные интересы: высокопроизводительные вычисления, параллельное программирование, численное решение квантовых кинетических уравнений, моделирование процессов вакуумного рождения 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@sgu.ru



Николай Андреевич Новиков

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского. Научные интересы: моделирование физических процессов на высокопроизводительных вычислительных системах, параллельное программирование.


 0000-0003-1259-1867

e-mail: n_nik1997@mail.ru



Анастасия Алексеевна Ульянова

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского. Научные интересы: моделирование физических процессов на высокопроизводительных вычислительных системах, параллельное программирование.

 0000-0001-9519-9822

e-mail: ulyanova.nastiya@yandex.ru

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Декларация об отсутствии личной заинтересованности: благополучие авторов не зависит от результатов исследования.



Simulation the response of graphene to an external electric field using the exact tight-binding model

Anatolii Panferov¹, Nikolay Novikov², Anastasiya Ulyanova³

¹⁻³Saratov State University, Saratov, Russia

 panferovad@sgu.ru

Abstract. Numerical simulation of the interaction of electromagnetic radiation with graphene allows us to reproduce fast nonlinear processes and their observed manifestations. The paper presents the results obtained in the process of developing a software solution for calculating the observed parameters of such processes.

In graphene physics, the massless fermion approximation is classical. However, in the study of processes with high energy density, model based on this approximation are beyond the limits of their applicability and the results obtained on their basis can not be considered reliable. To solve this problem, a transition to a substantially more accurate model based on a strict account of the nearest-neighbor interaction in the crystal lattice (tight-binding model) has been made.

Comparative testing of these two models shows that at low energy characteristics of the external perturbation the results coincide. However, as the energy characteristics of the affecting electromagnetic field increase, the divergence of the results becomes apparent and grows.

The new exact model has a more complex mathematical formulation and requires more computational resources. When using the same hardware configuration it is expressed in the increase of counting time. Relative and absolute values for a number of examples are given.

The obtained results allow us to expand the range of parameters for modeling of nonlinear processes in the considered material, for example, generation of high-frequency harmonics and ensure its reliability. (*In Russian*).

Key words and phrases: numerical simulation, nonlinear processes, quantum kinetic equation, tight-binding model









2020 *Mathematics Subject Classification:* 65Z05; 81-04; 81T40

Acknowledgments: The study was supported by the Russian Science Foundation grant No. 23-21-00047, <https://rscf.ru/project/23-21-00047/>

For citation: Anatolii Panferov, Nikolay Novikov, Anastasiya Ulyanova. *Simulation the response of graphene to an external electric field using the exact tight-binding model*. Program Systems: Theory and Applications, 2024, **15**:3(62), pp. 3–22. (*In Russ.*). https://psta.psiras.ru/read/psta2024_3_3-22.pdf

References

- [1] H. Zhang, T. Pincelli, Ch. Jozwiak, T. Kondo, R. Ernstorfer, T. Sato, S. Zhou. “Angle-resolved photoemission spectroscopy”, *Nature Reviews Methods Primers*, **2** (2022), id. 54, 22 pp. [doi](#)
- [2] S. A. Mikhailov. “Non-linear electromagnetic response of graphene”, *Europhysics Letters*, **79** (2007), id. 27002, 5 pp. [doi](#)
- [3] K. L. Ishikawa. “Nonlinear optical response of graphene in time domain”, *Phys. Rev. B*, **82** (2010), id. 201402. [doi](#)
- [4] N. Yoshikawa. “High-harmonic generation in graphene enhanced by elliptically polarized light excitation”, *Science*, **356**:6339 (2017), pp. 736–738. [doi](#)
- [5] S. Cha, M. Kim, Y. Kim, Sh. Choi, S. Kang, H. Kim, S. Yoon, G. Moon, T. Kim, Y. W. Lee, G. Y. Cho, M. J. Park, Ch-J. Kim, B. J. Kim, J.D. Lee, M-H. Jo, J. Kim. “Gate-tunable quantum pathways of high harmonic generation in graphene”, *Nature Communication*, **13** (2022), id. 6630, 10 pp. [doi](#)
- [6] K. S. Novoselo, 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](#)
- [7] Castro Neto A. H., F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim. “The electronic properties of graphene”, *Rev. Mod. Phys.*, **81**:1 (2009), id. 109. [doi](#)
- [8] A. Panferov, S. Smolyansky, D. Blaschke, N. Gevorgyan. “Comparing two different descriptions of the I-V characteristic of graphene: theory and experiment”, XXIV International Baldin Seminar on High Energy Physics Problems “Relativistic Nuclear Physics and Quantum Chromodynamics” (Baldin ISHEPP XXIV), *EPJ Web Conf.*, **204** (2019), id. 06008, 6 pp. [doi](#)
- [9] S. Smolyansky, A. Panferov, D. Blaschke, N. 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. [doi](#)
- [10] S. A. Smolyansky, D. B. Blaschke, V. V. Dmitriev, A. D. Panferov, N. T. Gevorgyan. “Kinetic equation approach to graphene in strong external fields”, *Particles*, **3**:2 (2020), pp. 456–476. [doi](#)
- [11] T. Boolakee, Ch. Heide, F. Wagner, Ch. Ott, M. Schlecht, J. Ristein, H. Weber, P. Hommelhoff. “Length-dependence of light-induced currents in graphene”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **53**:15 (2020), id. 154001, 5 pp. [doi](#)
- [12] M. Ke, M. M. Asmar, W. K. Tse. “Nonequilibrium RKKY interaction in irradiated graphene”, *Physical Review Research*, **2**:3 (2020), id. 033228. [doi](#)
- [13] J. Li, J. E. Han. “Nonequilibrium excitations and transport of Dirac electrons in electric-field-driven graphene”, *Phys. Rev. B*, **97**:20 (2018), id. 205412. [doi](#)
- [14] Zi-Yu. Chen, R. Qin. “Circularly polarized extreme ultraviolet high harmonic generation in graphene”, *Optics Express*, **27**:3 (2019), pp. 3761–3770. [doi](#)
- [15] P. Li, R. Shi, P. Lin, X. Ren. “First-principles calculations of plasmon excitations in graphene, silicene, and germanene”, *Phys. Rev. B*, **107**:3 (2023), id. 035433. [doi](#)

- [16] A. D. Panferov, N. A. Novikov, A. A. Trunov. “Simulate the behavior of graphene in external electric fields”, *Program Systems: Theory and Applications*, **12**:1(48) (2021), pp. 3–19 (in Russian).  
- [17] A. D. Panferov, N. V. Posnova, A. A. Ulyanova. “Simulation the behavior of a two-level quantum system using scalable regular grids”, *Program Systems: Theory and Applications*, **14**:2(57) (2023), pp. 27–47 (in Russian).  
- [18] A. D. Panferov, N. A. Novikov. “Characteristics of induced radiation under the action of short high-frequency pulses on graphene”, *Izv. Sarat. Univ. Physics*, **23**:3 (2023), pp. 254–264 (in Russian).  
- [19] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, P. Ordejon. “Tight-binding description of graphene”, *Phys. Rev. B*, **66**:3 (2002), id. 035412. 
- [20] M. I. Katsnelson. *The Physics of Graphene*, 2nd ed., Cambridge University Press, 2020, ISBN 9781108617567, id. 425. 
- [21] A. D. Panferov, I. A. Scherbakov. “Tight-binding implementation of the quantum kinetic equation for graphene”, *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2024, no. 3, pp. 198–208. 