



УДК 501.1

Моделирование динамики безмассовых носителей заряда в двумерной системе

С. А. Левенец, Т. Т. Веревин, А. В. Маханьков,
А. Д. Панферов, С. О. Пирогов

Левенец Сергей Алексеевич, магистрант кафедры теоретической физики, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, 79172123703@yandex.ru

Веревин Тимофей Тимофеевич, магистрант кафедры дискретной математики и информационных технологий, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, t.ver.bk.ru@mail.ru

Маханьков Алексей Владимирович, аспирант кафедры математического обеспечения вычислительных комплексов и информационных систем, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, mahankov@sgu.ru

Панферов Анатолий Дмитриевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры дискретной математики и информационных технологий, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, panferovad@info.sgu.ru

Пирогов Станислав Олегович, магистрант кафедры теоретической физики, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, finalspectrum@yandex.ru

В работе излагаются результаты, полученные при разработке системы моделирования процессов генерации внешним электрическим полем безмассовых носителей заряда с фотоподобным спектром для двумерных сред. Основой системы является физическая модель процесса, построенная в формализме кинетического уравнения для адекватной квантово-полевой теории. При этом не используются упрощающие предположения, в том числе разложения по каким-либо малым параметрам (теория возмущений). В этом смысле используемая модель является точной. Она оформлена в виде системы ОДУ первого порядка, для которой ставится задача Коши. Основной проблемой является вычислительная сложность определения наблюдаемых величин по характеристикам модели. Непосредственно решение системы ОДУ дает информацию только о вероятности заселения некоторого конкретного конечного состояния на двумерном континууме потенциально допустимых импульсных состояний. Область локализации заселяемых состояний, гладкость их распределения в импульсном пространстве, а следовательно, размеры и плотность необходимой сетки заранее не известны. Эти параметры зависят от характеристик внешнего поля и являются предметом определения в процессе моделирования. Вычислительная сложность собственно решения модельной системы уравнений для заданной точки импульсного пространства тоже представляет собой открытую проблему. В представленном случае такая задача всегда решается на одном вычислительном ядре. Но необходимое для этого время зависит как от характеристик вычислителя, так и от типа, вида и реализации метода интегрирования. Оптимальный их выбор, как продемонстрировано далее, очень существенно влияет на ресурсы, необходимые для решения всей задачи. При этом из-за большой вариативности характера поведения системы уравнений при изменении физических параметров модели оптимизация выбора



методов интегрирования не является глобальной. К этому вопросу приходится возвращаться при каждом существенном изменении параметров исследуемой модели.

Ключевые слова: численное моделирование, высокопроизводительные вычисления, кинетическое уравнение, графен.

Поступила в редакцию: 04.12.2018 / Принята: 06.09.2019 / Опубликовано: 02.03.2020

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0)

DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2020-20-1-127-137>

ВВЕДЕНИЕ

В связи с потребностью радиоэлектроники в новых материалах с перспективными характеристиками одним из направлений поиска является исследование (псевдо) двумерных систем, реализуемых в виде моноатомных или мономолекулярных слоев на подложках или в свободном состоянии. Одним из представителей таких перспективных материалов является графен [1–3]. Для него характерна очень высокая эффективная скорость носителей заряда и специфический (фотоноподобный) закон дисперсии, устанавливающий связь энергии и импульса носителей [4–6].

1. МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ НОСИТЕЛЕЙ

Для оценки практических аспектов использования новых материалов необходимо уметь определять их отклик на действие внешних электромагнитных полей. Настоящая работа представляет первые результаты разработки вычислительной процедуры определения функциональной связи параметров внешнего воздействия и отклика материала на максимально достоверной физической основе. Базой для решения задачи является кинетическое уравнение для функции распределения носителей $f(\bar{p}, t)$. В рамках двумерной адаптации квантовой электродинамики оно может быть получено строго, без использования теории возмущений [7]. При численном исследовании его удобнее представить в форме системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{f}(\bar{p}, t) &= \frac{1}{2}\lambda(\bar{p}, t)u(\bar{p}, t), \\ \dot{u}(\bar{p}, t) &= \lambda(\bar{p}, t)(1 - 2f(\bar{p}, t)) - 2\varepsilon(\bar{p}, t)v(\bar{p}, t), \\ \dot{v}(\bar{p}, t) &= 2\varepsilon(\bar{p}, t)u(\bar{p}, t), \end{aligned} \quad (1)$$

где $\varepsilon(\bar{p}, t) = v_F\sqrt{P_1^2 + P_2^2}$ является законом дисперсии носителей в присутствии внешнего поля (v_F — скорость Ферми, $P_i = p_i - eA_i$ — кинематический импульс, A_i — векторный потенциал действующего поля, e — электрический заряд квазичастиц). Коэффициент

$$\lambda(\bar{p}, t) = ev_F^2 \frac{E_1 P_2 - E_2 P_1}{2\varepsilon^2(\bar{p}, t)} \quad (2)$$

определяется через параметры электрического поля и координаты в импульсном пространстве.

Универсальность модели ограничивается только предположением о пространственной однородности электрического поля и относительно небольшими энергиями возбуждений, поскольку реальная форма зависимости $\varepsilon(\bar{p}, t)$ от \bar{p} перестает соответствовать приведенному выражению вдали от точек Дирака импульсного



пространства [8]. В рамках этих ограничений система (1) позволяет детально исследовать характеристики функции распределения носителей заряда во внешнем электрическом поле с произвольной зависимостью от времени. В свою очередь, наличие полной информации о $f(\vec{p}, t)$ позволяет вычислять любые наблюдаемые макроскопические характеристики модели.

2. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛИ

Основная трудность в использовании (1) связана с вычислительной сложностью задачи, решаемой только численно. При этом каждую точку двумерного импульсного пространства характеризует уникальное поведение коэффициентов уравнения во времени. Для получения достоверной и полной информации о поведении функции распределения в импульсном пространстве необходимо достаточно представительный набор решений, состав которого заранее не известен. Положительным моментом является возможность решать систему уравнений в каждой исследуемой точке импульсного пространства независимо. В этом смысле задача хорошо распараллеливается. По многим причинам представляется удобным задавать параметры моделируемой системы, выполнять промежуточные вычисления и хранить полученные данные с использованием специальной, «естественной» для рассматриваемой проблемы, системы единиц измерения физических величин. В качестве базы для такой системы будем использовать:

- постоянную решетки графена, обычно обозначаемую a и имеющую значение $0.246 \text{ нм} = 2.46 \times 10^{-10} \text{ м}$ (единица длины);
- скорость Ферми $v_F = 10^6 \text{ м/с}$;
- постоянную Планка (приведенную) $\hbar = 1.0546 \times 10^{-34} \text{ кг м}^2/\text{с}$;
- элементарный заряд $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ с}$.

В используемой системе все эти величины имеют единичные значения. В частности, это обеспечит близость (по порядку значений) используемых в промежуточных вычислениях величин.

На первом этапе решение системы (1) для набора контрольных точек было реализовано средствами CAS Mathematica [9]. Это позволило быстро получить оценки ресурсоемкости задачи в идеальных условиях автоматической оптимизации процедуры решения системы ОДУ средствами этого пакета и набор эталонных значений искомой функции распределения для последующего использования.

На втором этапе разработана программа для вычислительного кластера, обеспечивающая параллельное решение системы кинетических уравнений (1) для произвольного количества наборов параметров. Программа реализована на языке C с использованием интерфейса передачи сообщений MPI [10, 11] и функционала свободной библиотеки GSL [12, 13]. Выбор GSL обусловлен наличием в ней объектов различного уровня для удобной организации процедуры решения задачи Коши для системы ОДУ и поддержкой разнообразных методов численного решения такой задачи. В библиотеке реализованы пять модификаций явного и три модификации неявного методов Рунге – Кутты, специальные возможности предлагаются для решения жестких систем.

3. ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОГРАММЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Моделирующая программа позволяет воспроизводить отклик исследуемой системы на действие суперпозиции импульсов электрического поля $E_1(t)$ и $E_2(t)$. Это позволяет моделировать большой диапазон реалистических конфигураций поля. В отличие от развивавшихся ранее методов моделирования процессов рождения элек-



трон-позитронных пар в экстремально сильных электрических полях [14–16], в рассматриваемом случае электрическое поле может менять с течением времени не только свою абсолютную величину, но и направление.

Оценка работоспособности программы и оптимизация ее настроек проводились на примере максимально упрощенного однополярного импульса электрического поля вида

$$E_1(t) = \frac{E_{10}}{\cosh^2(t/T_1)}, \quad E_2(t) = 0. \quad (3)$$

После первоначальной отладки и верификации результатов счета было исследовано влияние выбора метода интегрирования на скорость работы программы. Сравнение проводилось по времени вычисления остаточных значений функции распределения $f(\bar{p}, t \rightarrow \infty)$ для матрицы 10×10 точек импульсного пространства. Использовались следующие значения параметров поля (3): $E_{10} = 10^5$ В/м, $T_1 = 2.46 \times 10^{-14}$ с. Для минимизации влияния затрат времени на обмены данными вычисления выполнялись на десяти ядрах одного узла. Функции библиотеки GSL используют формат с плавающей запятой двойной точности и позволяют задавать относительную и абсолютную погрешность вычислений. Приведенные в табл. 1 значения времени решения задачи получены при значении последних параметров 1.0×10^{-14} .

Таблица 1 / Table 1

Зависимость времени решения задачи от выбора метода интегрирования
The dependence of time of the problem solution on the choice of the integration method

№	Метод интегрирования (по документации GSL) Integration Method (GSL documentation)	Время решения задачи (мс) Problem solving time (μ s)
1	Explicit embedded Runge – Kutta (2, 3)	5815
2	Explicit 4th order (classical) Runge – Kutta	290
3	Explicit embedded Runge – Kutta – Fehlberg (4, 5)	135
4	Explicit embedded Runge – Kutta Cash – Karp (4, 5)	136
5	Explicit embedded Runge – Kutta Prince – Dormand (8, 9)	57
6	Implicit Gaussian second order Runge – Kutta	23 853
7	Implicit Gaussian 4th order Runge – Kutta	647
8	A variable-coefficient linear multistep Adams method in Nordsieck form	84
9	A variable-coefficient linear multistep backward differentiation formula	177

Представленные результаты численных экспериментов демонстрируют возможность успешного использования явных методов. Абсолютным лидером является решатель на основе «explicit embedded Runge – Kutta Prince – Dormand (8, 9)» метода, обеспечивая более чем пятикратный выигрыш по времени у классического метода Рунге – Кутты четвертого порядка. Неявные методы также применимы, хотя для их использования потребовалось обеспечить возможность вычисления Якобиана системы (1). Они проигрывают по времени, но могут использоваться для контроля точности результатов в связи с их большей устойчивостью. Отметим, что преимущество явных методов в рассматриваемом случае принципиально отличается от их роли при решении аналога (1) для стандартной квантовой электродинамики (КЭД), например [17]. Это обусловлено тем, что в случае КЭД система кинетических уравнений обычно ведет себя жестко и явные методы могут быть вообще не



применимы. Различия в жесткости системы кинетических уравнений в КЭД и (1) связаны с различиями в свойствах носителей зарядов в этих двух случаях. Вопрос о возможности проявления жесткости в рассматриваемом случае требует дополнительного исследования. В случае если жесткое поведение будет обнаружено, удобнее использовать решатель на основе метода Адамса.

На следующем этапе оптимизировались настройки точности. В табл. 2 приведены результаты выполнения тестов на скорость счета для тестовой задачи. Приведенные значения функции распределения соответствуют одной точке из считавшейся матрицы. Конечно, требуемая точность результатов во многом будет определяться целями моделирования. Но даже при заданной, явно завышенной, точности представления результатов использование менее жестких требований к погрешностям вычислений может обеспечить 2–3-кратную экономию времени.

Таблица 2 / Table 2

Зависимость времени решения задачи и результатов от погрешностей интегрирования для методов 5 и 8 из табл. 1

The time of dependence of the problem solution and the results of the integration errors for methods 5 and 8 from Table 1

Задаваемые погрешности (абс. и отн.) Set errors (abs. and rel.)	Время решения (мкс) Solution time (μ s)		Значение / Value	
	метод 5 method 5	метод 8 method 8	метод 5 method 5	метод 8 method 8
10e-6	15 378	16 679	0.94855704072	0.97524534512
10e-8	20 718	28 074	0.97525691165	0.97525695955
10e-10	27 296	40 725	0.97525691167	0.97525690930
10e-12	45 247	53 919	0.97525691167	0.97525691167
10e-14	58 625	80 339	0.97525691167	0.97525691167
10e-16	94 744	110 887	0.97525691167	0.97525691167
10e-18	481 768	154 258	0.97525691167	0.97525691167

Для оценки поведения программы моделирования при масштабировании задачи было проведено сравнение результатов работы на тестовых сетках различной плотности. Сохраняя параметры и область моделирования в импульсном пространстве неизменными, в дополнение к исходному варианту 10×10 были выполнены расчеты для сеток 10×100 и 100×100 с использованием метода 5 из табл. 1. Для оценки влияния процессов обмена данными в многонодовых конфигурациях кластера проведено сравнение времени решения задачи на одной ноде (10 вычислительных ядер) и на двух нодах с таким же суммарным числом ядер (2 ноды по 5 ядер). Результаты представлены в табл. 3.

Из их анализа и сравнения с данными, представленными в табл. 2, можно сделать вывод о практически линейной зависимости времени счета от количества точек сетки, на которой выполняется моделирование. Переход к многонодовым конфигурациям сказывается на времени моделирования. Но увеличение времени счета незначительно.

В качестве демонстрации на рис. 1 представлены результаты расчета конечного вида функции распределения после воздействия импульса электрического поля вида (3). Параметры поля соответствуют значениям, использовавшимся для тестирования программы. На рисунке представлена квадратная область импульсного пространства



в диапазоне значений $1.0 \times 10^{-4} \leq p_1 \leq 5.0 \times 10^{-4}$, $1.0 \times 10^{-4} \leq p_2 \leq 5.0 \times 10^{-4}$. Значения приведены в единицах $\hbar/a = 4.289 \times 10^{-25}$ кг м/с.

Таблица 3 / Table 3

Результаты тестирования масштабируемости задачи
Results of testing of the task scalability

Задаваемые погрешности (абс. и отн.) Set errors (abs. and rel.)	Время для сетки 10×100 (мкс) Time for the grid 10×100 (μs)		Время для сетки 100×100 (мкс) Time for the grid 100×100 (μs)	
	одна нода one node	две ноды two node	одна нода one node	две ноды two node
	10e-6	126 184	162 657	1 164 969
10e-8	175 180	195 095	1 517 363	1 669 305
10e-10	250 783	260 707	2 129 171	2 619 711
10e-12	344 800	396 212	3 158 579	3 459 483
10e-14	580 914	608 269	4 764 188	5 345 023
10e-16	906 610	970 593	7 621 487	8 342 612
10e-18	4 433 375	4 863 168	42 357 249	46 519 604

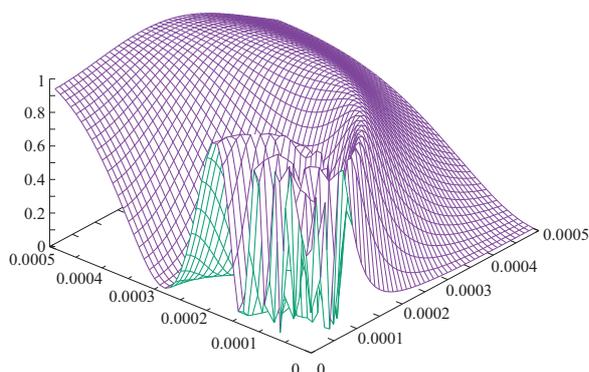


Рис. 1. Вид функции распределения носителей $f(p_1, p_2, t \rightarrow \infty)$ при тестовых параметрах поля

Fig. 1. The form of the distribution function of carriers $f(p_1, p_2, t \rightarrow \infty)$ under test field parameters

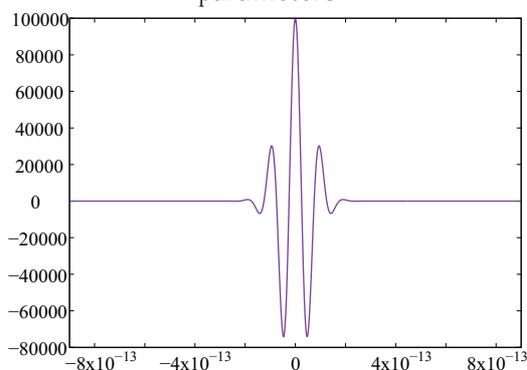


Рис. 2. Вид электрического поля с реалистичной зависимостью от времени

Fig. 2. The electric field with a realistic time dependence

Для построения этого детализированного изображения потребовалась матрица размером 250×250 . С учетом выполненной оптимизации даже на тестовой конфигурации из 10 ядер на одной ноде для такого моделирования достаточно примерно полминуты.

4. ВЫСОКОЧАСТОТНЫЙ ИМПУЛЬС

Для оценки характеристик программы при исследовании электрических полей с реалистичными зависимостями от времени было выполнено моделирование действия поля вида (рис. 2):

$$E_1(t) = E_{10} \cos(\omega t) \exp(-t^2/2\tau^2), \quad (4)$$

$$E_2(t) = 0.$$

Такое поле представляет максимально упрощенный пример импульса, формируемого в радиочастотных устройствах или лазерных системах. Оно характеризуется циклической частотой несущей ω и шириной, определяемой параметром τ . Для наглядного представления относительной ширины импульса принято использовать характеристику $\sigma = \omega\tau$, которую условно можно интерпретировать как количество волн несущей в импульсе.



Серия численных экспериментов была выполнена для набора параметров $E_{10} = 10^5$ В/м, $\omega = 2\pi \times 10^{13}$ Гц и $\sigma = 5$. Параметры соответствуют короткому импульсу терагерцового диапазона (10 ТГц).

Напряженность поля в рассматриваемой ситуации та же, что и в модельном варианте с однополярным импульсом. Но если в предыдущем случае моделировались события на интервале времени в 5.904×10^{-13} с, то теперь общая продолжительность моделируемого процесса $\approx 2.0 \times 10^{-12}$ с и зависимость напряженности поля от времени более сложная. Отражение этого представлено в табл. 4, которая является аналогом табл. 1.

Таблица 4 / Table 4

Зависимость времени решения задачи 4 от выбора метода интегрирования
The dependence of time of the problem 4 solution on the choice of the integration method

№	Метод интегрирования (по документации GSL) Integration Method (GSL documentation)	Время решения задачи (мс) Problem solving time (μ s)
1	Explicit embedded Runge – Kutta (2, 3)	13 827
2	Explicit 4th order (classical) Runge – Kutta	1370
3	Explicit embedded Runge – Kutta – Fehlberg (4, 5)	803
4	Explicit embedded Runge – Kutta Cash – Karp (4, 5)	640
5	Explicit embedded Runge – Kutta Prince – Dormand (8, 9)	188
6	Implicit Gaussian second order Runge – Kutta	59 645
7	Implicit Gaussian 4th order Runge – Kutta	53 667
8	A variable-coefficient linear multistep Adams method in Nordsieck form	1273
9	A variable-coefficient linear multistep backward differentiation formula	9927

Как и в первом случае, лучшие результаты показал «explicit embedded Runge – Kutta Prince – Dormand (8, 9)» метод. Отметим, что поведение всех явных методов стабильно. Рост времени решения задачи в этой группе примерно сопоставим. А вот неявные и многошаговые методы существенно ухудшили результаты. Если в случае однополярного импульса (3) метод «variable-coefficient linear multistep Adams in Nordsieck form» показывал время счета, почти сопоставимое с результатом лидера, то для поля (4) его результат хуже почти в семь раз.

Полученные оценки позволяют рассчитывать на успешное моделирование воздействия радиоимпульса терагерцового диапазона на слой графена. Для количественного описания происходящих процессов, однако, необходимы достаточно плотные сетки.

В табл. 5 представлены значения времени, потребовавшегося на решение этой задачи на различных конфигурациях нод и ядер. На рис. 3 представлены результаты для сеток 5×5 , 20×20 и 100×100 . В последнем случае общее процессорное время, потребовавшееся на решение задачи, составило 20 с при использовании оптимального метода.

Максимальное ускорение в 30 раз получено на конфигурации 2 ноды по 20 ядер. При этом была достигнута эффективность работы параллельной программы в 72.7%.



Таблица 5 / Table 5

Результаты тестирования масштабируемости задачи (время для сетки 250×250 (мс))

Results of testing of the task scalability (time for grid 250×250 (μ s))

Задаваемые погрешности (абс. и отн.) / Set errors (abs. and rel.)	1 нода, 1 ядро / 1 node, 1 kernel	1 нода, 8 ядер / 1 node, 8 kernels	2 ноды по 8 ядер / 2 nodes, 8 kernels	1 нода, 20 ядер / 1 node, 20 kernels	2 ноды по 20 ядер / 2 node, 20 kernels
10e-14	589 503	83 595	41 984	38 458	20 247

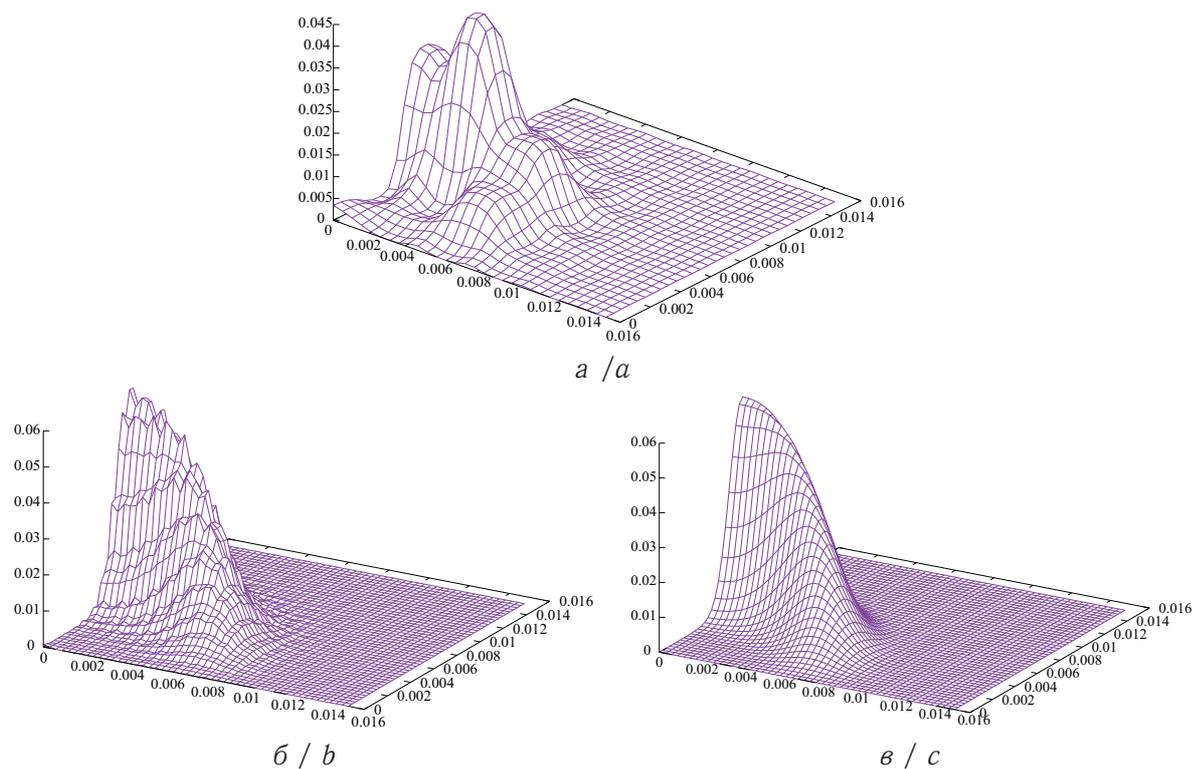


Рис. 3. Вид функции распределения носителей $f(p_1, p_2, f \rightarrow \infty)$ для поля 4: а — сетка 5×5 ; б — сетка 20×20 ; в — сетка 100×100

Fig. 3. The distribution function $f(p_1, p_2, f \rightarrow \infty)$ for field 4: a is grid 5×5 ; b is grid 20×20 ; c is grid 100×100

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены результаты разработки вычислительного ядра программы для моделирования процессов генерации носителей в монослое графена на основе кинетического описания его поведения во внешнем электрическом поле. Промонстрированы этапы ее оптимизации для модельной задачи и возможности использования для реалистической полевой модели высокочастотного радиоимпульса терагерцового диапазона.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-07-00778).

Библиографический список

1. Novoselov K. S., Fal'ko V. I., Colombo L., Gellert P. R., Schwab M. G., Kim K. A roadmap for graphene // Nature. 2012. Vol. 490. P. 192–200. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature11458>



2. Lee C., Wei X., Kysar J. W., Hone J. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // *Science*. 2008. Vol. 321, iss. 5887. P. 385–388. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1157996>
3. Ang Y. S., Chen Q., Zhang C. Nonlinear optical response of graphene in terahertz and near-infrared frequency regime // *Front. Optoelectron*. 2015. Vol. 8, iss. 1. P. 3–26. DOI : <https://doi.org/10.1007/s12200-014-0428-0>
4. Vandecasteele N., Barreiro A., Lazzeri M., Bachtold A., Mauri F. Current-voltage characteristics of graphene devices: Interplay between Zener – Klein tunneling and defects // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 82, iss. 4. P. 045416. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.045416>
5. Kane G., Lazzeri M., Mauri F. J. High-field transport in graphene: The impact of Zener tunneling // *Journal of Physics : Condensed Matter*. 2015. Vol. 27, № 16. P. 164205. DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/16/164205>
6. Dora B., Moessner R. Nonlinear electric transport in graphene: Quantum quench dynamics and the Schwinger mechanism // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 81, iss. 16. P. 165431. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.165431>
7. Smolyansky S. A., Churochkin D. V., Dmitriev V. V., Panferov A. D., Kämpfer B. Residual currents generated from vacuum by an electric field pulse in 2+1 dimensional QED models // *EPJ Web Conf*. 2017. Vol. 138. XXIII International Baldin Seminar on High Energy Physics Problems Relativistic Nuclear Physics and Quantum Chromodynamics (Baldin ISHEPP XXIII). Art. 06004. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201713806004>
8. Wallace P. R. The Band Theory of Graphite // *Phys. Rev.* 1947. Vol. 71, iss. 9. P. 622–634. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>
9. Wolfram Mathematica : [сайт]. URL: <http://www.wolfram.com/mathematica/> (дата обращения: 18.04.2018).
10. MPI Forum. URL: <https://www.mpi-forum.org/> (дата обращения: 18.04.2018).
11. MPICH. URL: <https://www.mpich.org/about/overview/> (дата обращения: 18.04.2018).
12. GSL — GNU Scientific Library. URL: <https://www.gnu.org/software/gsl/> (дата обращения: 18.04.2018).
13. Browne S., Dongarra J., Trefethen A. Numerical Libraries and Tools for Scalable Parallel Cluster Computing. URL: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.438.4231&rep=rep1&type=pdf> (дата обращения: 18.04.2018).
14. Narozhnyi N. B., Nikishov A. I. Simplest processes in the pair-creating electric field // *Yad. Fiz.* 1970. Vol. 11. P. 1072. [*Sov. J. Nucl. Phys.* 1970. Vol. 11, pp. 596].
15. Hebenstreit F., Alkofer R., Dunne G. V., Gies H. Momentum signatures for Schwinger pair production in short laser pulses with sub-cycle structure // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102, iss. 15. P. 150404. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.150404>
16. Blaschke D., Juchnowski L., Panferov A., Smolyansky S. Dynamical Schwinger effect: Properties of the e^-e^+ plasma created from vacuum in strong laser fields // *Phys. Part. Nuclei*. 2015. Vol. 46, iss. 5. P. 797–800. DOI: <https://doi.org/10.1134/S106377961505010X>
17. Колеконов С. В., Панферов А. Д., Смолянский С. А. Исследование тонкой структуры функции распределения электрон-позитронных пар при динамическом эффекте Швингера // *Компьютерные науки и информационные технологии : материалы междунар. науч. конф. Саратов : Изд-во Саратов. ун-та, 2014. С. 157–160.*

Образец для цитирования:

Левенец С. А., Веревин Т. Т., Маханьков А. В., Панферов А. Д., Пирогов С. О. Моделирование динамики безмассовых носителей заряда в двумерной системе // *Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Математика. Механика. Информатика*. 2020. Т. 20, вып. 1. С. 127–137. DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2020-20-1-127-137>



Modeling the Dynamics of Massless Charge Carriers in a Two-Dimensional System

S. A. Levenets, T. T. Verevin, A. V. Makhankov, A. D. Panferov, S. O. Pirogov

Sergey A. Levenets, <https://orcid.org/0000-0002-6461-5624>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia, 79172123703@yandex.ru

Timofey T. Verevin, <https://orcid.org/0000-0003-2856-6666>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia, t.ver.bk.ru@mail.ru

Aleksey V. Makhankov, <https://orcid.org/0000-0002-9848-9734>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia, mahankov@sgu.ru

Anatolii D. Panferov, <https://orcid.org/0000-0003-2332-0982>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia, panferovad@info.sgu.ru

Stanislav O. Pirogov, <https://orcid.org/0000-0001-9131-7641>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia, finalspectrum@yandex.ru

The paper presents the results obtained in the process of developing a system for simulating the generation of massless charge carriers with a photon-like spectrum by an external electric field for two-dimensional media. The basis of the system is a physical model of the process, built in the formalism of a kinetic equation for an adequate quantum-field theory. It does not use simplifying assumptions, including expansions in some small parameters (perturbation theory). In this sense, the model used is accurate. It is designed as a first-order ODE system for which the Cauchy problem is formulated. The main problem is the computational complexity of determining the observed values from the characteristics of the model. Directly solving the ODE system provides information only about the probability of a certain specific final state being occupied on a two-dimensional continuum of potentially admissible impulse states. The region of localization of the occupied states, the smoothness of their distribution in the momentum space, and, consequently, the size and density of the required mesh, are not known in advance. These parameters depend on the characteristics of the external field and are themselves a matter of definition in the modeling process. The computational complexity of the actual solution of the model system of equations for a given point in the momentum space is also an open problem. In the present case, such a problem is always solved on a single computational core. But the time required for this depends both on the characteristics of the calculator and on the type, type and implementation of the integration method. Their optimal choice, as demonstrated below, has a very significant effect on the resources needed to solve the entire problem. At the same time, due to the large variation in the nature of the behavior of the equations system when the physical parameters of the model change, the choice optimization of the integration methods is not global. This question has to be returned with each significant change in the parameters of the model under study.

Keywords: numerical modeling, high-performance computing, kinetic equation, graphene.

Received: 04.12.2018 / Accepted: 06.09.2019 / Published: 02.03.2020

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0)

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (projects No. 18-07-00778).

References

1. Novoselov K. S., Fal'ko V. I., Colombo L., Gellert P. R., Schwab M. G., Kim K. A roadmap for graphene. *Nature*, 2012, vol. 490, pp. 192–200. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature11458>



2. Lee C., Wei X., Kysar J. W. Hone J. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, 2008, vol. 321, iss. 5887, pp. 385–388. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1157996>
3. Ang Y. S., Chen Q., Zhang C. Nonlinear optical response of graphene in terahertz and near-infrared frequency regime. *Front. Optoelectron*, 2015, vol. 8, iss. 1, pp. 3–26. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12200-014-0428-0>
4. Vandecasteele N., Barreiro A., Lazzeri M., Bachtold A., Mauri F. Current-voltage characteristics of graphene devices: Interplay between Zener–Klein tunneling and defects. *Phys. Rev. B*, 2010, vol. 82, iss. 4, pp. 045416. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.045416>
5. Kane G., Lazzeri M., Mauri F. J. High-field transport in graphene: The impact of Zener tunneling. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2015, vol. 27, no. 16, pp. 164205. DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/16/164205>
6. Dora B., Moessner R. Nonlinear electric transport in graphene: Quantum quench dynamics and the Schwinger mechanism. *Phys. Rev. B*, 2010, vol. 81, iss. 16, pp. 165431. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.165431>
7. Smolyansky S. A., Churochkin D. V., Dmitriev V. V., Panferov A. D., Kämpfer B. Residual currents generated from vacuum by an electric field pulse in 2+1 dimensional QED models. *EPJ Web Conf.*, 2017, vol. 138. XXIII International Baldin Seminar on High Energy Physics Problems Relativistic Nuclear Physics and Quantum Chromodynamics (Baldin ISHEPP XXIII). Art. 06004. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/201713806004>
8. Wallace P. R. The Band Theory of Graphite. *Phys. Rev.*, 1947, vol. 71, iss. 9, pp. 622–634. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>
9. Wolfram Mathematica. Site. Available at: <http://www.wolfram.com/mathematica/> (accessed 18 April 2018).
10. MPI Forum. Available at: <https://www.mpi-forum.org/> (accessed 18 April 2018).
11. MPICH. Available at: <https://www.mpich.org/about/overview/> (accessed 18 April 2018).
12. GSL — GNU Scientific Library. Available at: <https://www.gnu.org/software/gsl/> (accessed 18 April 2018).
13. Browne S., Dongarra J., Trefethen A. Numerical Libraries and Tools for Scalable Parallel Cluster Computing. Available at: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.438.4231&rep=rep1&type=pdf> (accessed 18 April 2018).
14. Narozhnyi N. B., Nikishov A. I. Simplest processes in the pair-creating electric field. *Yad. Fiz.*, 1970, vol. 11, pp. 1072. [Sov. J. Nucl. Phys. 1970, vol. 11, pp. 596].
15. Hebenstreit F., Alkofer R., Dunne G. V., Gies H. Momentum signatures for Schwinger pair production in short laser pulses with sub-cycle structure. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, vol. 102, iss. 15, pp. 150404. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.150404>
16. Blaschke D., Juchnowski L., Panferov A., Smolyansky S. Dynamical Schwinger effect: Properties of the e^-e^+ plasma created from vacuum in strong laser fields. *Phys. Part. Nuclei*, 2015, vol. 46, iss. 5, pp. 797–800. DOI: <https://doi.org/10.1134/S106377961505010X>
17. Kolekonov S. V., Panferov A. D., Smolyansky S. A. Investigation of the fine structure of the distribution function of electron-positron pairs with the dynamic Schwinger effect. In: *Komp'yuternye nauki i informatsionnye tekhnologii* [Computer Science and Information Technologies. Int. Sci. Conf. Materials]. Saratov, Izdatel'stvo Saratovskogo universiteta, 2014, pp. 157–160 (in Russian).

Cite this article as:

Levenets S. A., Verevin T. T., Makhankov A. V., Panferov A. D., Pirogov S. O. Modeling the Dynamics of Massless Charge Carriers in Two-Dimensional System. *Izv. Saratov Univ. (N. S.), Ser. Math. Mech. Inform.*, 2020, vol. 20, iss. 1, pp. 127–137 (in Russian). DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2020-20-1-127-137>
