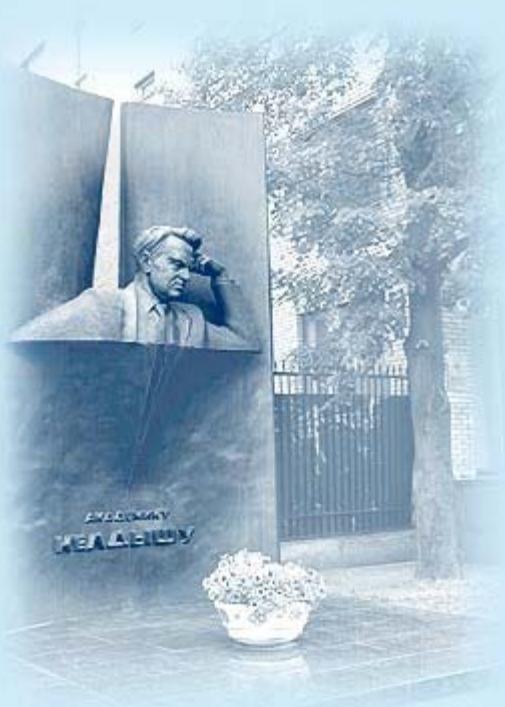




ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 145 за 2016 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Гладких А. А., [Малинецкий Г.Г.](#)

Нелинейное уравнение
Дирака для графена

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Гладких А. А., Малинецкий Г.Г. Нелинейное уравнение Дирака для графена // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 145. 16 с. doi:[10.20948/prepr-2016-145](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-145)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-145>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

А.А. Гладких, Г.Г. Малинецкий

**Нелинейное уравнение Дирака
для графена**

Москва — 2016

А.А. Гладких, Г.Г. Малинецкий

Нелинейное уравнение Дирака для графена

Рассматривается возможность введения нелинейной поправки в уравнение Дирака для графена для адекватного описания "коллективных электронных явлений". В отличие от ряда работ по указанной теме нелинейный член включает в себя не разность, а сумму квадратов компонент спинора. Особое внимание уделено равноправности пространственных координат. Проведено численное моделирование для ряда простейших начальных и краевых условий.

Ключевые слова: нелинейное уравнение Дирака, графен, численное моделирование.

A.A. Gladkikh, G.G. Malinetskii

Nonlinear Dirac equation for graphene

We consider a nonlinear Dirac equation in order to describe collective electronic phenomena. In comparison to the other papers on the given topic the interaction term includes the sum of the spinor components' squares instead of their difference. The numerical simulation was done for simple boundary and initial conditions.

Key words: nonlinear Dirac equation, graphene, numerical simulation.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 14-01-00773.

Оглавление

1	Введение	3
2	Уравнения Дирака и Вейля	3
3	Переход к нелинейному уравнению	4
4	Динамическая система	5
5	Первые интегралы системы без пространственной части	8
6	Отсутствие инвариантности	9
7	Численный эксперимент	12
8	Заключение	14

1 Введение

В работе [1] была предпринята попытка объяснить высокотемпературный ферромагнетизм в графене [2] с помощью внесения нелинейной добавки в уравнение Дирака. До этого данные о ферромагнетизме в графене объяснялись влиянием подложки, дефектами структуры или интерпретировались как погрешности измерений.

В работе [1], напротив, с помощью феноменологической поправки изменялась сама основа – уравнение Дирака, а требуемые свойства предлагалось получать как следствия из уравнения, которое было уточнено.

Измененное уравнение в упомянутой работе с помощью ряда приближений сводилось к уравнению Гинзбурга-Ландау-Хиггса, которое, как известно, допускает решение в виде кинка [3].

В некотором смысле, исходное уравнение использовалось для того, чтобы только обосновать кинк. И это действительно решало поставленную задачу (кинк – это не точечный, а протяженный солитон, который в некоторых случаях может рассматриваться как доменная стенка [4, 5]).

Нас же, однако, в первую очередь интересуют уравнения как таковые, а не решения их упрощений в виде кинка. Данная работа посвящена исследованию другого возможного варианта исходного уравнения.

В приведенном нами выводе уравнения нет отождествления спина с псевдоспином, что характерно для ряда работ по указанной теме. Особое внимание при написании уравнения удалено равноправности пространственных координат (дело в том, что нелинейный член в уравнение Дирака можно ввести по-разному, следствием произвола при выборе этого члена может быть существенная неравноправность x и y). Было проведено численное моделирование с помощью варианта схемы Лакса-Фридрихса.

2 Уравнения Дирака и Вейля

Как известно, свободные электроны в графене ведут себя как безмассовые релятивистские фермионы. Приведенное утверждение означает, что поведение частиц в графене может быть описано с помощью уравнения Вейля (которое, как известно, является релятивистским).

Никакого противоречия с теорией относительности при этом не возникает: в действительности электроны не теряют массу и движутся со скоростью v_F , которая на два порядка меньше скорости света. Дело заключается в том, что носители заряда в графене подчиняются уравнениям, описывающим движение

ние безмассовых двухкомпонентных релятивистских частиц. Смысл компонент спинора при этом совершенно иной, а в роли скорости света выступает упомянутая v_F . Вместе с тем, не следует полагать, что рассматриваемое сходство оканчивается на совпадении уравнений. Ряд таких эффектов, как туннелирование, рождение швингеровских пар, парадокс Клейна, андреевское отражение, ставших известными вовсе не в связи с графеном, оказывается возможным наблюдать при помощи этого материала [6, 7].

В уравнении Дирака фигурируют биспиноры. Количество компонент у ψ равно четырём (H_D — гамильтониан Дирака, размерность α -матриц — 4).

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_D \psi, \quad \hat{H}_D = \nu_F (\alpha^j \hat{p}_j + m\beta).$$

Уравнение Вейля соответствует случаю $m = 0$. И фигурируют в нём спиноны (количество компонент у ψ и размерность матриц равны двум). Так, для рассматриваемого случая [7]:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \hbar \nu_F \left[\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} (-i\partial_x) + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} (-i\partial_y) \right] \psi, \\ H &= -i\hbar\nu_F \begin{pmatrix} -\partial_x & -i\partial_y \\ i\partial_y & \partial_x \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

3 Переход к нелинейному уравнению

Попытки добавления нелинейных частей в уравнение Дирака предпринимались давно. Различные варианты были предложены Д.Д. Иваненко [8], М. Соллером [9] и другими. Вопрос о том, что именно нужно добавить к линейному уравнению носит характер первостепенной важности. Следует еще раз отметить, что вид поправки полностью определяется нами. Мы специально вводим в уравнение нелинейный член W .

Свободная энергия

$$\Phi = \psi^+ (\sigma, p) \psi + J (\bar{\psi} \sigma_3 \psi) (\bar{\psi} \sigma_3 \psi),$$

$$\bar{\psi} = \psi^+ \sigma_3, \quad \bar{\psi} \sigma_3 \psi = \psi^+ \sigma_3 \sigma_3 \psi = \psi^+ \psi, \quad J — \text{константа связи.}$$

Проварьируем Φ .

$$\frac{\delta \Phi}{\delta \psi^+} = (\sigma, p) \psi + 2J \psi^+ \psi \sigma_3 \sigma_3 \psi.$$

$$\sigma = (\sigma_1, \sigma_2), \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Получаем уравнение

$$\nu_F(\sigma, p)\psi + J\psi (\psi^+ \psi) = 0.$$

Один из самых проблематичных моментов связан с переходом к спиновой плотности. Дело заключается в том, что изначально (при выводе уравнения Дирака для графена) рассматривался не спин, а псевдоспин: необходимо было учесть влияние двух взаимопроникающих решеток на свободные электроны. Таким образом, компоненты спинора имеют другую природу и не связаны напрямую с настоящим спином.

В работе [1] рассматривалась величина $\psi_1^2 - \psi_2^2$. Поясним, откуда берется знак « $-$ ». Пусть ψ – спинор, составленный из компонент ψ_1 и ψ_2 . Тогда

$$\psi^+ \sigma_3 \psi = \psi_1^2 - \psi_2^2.$$

По-видимому, псевдоспин рассматривался как настоящий спин. Возможно, что есть соображения, оправдывающие подобную операцию (возможно и то, что было рассмотрено нечто совсем другое). Однако, в силу неочевидности перехода, мы не будем в настоящей работе рассматривать спиновую плотность и ограничимся рассмотрением плотности электронной. В явном виде интересующее нас уравнение, где $\psi_k = a_k + ib_k$, выглядит так.

$$\begin{cases} \frac{\partial a_1}{\partial t} = \left(\frac{\partial a_1}{\partial x} - \frac{\partial b_2}{\partial y} \right) - b_1 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial b_1}{\partial t} = \left(\frac{\partial b_1}{\partial x} + \frac{\partial a_2}{\partial y} \right) + a_1 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial a_2}{\partial t} = \left(-\frac{\partial a_2}{\partial x} + \frac{\partial b_1}{\partial y} \right) - b_2 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial b_2}{\partial t} = \left(-\frac{\partial b_2}{\partial x} - \frac{\partial a_1}{\partial y} \right) + a_2 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2). \end{cases}$$

4 Динамическая система

Без пространственной части система принимает следующий вид:

$$\begin{cases} \dot{a}_1 = -b_1 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \dot{b}_1 = a_1 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \dot{a}_2 = -b_2 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \dot{b}_2 = a_2 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2). \end{cases}$$

Мы имеем дело с системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Заметим, что $\frac{d}{dt}(a_i^2 + b_i^2) = 2(a_i \dot{a}_i + b_i \dot{b}_i) = 0$. Таким образом, $a_1^2 + b_1^2$ и $a_2^2 + b_2^2$ – первые интегралы системы. Выражение $a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2$ не зависит от времени t .

Заметим также, что, дважды продифференцировав каждое уравнение, входящее в систему, получим:

$$a_1'' = -Ca_1, \quad b_1'' = -Cb_1, \quad a_2'' = -Ca_2, \quad b_2'' = -Cb_2,$$

где в качестве C выступает константа, определяемая из начальных условий.

$$C = a_1(0)^2 + b_1(0)^2 + a_2(0)^2 + b_2(0)^2.$$

Вспомним, как выглядело наше уравнение в комплексном виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \frac{\partial \psi_1}{\partial x} + i \frac{\partial \psi_2}{\partial y} + i(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) \psi_1, \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = -\frac{\partial \psi_2}{\partial x} - i \frac{\partial \psi_1}{\partial y} + i(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) \psi_2. \end{cases}$$

Отбрасывая пространственную часть, получаем:

$$\begin{cases} \psi'_1 = i(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) \psi_1, \\ \psi'_2 = i(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) \psi_2. \end{cases}$$

$|\psi_i|$ есть не что иное, как $a_i^2 + b_i^2$, и $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$ является постоянной величиной. Таким образом,

$$\begin{cases} \psi'_1 = iC\psi_1, \\ \psi'_2 = iC\psi_2. \end{cases}$$

$$\psi_i = (a_i(0) + b_i(0)i) e^{iCt}.$$

Или $\psi_i = \sqrt{a_i^2(0) + b_i^2(0)} \exp\left(iCt + i \arccos\left(a_i(0)/\sqrt{a_i^2(0) + b_i^2(0)}\right)\right)$. Так,

$$\begin{cases} a_i = \sqrt{I_1} \cos \gamma_i, \\ b_i = \sqrt{I_2} \sin \gamma_i. \end{cases}$$

где $\gamma_i = (I_1 + I_2)t + \arccos \frac{a_i(0)}{\sqrt{I_i}}$, а $I_i = a_i^2(0) + b_i^2(0)$.

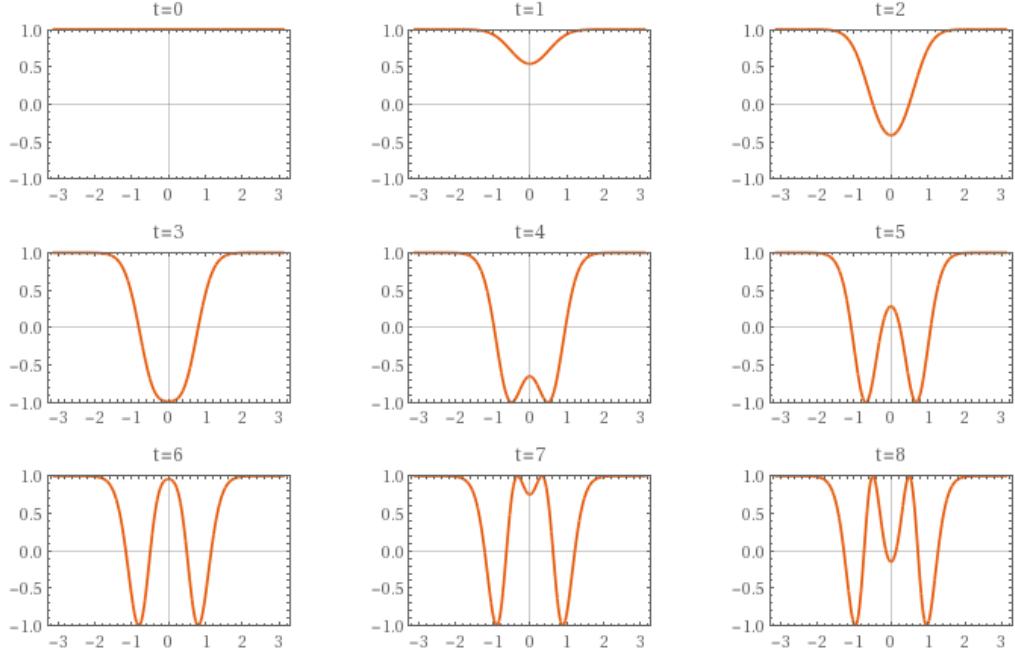


Рис. 1: Точное решение для a_1 при $a_1(0) = \exp(-x^2)$, $a_2(0) = 0$, $b_{1,2}(0) = 0$

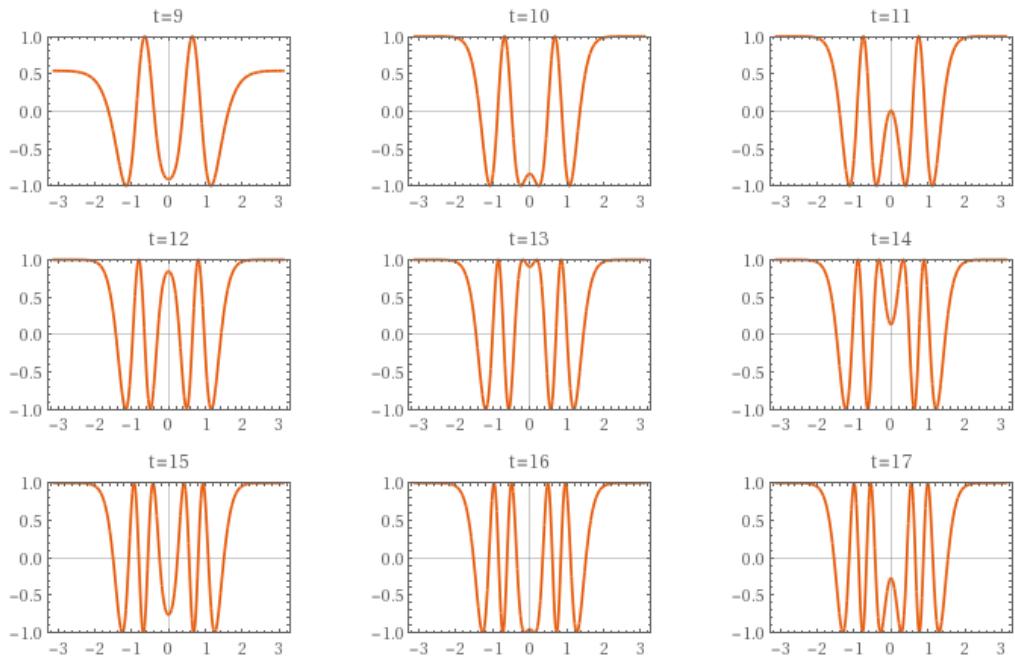


Рис. 2: Точное решение для a_1 при $a_1(0) = \exp(-x^2)$, $a_2(0) = 0$, $b_{1,2}(0) = 0$

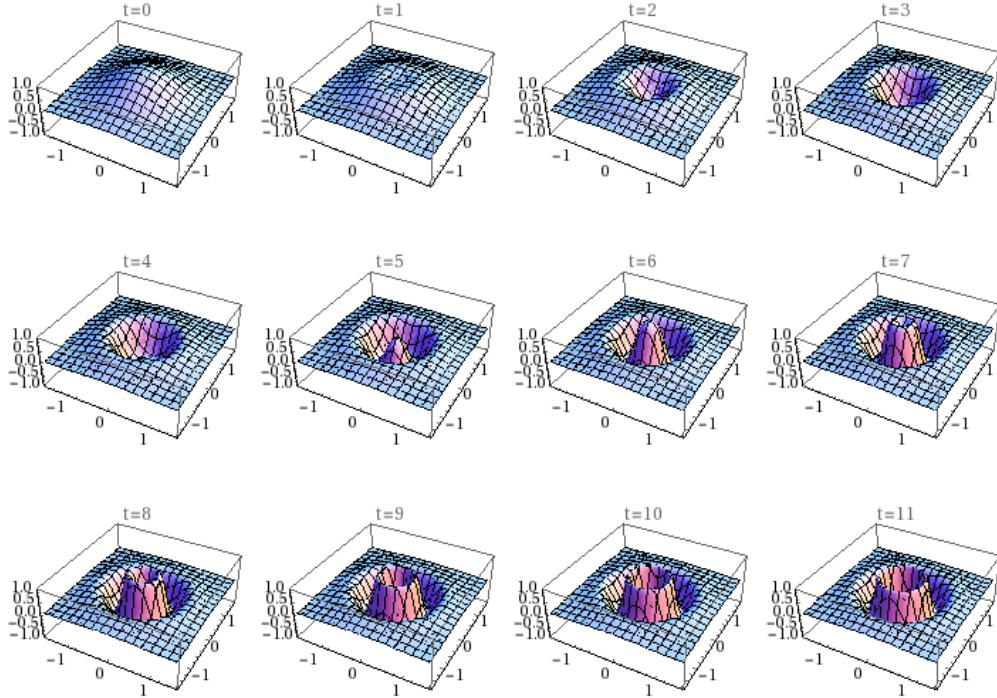


Рис. 3: Точное решение системы без пространственной части в $2D$

5 Первые интегралы системы без пространственной части

I_1 и I_2 вовсе не будут являться интегралами при добавлении к рассмотренной системе пространственной части.

Однако, если добавить только зависимость по переменной x , то I_1 и I_2 останутся сохраняющимися. Действительно, пусть

$$\begin{cases} \frac{\partial a_1}{\partial t} = \frac{\partial a_1}{\partial x} - b_1 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial b_1}{\partial t} = \frac{\partial b_1}{\partial x} + a_1 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial a_2}{\partial t} = -\frac{\partial a_2}{\partial x} - b_2 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial b_2}{\partial t} = -\frac{\partial b_2}{\partial x} + a_2 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2). \end{cases}$$

Тогда $\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\right)(a_1^2 + b_1^2) = 2a_1 \left(\frac{\partial a_1}{\partial t} - \frac{\partial a_1}{\partial x}\right) + 2b_1 \left(\frac{\partial b_1}{\partial t} - \frac{\partial b_1}{\partial x}\right) = 0$.
 $\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\right)(a_2^2 + b_2^2) = 2a_2 \left(\frac{\partial a_2}{\partial t} + \frac{\partial a_2}{\partial x}\right) + 2b_2 \left(\frac{\partial b_2}{\partial t} + \frac{\partial b_2}{\partial x}\right) = 0$.

Итак,

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right) (a_1^2 + b_1^2) = 0, \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right) (a_2^2 + b_2^2) = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} (a_1^2 + b_1^2) = f(x + t), \\ (a_2^2 + b_2^2) = g(x - t). \end{cases}$$

Однако, в случае с переменной y дело обстоит не так просто. Добавив зависимость по y и убрав зависимость по x , получим.

$$\begin{cases} \frac{\partial a_1}{\partial t} = -\frac{\partial b_2}{\partial y} - b_1 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial b_1}{\partial t} = \frac{\partial a_2}{\partial y} + a_1 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial a_2}{\partial t} = \frac{\partial b_1}{\partial y} - b_2 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial b_2}{\partial t} = -\frac{\partial a_1}{\partial y} + a_2 (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2). \end{cases}$$

Покажем, как свести эту систему к требуемому виду

$$\begin{cases} \frac{\partial(a_1+b_2)}{\partial t} = -\frac{\partial(a_1+b_2)}{\partial y} - (b_1 - a_2) (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial(b_1+a_2)}{\partial t} = \frac{\partial(b_1+a_2)}{\partial y} + (a_1 - b_2) (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial(a_1-b_2)}{\partial t} = \frac{\partial(a_1-b_2)}{\partial y} - (b_1 + a_2) (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial(b_1-a_2)}{\partial t} = -\frac{\partial(b_1-a_2)}{\partial y} + (a_1 + b_2) (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2). \end{cases}$$

$$u_1 = a_1 - b_2, \quad v_1 = b_1 + a_2, \quad u_2 = a_1 + b_2, \quad v_2 = b_1 - a_2,$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = \frac{\partial u_1}{\partial y} - v_1 (u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2), \\ \frac{\partial v_1}{\partial t} = \frac{\partial v_1}{\partial y} + u_1 (u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2), \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = -\frac{\partial u_2}{\partial y} - v_2 (u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2), \\ \frac{\partial v_2}{\partial t} = -\frac{\partial v_2}{\partial y} + u_2 (u_1^2 + v_1^2 + u_2^2 + v_2^2). \end{cases}$$

Как видим, при нашем выборе знаков система с одной переменной x и система с одной переменной y приводятся к одному виду. Однако, так сделать удается далеко не всегда.

6 Отсутствие инвариантности

Покажем, что выбор других знаков при нелинейных слагаемых может привести к неравноправности пространственных координат.

Рассмотрим систему, отличие которой от предыдущей заключается в том, что общая для всех уравнений системы часть нелинейного слагаемого S равна не $a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2 = \psi^+ \psi$ как раньше, а $a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2 = \psi^+ \sigma_3 \psi$, а знаки при $b_1 S$ и $a_1 S$ изменены на противоположные.

$$\begin{cases} \frac{\partial a_1}{\partial t} = \left(\frac{\partial a_1}{\partial x} - \frac{\partial b_2}{\partial y} \right) + b_1 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial b_1}{\partial t} = \left(\frac{\partial b_1}{\partial x} + \frac{\partial a_2}{\partial y} \right) - a_1 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial a_2}{\partial t} = \left(-\frac{\partial a_2}{\partial x} + \frac{\partial b_1}{\partial y} \right) - b_2 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 + b_2^2), \\ \frac{\partial b_2}{\partial t} = \left(-\frac{\partial b_2}{\partial x} - \frac{\partial a_1}{\partial y} \right) + a_2 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 + b_2^2). \end{cases}$$

Мы все так же можем получить $a_1^2 + b_1^2 = f(x + t)$ и $a_2^2 + b_2^2 = g(x - t)$, если мы оставляем икс. Действительно,

$$\begin{cases} \frac{\partial a_1}{\partial t} = \frac{\partial a_1}{\partial x} + b_1 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2), \\ \frac{\partial b_1}{\partial t} = \frac{\partial b_1}{\partial x} - a_1 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2), \\ \frac{\partial a_2}{\partial t} = -\frac{\partial a_2}{\partial x} - b_2 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2), \\ \frac{\partial b_2}{\partial t} = -\frac{\partial b_2}{\partial x} + a_2 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2). \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right) (a_1^2 + b_1^2) &= 2a_1 \frac{\partial a_1}{\partial t} + 2b_1 \frac{\partial b_1}{\partial t} - 2a_1 \frac{\partial a_1}{\partial x} - 2b_1 \frac{\partial b_1}{\partial x}, \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right) (a_1^2 + b_1^2) &= 2a_1 \left(\frac{\partial a_1}{\partial t} - \frac{\partial a_1}{\partial x} \right) + 2b_1 \left(\frac{\partial b_1}{\partial t} - \frac{\partial b_1}{\partial x} \right) = 0. \end{aligned}$$

Аналогично, $\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right) (a_2^2 + b_2^2) = 0$. Таким образом,

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right) (a_1^2 + b_1^2) = 0, \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right) (a_2^2 + b_2^2) = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} (a_1^2 + b_1^2) = f(x + t), \\ (a_2^2 + b_2^2) = g(x - t). \end{cases}$$

Попытаемся проделать то же для переменной y , убрав x .

$$\begin{cases} \frac{\partial a_1}{\partial t} = -\frac{\partial b_2}{\partial y} + b_1 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2), \\ \frac{\partial b_1}{\partial t} = \frac{\partial a_2}{\partial y} - a_1 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2), \\ \frac{\partial a_2}{\partial t} = \frac{\partial b_1}{\partial y} - b_2 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2), \\ \frac{\partial b_2}{\partial t} = -\frac{\partial a_1}{\partial y} + a_2 (a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2). \end{cases}$$

Мы можем проделать следующие операции, которые не приводят к желаемому

результату, а наоборот, показывают степень различия между переменными.

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right) (a_1^2 - b_2^2) &= 2a_1 \left(\frac{\partial a_1}{\partial t} + \frac{\partial a_1}{\partial y} \right) - 2b_2 \left(\frac{\partial b_2}{\partial t} + \frac{\partial b_2}{\partial y} \right) = \\
 a_1 \left(\frac{\partial a_1}{\partial t} + a_2 \mathbf{S} - \frac{\partial b_2}{\partial t} \right) - b_2 \left(\frac{\partial b_2}{\partial t} + b_1 \mathbf{S} - \frac{\partial a_1}{\partial t} \right) &= \\
 (a_1 a_2 - b_1 b_2)(a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2) + (a_1 + b_2) \left(\frac{\partial a_1}{\partial t} - \frac{\partial b_2}{\partial t} \right) . \\
 \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \right) (b_1^2 - a_2^2) &= 2b_1 \left(\frac{\partial b_1}{\partial t} - \frac{\partial b_1}{\partial y} \right) - 2a_2 \left(\frac{\partial a_2}{\partial t} - \frac{\partial a_2}{\partial y} \right) = \\
 b_1 \frac{\partial b_1}{\partial t} - a_2 \frac{\partial a_2}{\partial t} - b_1 \frac{\partial a_2}{\partial t} - b_1 b_2 \mathbf{S} + a_2 \frac{\partial b_1}{\partial t} + a_1 a_2 \mathbf{S} &= \\
 (a_1 a_2 - b_1 b_2)(a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2) + \frac{\partial a_1}{\partial t} (a_1 + b_2) &= \\
 (a_1 a_2 - b_1 b_2)(a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2) + (a_2 + b_1) \left(\frac{\partial b_1}{\partial t} - \frac{\partial a_2}{\partial t} \right) .
 \end{aligned}$$

Может показаться, что свести систему к исходной поможет следующая замена:

$$u_1 = a_1 + b_2, \quad u_2 = a_1 - b_2, \quad v_1 = b_1 + a_2, \quad v_2 = b_1 - a_2.$$

Действительно,

$$\left\{
 \begin{array}{l}
 \frac{\partial(a_1+b_2)}{\partial t} = -\frac{\partial(a_1+b_2)}{\partial y} + (b_1 + a_2)(a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2), \\
 \frac{\partial(b_1+a_2)}{\partial t} = \frac{\partial(b_1+a_2)}{\partial y} - (a_1 + b_2)(a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2), \\
 \frac{\partial(a_1-b_2)}{\partial t} = \frac{\partial(a_1-b_2)}{\partial y} + (b_1 - a_2)(a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2), \\
 \frac{\partial(b_1-a_2)}{\partial t} = -\frac{\partial(b_1-a_2)}{\partial y} - (a_1 - b_2)(a_1^2 + b_1^2 - a_2^2 - b_2^2).
 \end{array}
 \right.$$

Однако, в новых переменных уравнения приобретают вид

$$\left\{
 \begin{array}{l}
 \frac{\partial u_1}{\partial t} = -\frac{\partial u_1}{\partial y} + v_1(u_1 u_2 + v_1 v_2), \\
 \frac{\partial v_1}{\partial t} = \frac{\partial v_1}{\partial y} - u_1(u_1 u_2 + v_1 v_2), \\
 \frac{\partial u_2}{\partial t} = \frac{\partial u_2}{\partial y} + v_2(u_1 u_2 + v_1 v_2), \\
 \frac{\partial v_2}{\partial t} = -\frac{\partial v_2}{\partial y} - u_2(u_1 u_2 + v_1 v_2).
 \end{array}
 \right.$$

Ясно, что эти уравнения не эквивалентны уравнениям, полученным для переменной x .

Рассмотрим также, что будет, если выключить нелинейность и убрать правую часть. В случае задания начального значения только для переменной b_1 , получим

$$\omega_j = (-1)^j \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad j = 1, 2,$$

$$\begin{cases} a_i = A_1 \cos(k_x x + k_y y + \sqrt{k_x^2 + k_y^2} t), \\ b_i = A_2 \frac{k_x + (-1)^{i+j} \sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k_y} \cos(k_x x + k_y y + \sqrt{k_x^2 + k_y^2} t). \end{cases}$$

7 Численный эксперимент

Заметим, что наша система допускает такое представление. Покажем, что система имеет гиперболический тип.

$$\mathbf{u}_t = A\mathbf{u}_x + B\mathbf{u}_y + \mathbf{f},$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$u = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} u * u^T u.$$

У нас имеются 3 переменные: x, y и t . Существует целый ряд определений гиперболичности многомерных систем (по Петровскому, Фридрихсу и т.д.). Нам важно, чтобы линейная замена пространственных координат не меняла сам тип процесса. Поэтому условие будем накладывать на все матрицы вида $\alpha A + \beta B$, где $\alpha^2 + \beta^2 \neq 0$ (рассматривается уравнение $u_t = Au_x + Bu_y$).

Вспоминая вид матриц A и B , получаем вид $\alpha A + \beta B$:

$$\alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & -\beta \\ 0 & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & -\alpha & 0 \\ -\beta & 0 & 0 & -\alpha \end{pmatrix}.$$

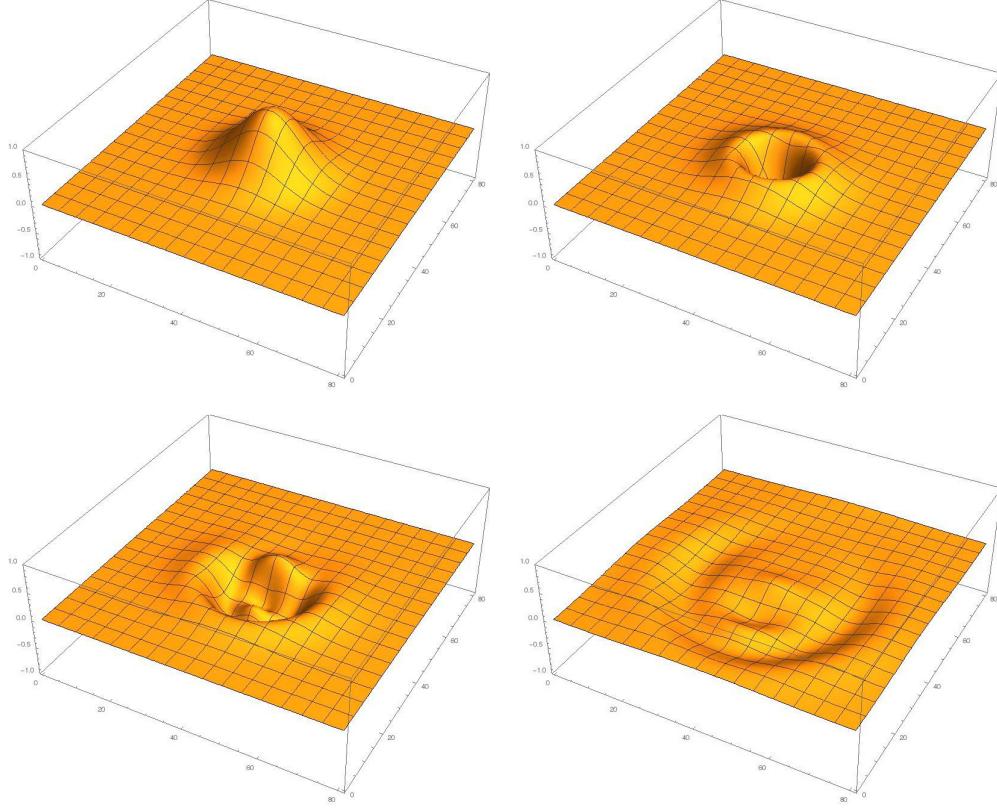


Рис. 4: Динамика $\psi^+\psi$ при $a_1(0) = \exp(-x^2)$, $a_2(0) = 0$, $b_{1,2}(0) = 0$

Определитель матрицы, составленной из собственных векторов будет больше 0 для $\forall(\alpha, \beta) : \alpha^2 + \beta^2 \neq 0$

$$\det \begin{pmatrix} -\frac{\alpha-\sqrt{\alpha^2+\beta^2}}{\beta} & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -\frac{\sqrt{\alpha^2+\beta^2}-\alpha}{\beta} & 1 & 0 \\ -\frac{\alpha+\sqrt{\alpha^2+\beta^2}}{\beta} & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -\frac{-\alpha-\sqrt{\alpha^2+\beta^2}}{\beta} & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{4\alpha^2\beta^2 + 4\beta^4}{\beta^4} \geq 0.$$

Плоскость Oxy — плоскость графена. По оси аппликат откладывается величина $\psi^+\psi$. Заметим, что она целиком входит в правую часть каждого из уравнений системы.

Величина $\psi^+\psi$ никак не связана с нормировкой, что несколько непривычно. ψ является спинором, и $\psi^+\psi$ имеет смысл плотности вероятности.

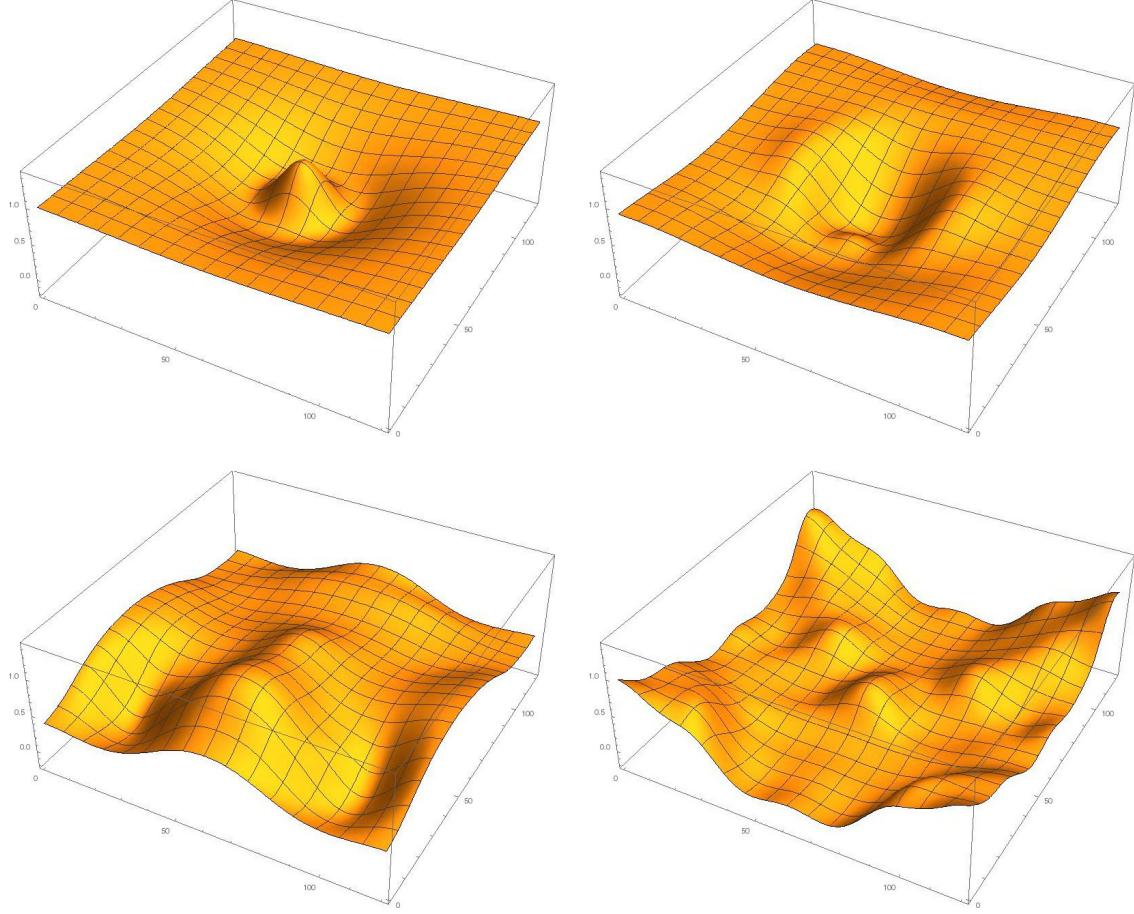


Рис. 5: Характерная динамика $\psi^+\psi$ при отождествлении границ расчетной области

8 Заключение

В замкнутой форме выписано уравнение, претендующее на описание „коллективных электронных явлений в графене“, обобщающее уравнение Дирака. Рассмотрены системы, получающиеся путем упрощения исходной, также выписаны решения для соответствующих систем.

Проведено моделирование системы с помощью схемы Лакса-Фридрихса для ряда простейших начальных условий. Было показано, что в случае включения как нелинейной, так и пространственной частей уравнения, изначальное возмущение распадается, а возникновения критичности, характерной для рассмотрения одной нелинейной части, не происходит.

Было также продемонстрировано, что динамика системы в случае периодических краевых условий может быть довольно сложна. Численные эксперименты при этом носят предварительный характер и призваны продемонстрировать, что полученные уравнения богаты и содержательны.

Анализ свойств упрощенных систем представляется важным для того, чтобы понять, какие эффекты были характерны уже для отдельных частей, а какие могут быть достигнуты только за счет сочетания составляющих.

Поиск подобных нетривиальных эффектов является задачей для будущего. Хочется верить, что эта задача будет интересна с общематематической точки зрения, а не только в связи с возможностью описания электронных явлений.

Авторы считают своим долгом выразить признательность Д.Д. Грачеву, который привлек их внимание к интересной задаче. Авторы благодарят Ф.Попова за обсуждение текста статьи.

Литература

- [1] Derbov V. L. et al. Model for spin waves and lasing in monolayer graphene films //Saratov Fall Meeting 2014. – International Society for Optics and Photonics, 2015.
- [2] Wang Y. et al. Room-temperature ferromagnetism of graphene //Nano letters. – 2008. – Т. 9. – №. 1. – С. 220-224.
- [3] Белова Т. И., Кудрявцев А. Е. Солитоны и их взаимодействия в классической теории поля //Успехи физ. наук. – 1997. – Т. 167. – №. 4. – С. 377-406.
- [4] Vachaspati T. Kinks and domain walls: An introduction to classical and quantum solitons. – Cambridge University Press, 2006.
- [5] Грачёв Д. Д. и др. Ферромагнетизм в графеновых и фуллереновых наноструктурах. Теория, моделирование, эксперимент //М.: Вестник РУДН. Серия «Математика, информатика, физика. – 2010. – Т. 1. – С. 22-27.
- [6] Лозовик Ю. Е., Меркулова С. П., Соколик А. А. Коллективные электронные явления в графене //Успехи физических наук. – 2008. – Т. 178. – №. 7. – С. 757-776.
- [7] Маслов В. Свойства графена и $(2 + 1)$ -мерное уравнение Дирака // М.: МГУ им. М.В. Ломоносова. – 2015.
- [8] Иваненко Д. Д. Замечание о теории взаимодействия через частицы // ЖЭТФ. – 1938. – Т. 8. – С. 260–266.
- [9] Soler M. Classical, stable, nonlinear spinor field with positive rest energy //Physical Review D. – 1970. – Т. 1. – №. 10. – С. 2766.
- [10] Akhmedov E. T., Popov F. K., Slepukhin V. M. Infrared dynamics of the massive φ^4 theory on de Sitter space //Physical Review D. – 2013. – Т. 88. – №. 2. – С. 024021.