На правах рукописи

Ле Ань Ньат

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ СПИНОВЫХ ВОЛН В ГРАФЕНОВЫХ СТРУКТУРАХ

05.13.18 — математическое моделирование, методы вычислений и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2020

Работа выполнена на кафедре прикладной информатики и теории вероятностей Российского университета дружбы народов

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, доцент **Кулябов Дмитрий Сергеевич**
Официальные оппоненты:	профессор Института физических исследований и технологий ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов», доктор физико-математических наук, профессор **Рудой Юрий Григорьевич**
	профессор Департамента математики Финансового Университета при Правительстве РФ, доктор физико-математических наук, доцент **Щетинин Евгений Юрьевич**
	профессор Кафедры квантовой статистики и теории поля, Отделения экспериментальной и теоретической физики, Физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, доктор физико-математических наук **Перепёлкин Евгений Евгеньевич**

Защита состоится «22» декабря 2020 г. в 15 ч. 00 мин на заседании диссертационного совета ПДС 0200.001 при Российском университете дружбы народов по адресу: г. Москва, ул. Орджоникидзе д. 3, ауд. 214.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Российского университета дружбы народов по адресу: 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6.
(Отзывы на автореферат просьба направлять по указанному адресу.)

Автореферат разослан «______» ноября 2020 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета

кандидат
физико-математических
наук Демидова А. В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования

Сегодня графен представляет собой чистый углеродный слой в виде гексагональной решетки с длиной связи углерод-углерод около 0,142 нанометра. Графен – один из самых замечательных материалов, когда-либо обнаруженных и самых изученных. В нем есть ряд уникальных особенностей, которые привлекли внимание как теоретиков, так и экспериментаторов. Исследование его свойств привело к прорывам не только с точки зрения фундаментальных исследований, но и с точки зрения прикладной науки. Графен был впервые изучен П. Р. Уоллесом в 1947 г. (P. R. Wallace, 1947). В 2004 г. К. С. Новоселов и А. Гейм в своей статье, опубликованной в журнале Science (K. S. Novoselov, 2004) описали монокристаллические графеновые пленки, как монокристаллические графитовые пленки малой толщины в своей статье, опубликованной в журнале Science (K. S. Novoselov, 2004). А к 2005 году этим исследователям удалось выделить листы графена.

Мы знаем, что графен может быть исходной формой для многих углеродных структур, таких как вышеупомянутый графит, углеродных нанотрубок (которые можно рассматривать как свернутые листы графена, сформированные в трубки) и фуллеренов / бакиболов (сферические структуры с клетко-подобной структурой из графена, только с заменой некоторых шестиугольных колец на пятиугольные кольца). В графене каждый атом углерода ковалентно связан с тремя другими атомами углерода (у них остается способность связываться с четвертым атомом). Благодаря прочности ковалентных связей между атомами углерода, графен обладает высокой стабильностью и очень высоким пределом прочности. Поскольку графен плоский, каждый атом находится на поверхности[1] и доступен с обеих сторон, поэтому взаимодействие с окружающими молекулами больше. Из-за начальной симметрии спинов системы эти электроны компенсируются, и резуль-

[1]Граненой поверхности, чрезвычайно мало отклоняющейся от плоскости

тирующая спиновая плотность валентных электронов на двумерной решетке равна нулю.

Свойства графена включают выдающуюся механическую прочность, которая на порядки прочнее стали; высокая электропроводность и теплопроводность, конечное удельное сопротивление даже при отсутствии примесей, и релятивистское дисперсионное соотношение для активных электронов: их кинематика описывается уравнением Дирака, уравнением Шрёдингера и другими.

Одна из актуальных задач математического моделирования заключается в том, чтобы построить относительно простые нелинейные модели для качественной оценки явлений, упомянутых выше, которые учитывали бы электрон-электронные взаимодействия в графеновых структурах и подходили бы для практических приложений. Отметим, что упрощенные модели, основанные на нелинейном уравнении Шрёдингера, применялись для анализа сверхпроводимости или конденсации Бозе-Эйнштейна в форме уравнения Ландау-Гинзбурга или Гросса-Питаевского соответственно. Модель Дирака для квазичастиц в графене была разработана примерно в 1984 году (DiVincenzo D. P., 1984).

Мы знаем, что в структурах на основе углерода наблюдаются различные магнитные явления, в частности диамагнетизм, парамагнетизм и ферромагнетизм. Например, в материалах с $3d$ или $4f$ электронами возможно существование магнитных свойств. Однако при температурах $\mathrm{T} < 20$ K некоторые органические молекулы с неспаренными π–электронами демонстрируют магнитный порядок, но не имеют металлических ионов (Veciana, 2001). Кроме того, при температурах выше комнатной, существование магнитного порядка в системах с единственными s, p–электронами не описывается никаким законом физики.

Недавно углеродные структуры были признаны в основном диамагнитными, и любой след ферромагнетизма объяснялся дефектами однородности: примесями, влиянием границы или дефектами матрицы. В то же время некоторые недавно опубликованные результаты показывают, что исследователи находятся в начале понимания магнетизма в материалах на основе углерода. В недавнем обзоре (T. Makarova, 2003) о магнетизме в углеродных материалах описана большая часть старых работ, а также приведены последние ссылки на органические магниты.

Предполагаемое наличие электрон-электронного спин-зависимого взаимодействия приводит к спонтанному нарушению этого спин-симметричного состояния, когда спиновые плотности валентных p_z – электронов подрешеток локально не равны по модулю друг другу. В работах (E. F. Sheka, 2009) (E. F. Sheka, 2010) было показано, что спиновая асимметрия на графеновых поверхностях может быть описана, как результат спин-орбитальных и спин-спиновых взаимодействий валентных электронов углерода в соответствующих двумерных структурах. Этот вывод был получен в результате численного моделирования с использованием модифицированной специальным образом модели Хартри-Фока.

Вышеуказанные обстоятельства диктуют актуальность построения и компьютерной реализации теоретической модели, позволяющей, в частности, описывать ферромагнитные свойства в графеновых структурах адекватно имеющимся физическим и численным результатам. В работе (Grachev D. D., 2010) предложена модель, описывающая свойства графеновых моноатомных слоев, образующих поверхности, и связанные с наличием на этих поверхностях нетривиальной функции распределения спиновой плотности, образованной в результате спонтанного нарушения спиновой симметрии валентных электронов атомов углерода на указанных поверхностях.

В рамках диссертационной работы автором построены численные модели нелинейных спиновых волн и стационарных псевдоспиновых волн на графеновых пленках и реализованы псевдоспектральным методом Чебышёва и методом Ритца-Галеркина. При этом осуществлен переход от дискретной двумерной решетки к непрерывной двумерной поверхности, натянутой на эту решетку. Указанная двумерная поверхность является конфигурационным пространством модели, вообще говоря, произвольной топологии.

Цели диссертационной работы

Целью работы является проведение численного моделирования поведения нелинейных спиновых волн в графеновых структурах псевдоспектральным методом Чебышёва и методом Ритца-Галеркина. Кроме того, реализовано численное моделирование нелинейных спиновых конфигураций плотности валентных электронов на поверхности графеновой пленки, таких как кинки, антикинки, бризеры и их взаимодействия.

Перед соискателем были поставлены **задачи**:

– изучения нелинейной модели псевдоспиновых волн на поверхности графеновых пленок различной топологии;
– изучения псевдоспектрального метода решения задач Штурма-Лиувилля с неаналитически заданным потенциалом;
– исследования свойств дискретного спектра квазисвязанных метастабильных состояний псевдоспиновых волн на поверхности графеновых пленок различной топологии.

При решении вышеуказанных задач были получены **следующие результаты**.

1. Разработаны численные методы моделирования потенциальной энергии взаимодействующих метастабильных состояний (бризеров) псевдоспиновых волн на поверхности графеновой пленки.
2. Численный псевдоспектральный метод на основе Чебышевских полиномов первого рода на сетках Гасса-Лобатто и соответствующий алгоритм реализованы для решения задач Штурма-Лиувилля с сеточно вычисленными потенциалами.
3. Численно исследован дискретный спектр взаимодействия бризеров с целью установления инверсной заселенности уровней метастабильных состояний псевдоспиновых волн на поверхности графеновых пленок различной топологии.

Научная новизна проведенных исследований.

1. Построено новое численное решение уравнения Шредингера с вычисленным на сетке потенциалом.

2. Построена новая итерационная процедура расчета решений задачи динамики квантово-механической волновой функции, описывающей дискретный спектр квазисвязанных метастабильных состояний псевдоспиновых волн на поверхности графеновых пленок.
3. Выявлена возможность инверсной заселенности в вычисленном спектре взаимодействия квазисвязанных метастабильных состояний псевдоспиновых волн на поверхности графеновых пленок.

Теоретическая и практическая значимость

Теоретическая и практическая значимость проведённых исследований состоит в следующем:

Разработанные численные методы найдут применение в теоретических исследованиях динамических спинонов на неплоских поверхностях графена (фуллерена, нанотрубки) различной топологии. Псевдоспектральный метод Чебышёва эффективно используется для отыскания численных решений линейных и нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. В данной диссертации его использование проиллюстрировано решением уравнений Бесселя, уравнения Матье, нелинейных уравнений маятника, автономной системы, уравнений Линара. Вышеуказанные проблемы возникают в различных областях механики, квантовой физики, химической инженерии, аналитической химии и их применения в технике, физике, а также в спиновой электронике при расчёте нелинейных спиновых волн в графеновых структурах.

Методология и методы исследования

В диссертационной работе используются: псевдоспектральный метод, метод Ритца и метод Галеркина. В диссертации используются языки программирования Matlab версия 2016a и Mathematica версия 10.4.

Обоснованность и достоверность результатов

Обоснованность результатов диссертации основывается на теории и практике исследования. Результаты исследований теории и численной модели были опубликованы в престижных журналах или научных статьях на международных конференциях. Численные результаты согласуются с результатами других авторов и экспериментальными данными.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Использование численных методов для моделирования нелинейных спиновых волн в графеновых структурах: псевдоспектральный метод Чебышёва и метод Ритца- Галеркина.
2. Использование псевдоспектрального метода для определения энергетического спектра квантово-механической волновой функции бризера в графеновых структурах и энергии взаимодействия метастабильных псевдоспиновых волн на моноатомных пленках графена.
3. Использование псевдоспектрального метода Чебышёва для вычисления инверсной заселенности энергетического спектра стационарного уравнения Шрёдингера для квантовомеханической волновой функции динамики бризеров.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

– научная конференция «Фундаментальные и прикладные разработки в области технических и физикоматематических наук», май 2018 г. Казань, Россия;
– XXXI - Международная научная конференция «Математические Методы в Технике и Технологиях ММТТ-31», 10-14 сентября

2018 г., Издательство Политехнического университета, г. Санкт-Петербург, Россия;
- международная конференция «Информационные технологии и нанотехнологии» – ИТНТ-2019, 21–24 май 2019, г. Самара, Россия;
- IX (международная) конференция «Information and Telecommunication Technologies and Mathematical Modeling of High-Tech Systems 2019 - (ITTMM 2019)», 15–19 апреля 2019 г. РУДН, г. Москва, Россия;
- международная конференция «Modern Methods, Problems and Applications of Operator Theory and Harmonic Analysis IX» (OTHA 2019), 22-25 апреля 2019 года, г. Ростов-на-Дону, Россия.

Публикации

Основные результаты диссертационной работы изложены в 13 печатных работах, в том числе 4 статьи опубликованы в рецензируемых изданиях, индексируемых в МЦБ Scopus/WoS [1—4]; 3 статьи опубликованы в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК РФ [5—7]; 1 статья в рецензируемом научном издании [8]; 5 статьей и тезисов в трудах международных и всероссийских научных конференций [9—13].

Личный вклад

Ле Ань Ньат, работая в команде соавторов, самостоятельно разработал и реализовал ряд основных функций в численном моделировании стационарных псевдоспиновых волн, провел серию численных экспериментов по задачам динамики спинонов на графене, которые описываются уравнением Шрёдингера.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трёх глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 121 страницу с 17 рисунками и 2 таблицами. Список литературы содержит 97 наименований.

Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе приводится обзор состояния и степени разработанности проблемы. Рассмотрены следующие аспекты моделей спиновых волн в графеновых структурах:

– проанализированы возможные теоретические модели, описывающие свойства графеновых моноатомных слоев, образующих некоторые двумерные поверхности, связанные с наличием на этих поверхностях ненулевой функции распределения спиновой плотности, образованной в результате спонтанного нарушения спиновой симметрии валентных электронов атомов углерода на указанных поверхностях;

– рассмотрена модель нелинейного однокомпонентного скалярного поля φ на двумерной поверхности, поверхностная плотность Лагранжиана которой задается в виде:

$$L\{\varphi\} = \frac{1}{2}\left(\partial_\nu\varphi\partial^\nu\varphi\right) - \frac{\lambda}{4}\left(\varphi^2 - \varphi_0^2\right)^2$$

где φ_0 и λ – параметры модели;

– рассмотрена задача вычисления функционала полной энергии системы двух взаимодействующих бризеров вида:

$$H\{F,a,b,c\} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{\left[\partial_x F(x,a,b,c)\right]^2 + \frac{\lambda}{2}\left[F(x,a,b,c)^2 - \varphi_0^2\right]^2\right\},$$

где

$$F(x,a,b,0) = \frac{1}{2}\left[\Phi(x,a) + \Phi(x+b,a)\right]$$

$$F(x,a,b,c) = \frac{1}{2}\left[\Phi(x,a+c) + \Phi(x+b,a+c)\right]$$

здесь $\Phi(x, a)$ рассчитывается по формуле

$$\Phi(x, a) = [\varphi_+(x + a) + \varphi_-(x - a) - \varphi_0], \quad a > 0$$

с $\varphi_0 = 1$ и $a > 0, \quad -\infty < b < +\infty, \quad -a < c < \infty$;

– рассмотрена динамическая модель квантово-механической стационарной волновой функции $\Psi_b(a)$ бризера, в виде решения уравнения Шрёдингера, зависящего от параметра a:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_b}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}a^2} + U\{\Phi, a\}\right]\Psi_b(a) = E\Psi_b(a),$$

где m_b – эффективная масса бризера, равная в рассматриваемом случае сумме масс свободных кинка и антикинка, $U(\Phi, a)$ – потенциальная часть полной энергии бризера, зависящая от "a", E – энергия соответствующего стационарного состояния;

Во второй главе были предложены два точных и приближенных решения для функции распределения спиновой плотности и намагниченности по поверхности графена. Эти решения были проверены на основе имеющихся экспериментальных данных по измерению магнитных свойств графеновых пленок.

Представлен метод Ритца-Галеркина, который используется для численного решения задачи динамики бризера, описываемой уравнением Шрёдингера:

$$-\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} + U(x)\varphi(x) = E\varphi(x).$$

Представлен псевдоспектральный метод, основанный на матрице дифференцирования Чебышёва. Матрица дифференцирования Чебышёва (D) использует сетку Чебышёва-Гаусса-Лобатто, она имеет элементы $\{d_{i,j}^{(1)}\}$:

$$
\begin{aligned}
d_{0,0}^{(1)} &= \frac{n^2}{3}+\frac{1}{6}, \qquad d_{n,n}^{(1)} = -\frac{2n^2+1}{6},\\
d_{i,i}^{(1)} &= -\frac{x_i}{2(1-x_i^2)}, \qquad i=\overline{1,n-1}\\
d_{i,j}^{(1)} &= \frac{(-1)^{i+j}c_i}{x_i-x_jc_j}, \qquad i,j=\overline{1,n-1} \qquad i\neq j
\end{aligned}
$$

и $D^2=\{d_{i,j}^{(2)}\}$ имеет элементы дифференциальной матрицы D^2:

$$
\begin{aligned}
d_{0,0}^{(2)} &= \quad d_{n,n}^{(2)} = \frac{n^4-1}{15},\\
d_{i,i}^{(2)} &= -\frac{(n^2-1)(1-x_i^2)+3}{3(1-x_i^2)^2} && i=\overline{1,n-1},\\
d_{i,j}^{(2)} &= \frac{(-1)^{i+j+1}(2-x_ix_j-x_i^2)}{c_j(1-x_i^2)(x_i-x_j)^2} && i\neq j \quad i,j=\overline{1,n-1},\\
d_{0,j}^{(2)} &= \frac{2(-1)^j(2n^2+1)(1-x_j)-6}{3c_j(1-x_j^2)} && j=\overline{1,n-1},\\
d_{n,j}^{(2)} &= \frac{2(-1)^{n+j}(2n^2+1)(1+x_j)-6}{3c_j(1+x_j^2)} && j=\overline{1,n-1}.
\end{aligned}
$$

где

$$
c_k=\begin{cases}2, & k=0,n\\ 1, & \text{иначе}\end{cases}
$$

Псевдоспектральный метод с использованием матрицы дифференцирования Чебышёва применяется для решения двухточечной краевой задачи в диапазоне $[-1,1]$:

$$
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}u(x)+q(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}u(x)+r(x)u(x)=f(x), \quad u(-1)=\alpha, \quad u(+1)=\beta,
$$

где заданы функции $q(x)$, $r(x)$, $f(x)$ с заданными значениями α и β и точками коллокации $\{x_i\}$ выбранными так, чтобы $1=x_0>x_1>...>x_n=-1$.

Мы знаем, что

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}u_n(x_i) = \sum_{k=0}^{n} D_{i,k}u_n(x_k) \text{ и } \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}u_n(x_i) = \sum_{k=0}^{n}(D^2)_{i,k}u_n(x_k).$$

При использовании матрицы дифференцирования Чебышёва мы разбиваем матрицу D на вспомогательные блоки: сначала мы обрезаем первую строку $\{d_{0,i}^{(1)}\}$ и последнюю строку $\{d_{n,i}^{(1)}\}$ с помощью $i \in \overline{0,n}$, затем мы разбиваем эту матрицу на три матрицы

$$\underbrace{\begin{pmatrix} d_{1,0}^{(1)} \\ d_{2,0}^{(1)} \\ \vdots \\ d_{n-1,0}^{(1)} \end{pmatrix}}_{e_0^{(1)}} \underbrace{\begin{pmatrix} d_{1,1}^{(1)} & d_{1,2}^{(1)} & \cdots & d_{1,n-1}^{(1)} \\ d_{2,2}^{(1)} & d_{2,2}^{(1)} & \cdots & d_{2,n-1}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n-1,1}^{(1)} & d_{n-1,2}^{(1)} & \cdots & d_{n-1,n-1}^{(1)} \end{pmatrix}}_{E^{(1)}} \underbrace{\begin{pmatrix} d_{1,n}^{(1)} \\ d_{2,n}^{(1)} \\ \vdots \\ d_{n-1,n}^{(1)} \end{pmatrix}}_{e_n^{(1)}}.$$

Матричные блоки мы можем записать в виде $e_0^{(1)} = \{d_{i,0}^{(1)}\}$, $E^{(1)} = \{d_{i,j}^{(1)}\}$ и $e_n^{(1)} = \{d_{i,n}^{(1)}\}$ с $i,j = \overline{1,n-1}$.

Аналогично, мы разбиваем матрицу D^2, так что блоки представляем в виде $e_0^{(2)} = \{d_{i,0}^{(2)}\}$, $E^{(2)} = \{d_{i,j}^{(2)}\}$ и $e_n^{(2)} = \{d_{i,n}^{(2)}\}$ с $i,j = \overline{1,n-1}$

Псевдоспектральный метод с использованием матрицы дифференцирования Чебышёва применяется для решения задачи динамики бризера, описываемой зависящим от параметра уравнением Шрёдингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_b}\frac{d^2}{da^2} + U\{\Phi, a\}\right]\Psi_b(a) = E\Psi_b(a), \quad \Psi_b(\pm 1) = 0.$$

Это уравнение можно записать в матричной форме:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_b}E^{(2)} + U_a\right]\Psi_b = E\Psi_b,$$

где Ψ_b обозначает векторы с элементами $\{\Psi_b(a_i)\}$, а U_a обозначает диагональную матрицу с элементами $\{U\{\Phi, a_i\}\}$, $i = \overline{1,n-1}$.

Чтобы найти энергию E, нам просто нужно найти собственные значения матрицы $M_b = -\frac{\hbar^2}{2m_b}E^{(2)} + U_a$.

В третьей главе исследуются такие пространственно локализованные нелинейные спиновые конфигурации плотности валентных электронов на поверхности графена, как кинки, антикинки, а также квазисвязанные метастабильные состояния взаимодействующих кинков и антикинков, которые являются бризерами. Спектр таких бризеров исследуется. Показывается, что при определенных условиях этот спектр имеет дискретный сектор, что, в свою очередь, позволяет говорить о возможности когерентной квантовой генерации спиновых волн в графеновых структурах, что важно с точки зрения практического применения в наноэлектронике и спинтронике.

Мы исследуем модель ферромагнетизма графена методом Ритца, используя функции Эрмита в качестве координатных функций. Метод Ритца сводит задачу на оси дифференциального уравнения к задаче о собственных значениях и собственных векторах соответствующей матрицы Ритца.

Классическая полевая модель, описывающая спонтанно нарушенную симметрию, является нелинейной. Среди нелинейных моделей достаточно хорошо изучена простейшая модель $\lambda\varphi^4$. Авторы работ (D. D. Grachev, 2010) (D. D. Grachev, 2011) утверждают, что в первом приближении с ее помощью можно описать характеристики спиновых волн, их спектры в графене, ферромагнитную доменную структуру и другие характеристики, важные для практического применения.

Модель имеет точные решения в виде кинка и антикинка и их квазисвязанные состояния (бризеры), которые получаются численно. Вычисленная энергия взаимодействия кинк-антикинк (D. D. Grachev, 2010) (D. D. Grachev, 2011) используется для численного решения уравнения Шрёдингера при моделировании квантовой динамики бризеров, лежащего в основе описания спиновых волн. В модели имеются квазисвязанные кинк-антикинк состояния, имеющие дискретный спектр.

Рассматривается в качестве примера нелинейная модель $\lambda\varphi^4$ с целью продемонстрировать результаты качественного и численного исследования спиновых волн в однослойной пленке графена. Лагранжиан нелинейной модели скалярного поля на двумерной поверхности выбирается в виде:

$$L\{\varphi\} = \frac{1}{2}\left(\partial_\nu \varphi . \partial^\nu \varphi\right) - \frac{\lambda}{4}\left(\varphi^2 - \varphi_0^2\right)^2,$$

где $\nu = 0, 1, 2$, $\varphi = \varphi(x, y, t)$, $\varphi_0 > 0$ и $\lambda > 0$. Функция поля здесь пропорциональна двумерной плотности спина. Существуют стационарные решения φ_0, а также кинк-антикинк решения $\varphi_\pm(x) = \pm\varphi_0 \tanh\left(\sqrt{\frac{\lambda\varphi_0^2}{2}}x\right)$.

Исследуем систему взаимодействующих кинков и антикинков, расположенных на расстоянии один от другого. Для этого выбрана функция поля вида:

$$\Phi(x, a) = \left[\varphi_+(x + a) + \varphi_-(x - a) - \varphi_0\right], \quad a > 0.$$

Мы видим, что эта функция поля для малых значений a пространственно локализована вблизи $x = 0$ и имеет следующие асимптотики:

$$\begin{aligned}
&\Phi(x, +\infty) = -\varphi_0, \\
&\Phi(+\infty, a) = -\varphi_0, \quad \Phi(-\infty, a) = -\varphi_0, \\
&\Phi'_x(+\infty, a) = 0 \quad , \quad \Phi'_x(-\infty, a) = 0 \quad .
\end{aligned}$$

Рассмотрим функцию Гамильтона системы:

$$H\{\Phi, a\} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left\{\left[\partial_\nu \Phi(x, a) \partial^\nu \Phi(x, a)\right] + \frac{\lambda}{2}\left[\Phi(x, a)^2 - \varphi_0^2\right]^2\right\}.$$

Для квантово-механической стационарной волновой функции бризера записываем уравнение Шрёдингера, зависящее от параметра a:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_b}\frac{d^2}{da^2} + U\{\Phi, a\}\right]\Psi_b(a) = E\Psi_b(a),$$

здесь m_b – эффективная масса бризера, равная сумме масс кинка и антикинка, $U\{\Phi, a\}$ – потенциальная часть полной энергии бризера, в зависимости от a, E – энергия квантово-механического состояния.

Решаем уравнение Шрёдингера методом Ритца, используя функции Эрмита в качестве координатных функций. Метод Ритца сводит задачу на оси дифференциального уравнения к задаче на собственные значения и собственные вектора матрицы Ритца, рассчитанной по формулам:

$$M_{ij}\{\lambda, \varphi_0\} = \left\langle \psi_i \middle| \left(-\frac{\hbar^2}{2m\{\lambda, \varphi_0\}} \frac{d^2}{da^2} + V_{\lambda, \varphi_0}(a) \right) \middle| \psi_j \right\rangle,$$

где ψ_i – функции Эрмита. Расчет матричных элементов и решений производился на компьютере.

В диссертации строится другое численное решение для нелинейных спиновых волн в графеновых структурах псевдоспектральным методом Чебышёва. Этот метод сводит задачу на оси дифференциального уравнения к задаче о собственных значениях и собственных векторах для матрицы, содержащей в качестве слагаемого матрицу дифференцирования Чебышёва.

На основе теории функционала плотности и методов теории возмущений, в работе (Grachev, 2014) предложена физически обоснованная нелинейная модель взаимодействующих безмассовых фермионов Дирака в графеновых структурах, пригодная для практического применения. Эта модель описывает распределение спиновой плотности (s) валентных электронов атомов углерода в графеновых структурах. Она соответствует уравнению нелинейной модели: $s'' = \lambda(s^2 - s_0^2)s$, где s_0 – локальная плотность спинов нулевого порядка, λ –константа самодействия.

Рассмотрим плотность гамильтониана указанной модели, имеющую вид:

$$H[s] = (\partial_\nu s \partial^\nu s)/2 + \lambda(s^2 - s_0^2)/4, \quad \nu = 0, 1, 2.$$

Приближенные решения этого уравнения ищем в виде:

$$\Phi(x,a)=\{s_+(x+a)+s_-(x-a)-s_0\},$$

где a – параметр, а решения допускают следующие асимптотики:

$$\left\{\begin{matrix}\Phi(x,+\infty)=+s_0,\\ \Phi(+\infty,a)=\Phi(-\infty,a)=-s_0\\ \Phi'_x(+\infty,a)=\Phi'_x(-\infty,a)=0\\ \Phi(x,-\infty)=-3s_0;\end{matrix}\right\},$$

для модели A "прозрачных" пар кинк–антикинк, и

$$\left\{\begin{matrix}\Phi(x,+\infty)=+s_0,\\ \Phi(+\infty,a)=\Phi(-\infty,a)=-s_0\\ \Phi'_x(+\infty,a)=\Phi'_x(-\infty,a)=0\\ \Phi(x,0)=-s_0;\end{matrix}\right\},$$

для модели B отталкивающихся при сближении кинка и антикинка.

Мы можем написать Гамильтониан для полевой функции в форме $\Phi(x,a)$, удовлетворяющей уравнению $s''=\lambda(s^2-s_0^2)s$, в виде:

$$H\left\{\Phi,a\right\}=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}dx\left\{[\Phi'_x(x,a)]^2+\frac{\lambda}{2}[\Phi(x,a)^2-s_0^2]^2\right\}.$$

Тогда сумма масс-энергетического эквивалента свободных кинка и антикинка равна потенциальной энергии бризера в зависимости от a. Данная потенциальная энергия $U\{\Phi,a\}$ равна минимальному значению функции Гамильтона $H\{\Phi,a\}_{min}$. При этом масса бризера равна $m[\lambda,s_0]=\frac{4\sqrt{2\lambda}}{3}s_0^3$.

Уравнение Шрёдингера для квантово-механической волновой функции $\psi(a)$ стационарного бризерного состояния с соответствующей собственной энергией E имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2\widetilde{m}\left\{\lambda,s_0\right\}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}a^2}\psi(a)+U(\Phi,a)\psi(a)=E\psi(a)$$

где $\widetilde{m}\{\lambda, s_0\} = m\{\lambda, s_0\}/c^2$ – эффективная масса бризера, c – скорость света, $U(\Phi, a)$ – потенциальная энергия, $\psi(a)$ – волновая функция и E – энергия системы.

Используя псевдоспектральный метод Чебышёва, преобразуем это уравнение в матричную форму:$\left(-E^{(2)} + G\right)\psi = 2\overline{E}\psi$, где $\hbar = c = 1$ и G – диагональная матрица порядка $(n-1)$ со следующими элементами: $\left\{\frac{8\sqrt{2\lambda}s_0^3}{3}U(\Phi, a_i)\right\}, \quad i = \overline{1, n-1}$.

Таким образом, упрощается поиск энергии E. Мы рассчитали приближенные значения энергии для моделей A и B в программе Matlab.

Кроме того, мы используем псевдоспектральный метод Чебышёва для построения численных моделей потенциальной энергии бризера в зависимости $U(\Phi, a)$ аппроксимируя Морзе потенциал для модели A и модифицированный потенциал Пёшля-Теллера для модели B.

Конкретно, для модели A потенциал $U(\Phi, a)$ может быть аппроксимирован потенциалом Морзе:

$$U(\Phi, a) \approx U_M(a) = U_{\max}\left(1 + e^{-2\beta a} - 2e^{-\beta a}\right)$$

где $\beta = 1.6741741\sqrt{\lambda}s_0$.

Для модели B потенциал $U(\Phi, a)$ может быть аппроксимирован модифицированным потенциалом Пёшля-Теллера

$$U(\Phi, a) \approx U_{PT}(a) = U_{\max} - \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha a)},$$

где $U_0 = \alpha^2\gamma(\gamma - 1)/2$ с $\alpha = 1.330718\sqrt{\lambda}s_0$ и $\gamma = 4/5 + 2.003931\sqrt{s_0 + 0.062255}$.

Численное моделирование проводится на основе псевдоспектрального метода Чебышёва для приближенной энергии потенциала Морзе и модифицированного потенциала Пёшля-Теллера в матричной форме:$\left(-\frac{1}{2m}E^{(2)} + U_M\right)\psi = E_M\psi$ и $\left(-\frac{1}{2m}E^{(2)} + U_{PT}\right)\psi = E_{PT}\psi$, где U_M и U_{PT} – диагональная матрица порядка $(n-1)$ со следующими элементами $U_{\max}(1 + e^{-2\beta a_i} - 2e^{-\beta a_i})$ и $\left\{U_{\max} - \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha a_i)}\right\}$ с $i = \overline{1, n-1}$.

В заключении приводятся результаты, полученные в диссертации.

Приложение А описывает программу численного моделирования для уравнения Шредингера с потенциалом в графеновых структурах с помощью Matlab версии 2016a.

Приложение В описывает программы численного моделирования для аппроксимации потенциальной энергии бризера с помощью Matlab версии 2016a.

Список работ, в которых опубликованы основные положения диссертации

1. *Nhat L. A.* Pseudospectral methods for nonlinear pendulum equations // Journal of Siberian Federal University. Mathematics and Physics. — 2019. — Т. 12, № 1. — С. 79—84. — DOI: 10.17516/1997-1397-2019-12-1-79-84.
2. *Nhat L. A.* Pseudospectral method for second-order autonomous nonlinear differential equations // The Bulletin of Udmurt University. Mathematics. Mechanics. Computer Science. — 2019. — Т. 29, № 1. — С. 61—72. — DOI: 10.20537/vm190106.
3. *Nhat L. A.* Numerical solution for the Schrodinger equation with potential in graphene structures // Nanosystems-physics chemistry mathematics. — 2019. — Т. 29, № 2. — С. 124—130. — DOI: 10.17586/2220-8054-2019-10-2-124-130.
4. *Nhat L. A.*, *Kulyabov D. S.*, *Lovetskiy K. P.* A new algorithm used the Chebyshev pseudospectral method to solve the nonlinear second-order Lienard differential equations // J. Phys.: Conf. Ser. — 2019. — Т. 1368. — С. 8. — DOI: 10.1088/1742-6596/1368/4/042036.

5. *Kulyabov D. S.*, *Lovetskiy K. P.*, *Nhat L. A.* Simple model of nonlinear spin waves in graphene structures // RUDN J. of MIPh. — 2018. — T. 26, № 3. — C. 224—251. — DOI: `10.22363/2312-9735-2018-26-3-244-251`.

6. *Nhat L. A.* Chebyshev pseudospectral method computing eigenvalues for ordinary differential equations with homogeneous Dirichlet boundary condition // Science and Business Ways of Development. — 2019. — T. 92, № 2. — C. 167—173.

7. Numerical modeling of stationary pseudospin waves on a graphene monoatomic films / L. A. Nhat, K. P. Lovetskiy, L. A. Sevastianov, D. S. Kulyabov // Discrete and continuous models and applied computational science. — 2019. — T. 27, № 4. — C. 365—377. — DOI: `10.22363/2658-4670-2019-27-4-365-377`.

8. *Nhat L. A.* Using differentiation matrices for pseudospectral method solve duffing oscillator // JNSA. — 2018. — T. 11, № 12. — C. 1331—1336. — DOI: `10.22436/jnsa.011.12.04`.

9. *Ньат Л. А.* Псевдоспектральный метод в приложении к решению дифференциального уравнения Бесселя // XXXI-International Scientific Conference on Mathematical Methods in Technics and Technologies MMTT-31. T. 1. — Санкт-Петербург, Россия, сент.2018. — С. 11—13. — ISBN 2587-9049.

10. *Nhat L. A.* Pseudospectral Chebyshev method finds approximate solutions of the Mathieu's equations // IX Conference (with international participation) "Information and Telecommunication Technologies and Mathematical Modeling of High-Tech Systems". — RUDN University, Moscow, Russia, 04.2019. — C. 473—479. — ISBN 978-5-209-09356-5.

11. *Nhat L. A.*, *Hieu L. T.* Chebyshev pseudospectral methods solve the Sturm-Lowville differential equations // Ninth International Scientific Conference "Modern Methods, Problems and Applications

of Operator Theory and Harmonic Analysis IX". — Rostov-on-Don, Russia, 04.2019. — C. 66. — ISBN 978-5-6040260-1-4.

12. *Nhat L. A.*, *Kulyabov D. S.*, *Lovetskiy K. P.* A new algorithm used Chebyshev pseudospectral method to solve nonlinear second-order Lienard differential equations // V International Conference on Information Technology and Nanotechnology (ITNT-2019). T. 3. — Samara, Russia, 05.2019. — C. 489—496. — ISBN 978-5-88940-151-3.

13. *Ньат Л. А.* Псевдоспектральные методы решения нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка // Фундаментальные и прикладные разработки в области технических и физикоматематических наук // Сборник научных статей по итогам работы международного круглого стола. — Казань, Россия, май.2018. — С. 146—148. — ISBN ISBN 978-5-6041153-2-9.

Ле Ань Ньат

Численное моделирование нелинейных спиновых волн в графеновых структурах

Проведено численное моделирование нелинейных спиновых волн в графеновых структурах псевдоспектральным методом Чебышёва и методом Ритца-Галеркина. Кроме того, реализовано численное моделирование нелинейных спиновых конфигураций плотности валентных электронов на поверхности графеновой пленки, таких как кинки, антикинки, бризеры и их взаимодействия. Разработаны численные методы моделирования потенциальной энергии взаимодействующих метастабильных состояний (бризеров) псевдоспиновых волн на поверхности графеновой пленки. Численно исследован дискретный спектр взаимодействия бризеров с целью установления инверсной заселенности уровней метастабильных состояний псевдоспиновых волн на поверхности графеновых пленок различной топологии.

Le Anh Nhat

Numerical simulation of nonlinear spin waves in graphene structures

Numerical simulation of nonlinear spin waves in graphene structures is carried out using the pseudospectral Chebyshev method and the Ritz-Galerkin method. In addition, a numerical simulation of nonlinear spin configurations of the valence electron density on the surface of a graphene film, such as kinks, antikinks, breathers and their interactions, has been implemented. Numerical methods are developed for modeling the potential energy of interacting metastable states (breathers) of pseudospin waves on the surface of a graphene film. The discrete spectrum of interaction of breathers is investigated numerically in order to establish the inverse population of the levels of metastable states of pseudospin waves on the surface of graphene films of different topology.

Подписано в печать 13.11.2020. Формат 60×84/16.
Тираж 100 экз. Усл. печ. л. 2. Заказ №   .

Типография Издательства РУДН
115419, ГСП-1, г. Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3