

# ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК С УЧЕТОМ МНОГОЧАСТИЧНОГО КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ГРАФЕНОВОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

*Х. В. Седракян<sup>a</sup>, А. Г. Казарян<sup>a\*</sup>, Б. Р. Авчян<sup>a</sup>, Г. А. Мусаелян<sup>b</sup>, Т. М. Маркосян<sup>c</sup>*

<sup>a</sup> *Центр физики сильных полей, Ереванский государственный университет  
0025, Ереван, Армения*

<sup>b</sup> *Национальный центр онкологии им. В. А. Фанарджяна  
0052, Ереван, Армения*

<sup>c</sup> *Институт синхротронных исследований «КЕНДЛ»  
0022, Ереван, Армения*

Поступила в редакцию 7 марта 2023 г.,  
после переработки 7 марта 2023 г.  
Принята к публикации 11 марта 2023 г.

Процессы многофотонного возбуждения и генерации высших гармоник рассматриваются с использованием микроскопической квантовой теории нелинейного взаимодействия сильного когерентного электромагнитного излучения с прямоугольной графеновой квантовой точкой с зигзагообразным краем с числом атомов больше 80. Использовано динамическое приближение Хартри–Фока для изучения нелинейного взаимодействия лазерного излучения с графеновой квантовой точкой в режиме неадиабатического многофотонного возбуждения. Многочастичное кулоновское взаимодействие описано в расширенном приближении Хаббарда. Определены боковой размер, форма прямоугольной графеновой квантовой точки и ориентация электромагнитного волнового поля в плоскости графеновой квантовой точки с зигзагообразным краем в процессе генерации высших гармоник, что позволяет увеличить энергию фотона отсечки и квантовый выход более высоких гармоник.

DOI: 10.31857/S0044451023070052  
EDN:GDWVZE

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовые электродинамические явления, вызываемые сильным когерентным электромагнитным излучением, такие как многофотонная генерация высших гармоник (ГВГ) и родственные процессы, по нелинейным каналам в двумерных атомных системах-наноструктурах представляют большой интерес в физике низких энергий и нанооптоэлектронике благодаря своим уникальным физическим свойствам таких двумерных наносистем атомной толщины [1–9]. Систематически изучалась ГВГ в трехмерных кристаллах [10–15] и низкоразмерных наноструктурах, таких как графен и его производные [16–38], монослойные дихалькогениды переходных металлов [39–41], гексагональный нитрид бора [42], топологический изолятор [43, 44], монослой-

ный черный фосфор [45], изогнутые двумерные гексагональные наноструктуры [46], твердые тела [47, 48], а также в других двумерных системах [49–51]. Двумерные наносистемы позволяют разрабатывать важные технологические приложения [52]. Одним из таких примеров является квантовый каскадный лазер [53], в котором используются физические явления в двумерных системах, например, квантовый эффект Холла [8]. В качестве нелинейной среды особый интерес представляют графеновые квантовые точки (ГКТ) [52–56], например, графеновые наноленты [1, 57–68]. Это могут быть замкнутые и выпуклые структуры, такие как фуллерены различной базовой симметрии, а также плоские структуры различных латеральных размеров, форм, ребер и уровней легирования [57–59]. Как известно, симметрия графеновой подрешетки в ГКТ может контролироваться латеральным размером, формой и типом ребра ГКТ [56–70]. Поведение ГКТ количественно различается для наноструктур с зигзагообразными и

\* E-mail: amarkos@ysu.am

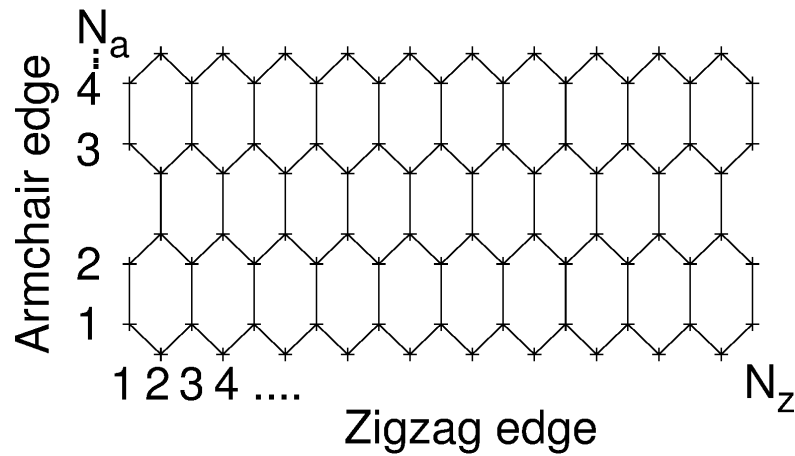


Рис. 1. Геометрическая структура прямоугольной ГКТ с зигзагообразным краем вдоль оси  $x$  с  $N = 84$  атомами при  $N_a = 4$ ,  $N_z = 21$ . Расстояние между ближайшими соседними атомами равно  $b \simeq 1.42 \text{ \AA}$

креслообразными краями [71, 72]. Таким образом, ГКТ обладают более богатыми электронными свойствами, чем неограниченный в пространстве графен [73–75]. Более того, они представляют особый интерес, поскольку их нелинейно-оптическими свойствами можно управлять [1]. Неограниченный в пространстве двумерный графен, вытянутый в узкую ленту, приводит к заключению носителей в квазиодномерные графеновые наноленты (с различной топологией в зависимости от формы ленты) [25].

Важным преимуществом ГКТ перед графеновыми нанолентами [67, 76–78] является полное ограничение квазичастиц в пространстве. Для ограниченной квантовой системы из-за отсутствия трансляционной симметрии спектр состоит из дискретных энергетических уровней, а не зон. Одним из преимуществ ограниченных квантовых систем является возможность изменять их энергетические спектры и волновые функции, регулируя их размер [79, 80] или внешние параметры, такие как напряжение на затворе или магнитное поле [81–83]. На спектры ГВГ в ГКТ могут влиять условия ограничения — латеральный размер и параметры связи в ограниченных ГКТ [56, 65]. Ожидается, что эффективность ГВГ может вырасти с увеличением размерности ограничения, поскольку последнее ограничит распространение электронного волнового пакета [84].

В настоящей работе рассматривается многофотонная ГВГ в прямоугольной ГКТ — плоская квазиодномерная ГКТ прямоугольной формы [85–89] разного латерального размера с зигзагообразным ребром на вытянутой стороне, индуцированная интенсивным когерентным излучением в нелинейном режиме. Многочастичное кулоновское взаимодействие учитывается в обобщенном приближении Хаббарда [58, 59, 90]. Отметим, что рассматриваемые ГКТ,

в которых возможна оптимизация оптоэлектронных свойств, в настоящее время доступны на практике [57, 66]. Численно решается замкнутая система дифференциальных уравнений для одночастичной матрицы плотности при многофотонном взаимодействии прямоугольной ГКТ с сильным лазерным полем.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 представлены базовая модель и результаты численного исследования многофотонного возбуждения и генерации гармоник в прямоугольной ГКТ разного поперечного размера с зигзагообразным ребром на вытянутой стороне. В разд. 3 приведены выводы. В Приложении представлена система уравнений для одночастичной матрицы плотности с учетом многочастичного кулоновского взаимодействия.

## 2. БАЗОВАЯ МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Исследуем прямоугольную ГКТ с зигзагообразным ребром на вытянутой стороне в процессе ГВГ плоской квазиоднохроматической электромагнитной волны линейной поляризации, распространяющейся перпендикулярно плоскости  $xy$  прямоугольной ГКТ, с однородной квазипериодической напряженностью электрического поля

$$\mathbf{E}(t) = \hat{\mathbf{e}} E_0 f(t) \cos \omega t, \quad (1)$$

где  $\hat{\mathbf{e}}$  — единичный вектор поляризации в плоскости  $xy$ ,  $E_0$  и  $\omega$  — соответственно амплитуда и частота волны,  $f(t) = \sin^2(\pi t/\mathcal{T})$  — медленно меняющаяся огибающая,  $\mathcal{T} = 40\pi/\omega$  — длительность импульса. На рис. 1 показана геометрическая структура нульмерной прямоугольной ГКТ в плоскости  $xy$ . Ось  $x$  находится в плоскости рисунка и направлена гори-

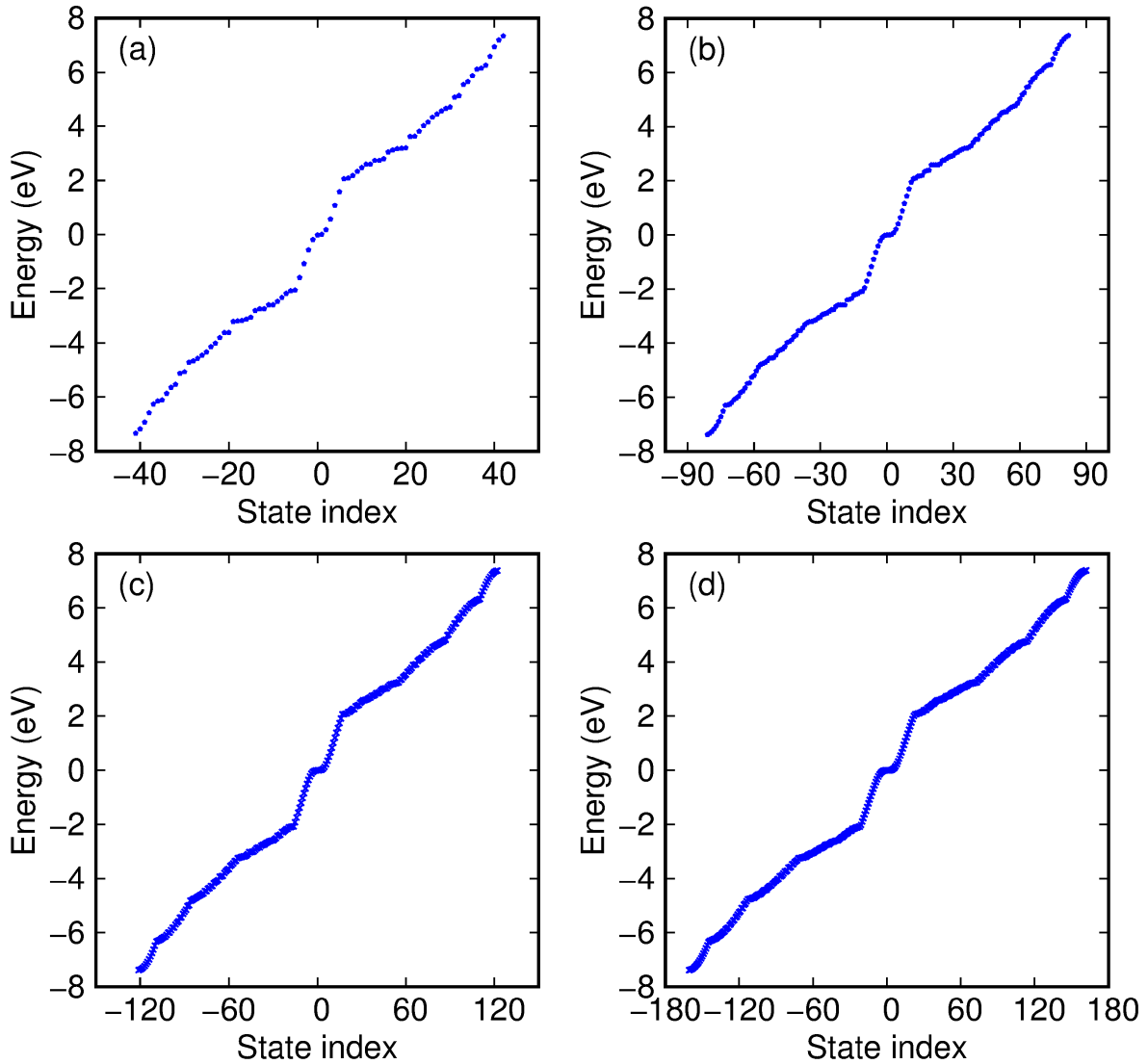


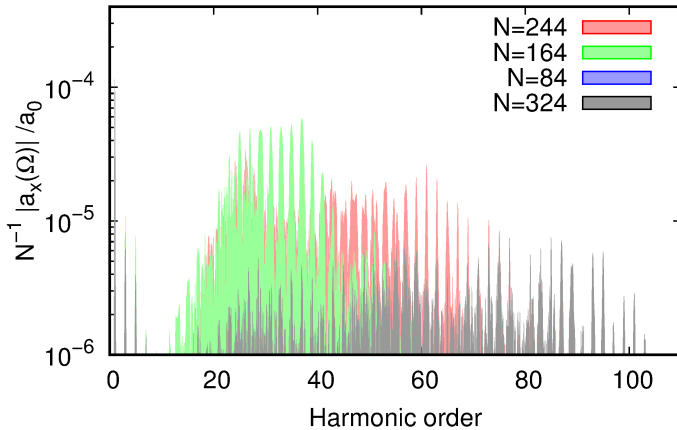
Рис. 2. Собственные энергии в прямоугольной ГКТ для зигзагообразной кромки вдоль оси  $x$  для различного числа атомов  $N$ :  $a - 84 (N_z = 21)$ ;  $b - 164 (N_z = 41)$ ;  $c - 244 (N_z = 61)$ ;  $d - 324 (N_z = 81)$ . Для всех случаев  $N_a = 4$

зонтально вправо. Вдоль оси  $x$  (ребро «кресла») и оси  $y$  (ребро «зигзага») расположены соответственно  $N_a$  и  $N_z$  атомов углерода. Все атомы углерода упакованы в гексагональную решетку. Общее число атомов углерода равно  $N = N_a N_z$ . Отметим, что для нанолент с ограниченной шириной ребра кресла электронная структура и энергетический спектр квазичастиц при  $N_a \ll N_z$ , когда прямоугольная ГКТ переходит в наноленту, критически зависят от ширины прямоугольной ГКТ по оси  $y$  [68], что определяет, является ли прямоугольная ГКТ проводником или изолятором. По аналогии со случаем, рассмотренным в работе [68], наша прямоугольная ГКТ является изолятором (см. рис. 1).

Таким образом, мы используем микроскопическую нелинейную квантовую теорию процесса ГВГ в сильной электромагнитной волне в прямоугольной

ГКТ по модели сильной связи [57, 91] для гамильтониана  $\hat{H}$ , учитывая кулоновское взаимодействие в обобщенном приближении Хаббарда. Полный гамильтониан по эмпирической модели сильной связи [91] приведен в Приложении. С помощью численной диагонализации найдем собственные состояния  $\psi_\mu(i)$  и собственные энергии  $\varepsilon_\mu$  ( $\mu = 0, 1, \dots, N - 1$ ). Результаты численной диагонализации показаны на рис. 2 для различных латеральных размеров прямоугольной ГКТ. Видно, что без туннелирования энергетические уровни вырождены, а плотность состояний увеличивается с ростом числа атомов решетки. Как будет видно далее, это напрямую влияет на выход ГВГ.

Гамильтониан сильной связи описывает системы конечного размера, ограничивая матричные элементы  $t_{ij}$  туннелирования между атомами внутри кван-



**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Спектры излучения ГВГ в режиме сильного поля через преобразование Фурье дипольного ускорения  $N^{-1}|a_x(\Omega)|/a_0$  (в условных единицах) в зависимости от номера гармоники для прямоугольной ГКТ с зигзагообразным краем на вытянутой стороне для различного числа  $N$  атомов. Вероятность релаксации  $\hbar\gamma = 50$  мэВ. Частота линейно поляризованной волны  $\omega = 0.1$  эВ/ $\hbar$ , напряженность волнового поля  $E_0 = 0.1$  В/Å при фиксированном угле  $\theta = 0$ . Спектры показаны для умеренных типичных энергий ЭЭВ  $U = 3$  эВ,  $V = 0.9$  эВ

товой точки. Ненулевые матричные элементы гамильтониана сильной связи, заданные первым членом в уравнении (6) (см. Приложение), соответствуют матричному элементу туннелирования  $t_{ij}$  между энергетическими состояниями в соседних узлах. Второй член в (6) представляет собой гамильтониан  $\hat{H}_{ee}$  кулоновского электрон-электронного взаимодействия (ЭЭВ) в приближении Хаббарда, в котором игнорируются все элементы матрицы кулоновского рассеяния за исключением членов локального взаимодействия (порядка  $U$ ) между электронами со спинами вверх и вниз, занимающими одну и ту же позицию  $i$  (спин  $\bar{\sigma}$  противоположен по поляризации спину  $\sigma$ ). Операторы рождения  $c_{i\sigma}^\dagger$  и уничтожения  $c_{i\sigma}$  удовлетворяют правилам антикоммутации

$$\{c_{i\sigma}c_{j\sigma}\} = \{c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}^\dagger\} = 0, \quad \{c_{i\sigma'}c_{j\sigma'}^\dagger\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'},$$

которые гарантируют антисимметрию многочастичных состояний. Квантовая динамика прямоугольной ГКТ в сильной электромагнитной волне с периодическим возбуждением определяется замкнутой системой дифференциальных уравнений (8) для матрицы плотности (см. Приложение), которую необходимо решать при определенных начальных условиях. Мы строим матрицу плотности  $\rho_{0ij}^{(\sigma)}$  через заполнение электронных состояний в валентной зоне в соответствии с распределением Ферми – Дирака при

нулевой температуре:

$$\rho_{0ij}^{(\sigma)} = \sum_{\mu=N/2}^{N-1} \psi_\mu^*(j) \psi_\mu(i), \quad (2)$$

где  $\psi_\mu(i)$  — функция собственных энергетических состояний гамильтониана  $\hat{H}_0$  (6). Для матрицы плотности мы решаем зависящие от времени уравнения движения (8) (см. Приложение), численно интегрируя их с помощью стандартного алгоритма Рунге – Кутты четвертого порядка.

Спектр излучения гармоник определяется преобразованием Фурье  $\mathbf{a}(\Omega)$  дипольного ускорения

$$\frac{\mathbf{a}(t)}{a_0} = \frac{d^2\mathbf{d}/dt^2}{a_0}. \quad (3)$$

Дипольный момент определяется выражением

$$\mathbf{d}(t) = \left\langle \sum_{i\sigma} \mathbf{r}_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right\rangle \quad (4)$$

и нормирован на число  $N$  атомов решетки. Здесь  $a_0 = \bar{\omega}^2 d_0$ , где  $\bar{\omega} = 1$  эВ/ $\hbar$  и  $d_0 = 1$  Å. Мощность, излучаемая на данной частоте, пропорциональна  $|a(\Omega)|^2$ . Введем угол  $\theta$  между вектором поляризации  $\hat{\mathbf{e}} = \{\cos\theta, \sin\theta\}$  и осью  $x$ , направленной по вытянутому краю (см. рис. 1). Вероятность релаксации принята  $\hbar\gamma = 50$  мэВ. Энергия локального кулоновского отталкивания равна  $U \simeq 3$  эВ (см. Приложение). Энергия кулоновского отталкивания между узлами принята  $V \simeq 0.9$  эВ. Энергия переноса между ближайшими соседними атомами  $t_{ij} = 2.7$  эВ. Для выяснения основных аспектов многофотонной ГВГ в прямоугольной ГКТ будем считать, что частота возбуждения  $\omega = 0.1$  эВ/ $\hbar$ , что значительно меньше характерных масштабов  $t_{ij}$ ,  $U$ ,  $V$ . Рассмотрим происхождение ГВГ в квантовой точке. Есть два вклада в ток: электронно-дырочные переходы в незанятых/занятых состояниях и рождение пар электрон-дырка (переходы из занятых состояний в незанятые) и последующая рекомбинация. Первые переходы дают вклад только в низшие гармоники и аналогичны внутризонному току в полупроводнике, тогда как последний вносит основной вклад в высокочастотную часть, соответствующую межзонному току, представляющему собой рекомбинацию/рождение электронно-дырочных пар. Эта картина аналогична ГВГ в твердотельных системах.

На рис. 3 представлен определяемый величиной  $|a_x(\Omega)|$  спектр ГВГ в прямоугольной ГКТ различных латеральных размеров с зигзагообразным ребром на вытянутой стороне. Линейно поляризованное

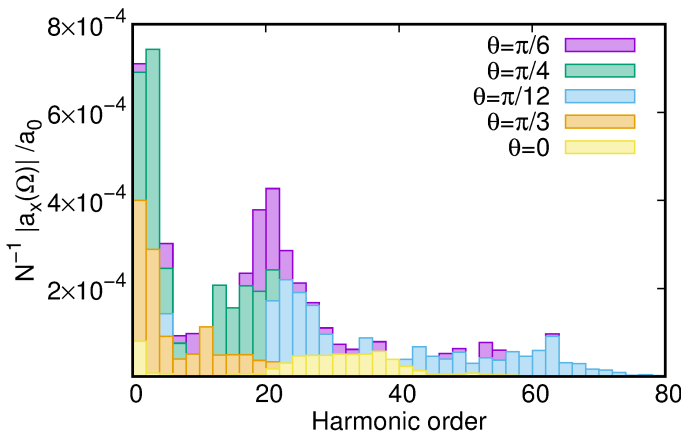


Рис. 4. (В цвете онлайн) То же, что и на рис. 3, но для разных углов  $\theta$ , составленных электрическим полем и осью  $x$  в плоскости прямоугольной ГКТ с  $N = 164$  атомами

электромагнитное поле берется при угле поляризации  $\theta = 0$ ,  $E_0 = 0.1 \text{ В/\AA}$ ,  $\omega = 0.1 \text{ эВ}/\hbar$ . Энергии ЭЭВ составляют  $U \simeq 3 \text{ эВ}$ ,  $V \simeq 0.9 \text{ эВ}$ . Появление нечетных гармоник в спектре ГВГ связано с сохранением инверсионной симметрии в прямоугольной ГКТ, как и в неограниченном в пространстве графене [1, 55]. На рис. 3 мы видим непертурбативное поведение спектров ГВГ со структурой многократных плато. Это является следствием интерференции двух разных вкладов, внутризонного и межзонного. Как видно на рис. 3, доминирующее плато смещается в сторону более высоких частот с увеличением числа атомов, а затем этот процесс подавляется. Это согласуется с энергетическими спектрами на рис. 2, в которых с увеличением числа атомов решетки появляются новые более высокие энергетические состояния с возрастающей плотностью состояний. Но выход ГВГ для фиксированной интенсивности волны подавляется при дальнейшем увеличении числа атомов прямоугольной ГКТ. В частности, как показано на рис. 3, при  $N = 164$ ,  $N = 244$  и  $N = 324$  наблюдается эффективная генерация гармоник с 10-й по 60-ю, с 20-й по 90-ю и с 20-й по 100-ю соответственно.

Прямоугольная ГКТ также имеет сильный анизотропный нелинейный отклик, зависящий от ориентации электромагнитного волнового поля относительно вытянутой стороны [56]. Для прямоугольной ГКТ при  $\theta = 0$  и  $\theta = \pi/2$  направление поляризации гармоники совпадает с направлением поляризации падающей волны. При других углах  $0 < \theta < \pi/2$  появляются гармоники с векторами поляризации, перпендикулярными полю волны накачки. Для выявления зависимости спектров ГВГ от ориентации

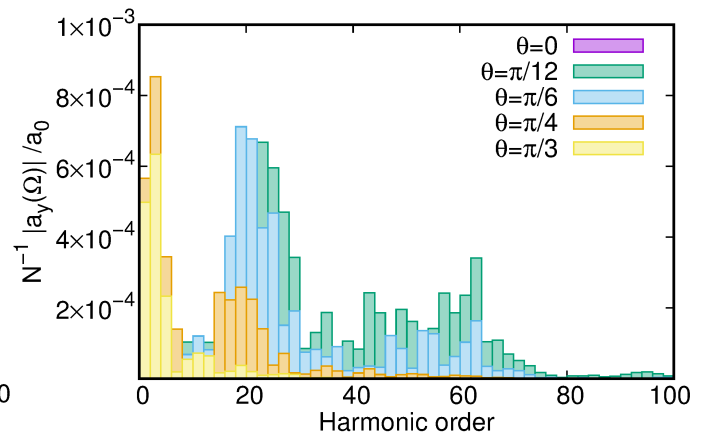


Рис. 5. (В цвете онлайн) То же, что и на рис. 4, но для компоненты  $a_y$

электромагнитного поля на рис. 4 и 5 показаны спектры ГВГ при различных значениях угла  $\theta$  волнового поля накачки относительно оси  $x$  в прямоугольной ГКТ с зигзагообразным краем при  $N = 164$  для компонент  $|a_x|$  и  $|a_y|$  соответственно. В случае неограниченного в пространстве графена, в отличие от изотропного спектра ГВГ на низкочастотной волне накачки, спектр анизотропен на высокочастотной волне, когда из-за симметрии углеродной гексагональной ячейки оптический отклик относительно поляризации ведомого поля является периодическим с периодом  $\pi/3$  [92]. Для прямоугольной ГКТ мы имеем сильную анизотропию. В частности, для процесса ГВГ в случае первых восьми гармоник для  $y$ -компоненты предпочтительны углы  $\pi/12 \lesssim \theta \lesssim \pi/6$ , а для  $x$ -компоненты имеем максимум для угла  $\pi/6$ . Более того, разные углы поляризации приводят к разным максимумам в спектрах гармоник и энергиям отсечки. Обратите внимание, что в процессе генерации в прямоугольной ГКТ появляются только нечетные гармоники, независимо от ее ориентации относительно поля накачки, что связано с инверсионной симметрией подрешетки прямоугольной ГКТ.

Далее рассмотрим спектры ГВГ в зависимости от интенсивности волны накачки. На рис. 6 представлены спектры ГВГ в зависимости от напряженности поля и порядок гармоник для фиксированной частоты и энергий ЭЭВ  $U = 3 \text{ эВ}$ ,  $V \simeq 0.9 \text{ эВ}$  в прямоугольной ГКТ с зигзагообразным краем вытянутого ребра с числом атомов  $N = 84$  и  $N = 164$ . На рис. 6 видны множественные плато. Отметим, что важно повысить эффективность излучения ГВГ и порог отсечки гармоник. Как показано на рис. 6, в пределах каждого плато гармоника отсечки по-

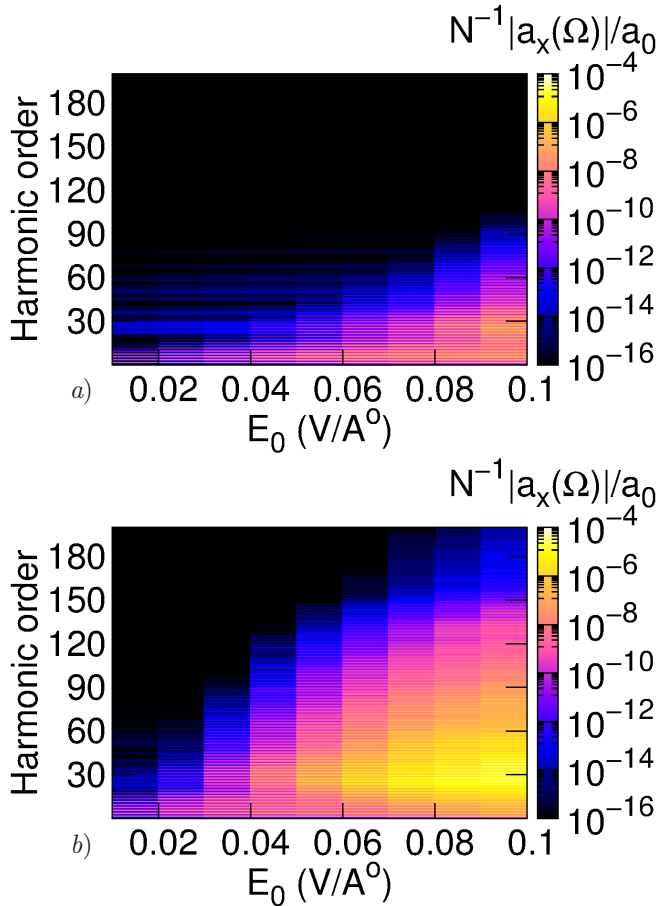


Рис. 6. (В цвете онлайн) Цветные полосы представляют уровень излучения ГВГ в режиме сильного поля в логарифмическом масштабе через преобразование Фурье дипольного ускорения  $N^{-1}|a_x(\Omega)|/a_0$  (в условных единицах) в зависимости от номера гармоники и напряженности волнового поля  $E_0$  при фиксированном угле  $\theta = 0$  для  $N = 84$  (a) и  $N = 164$  (b) при зигзагообразном крае на удлиненной стороне прямоугольной ГКТ. Частота волны  $\omega = 0.1 \text{ эВ}/\hbar$ , энергии ЭЭВ  $U = 3 \text{ эВ}$ ,  $V = 0.9 \text{ эВ}$ . Вероятность релаксации  $\hbar\gamma = 50 \text{ мэВ}$

чти линейно возрастает с увеличением напряженности волнового поля, достигая гармоник  $n_{cut} \simeq 150$  (рис. 6b) и  $n_{cut} \simeq 110$  (рис. 6a). Отметим, что линейная зависимость гармоник отсечки от напряженности поля волны аналогична ГВГ на дискретных уровнях [93–95] или в кристаллах с линейной дисперсией энергии [44, 96].

Многочастичное кулоновское ЭЭВ оказывает сильное влияние на ГВГ в графене [30, 58, 59] и в молекулах фуллеренов [55]. Аналогичную картину мы ожидаем при взаимодействии сильной волны накачки с прямоугольной ГКТ. На рис. 7 показаны спектры ГВГ в режиме сильного поля в зависимости от номера гармоники для разных энергий ЭЭВ при  $N = 164$ . Как видно на этом рисунке, разные

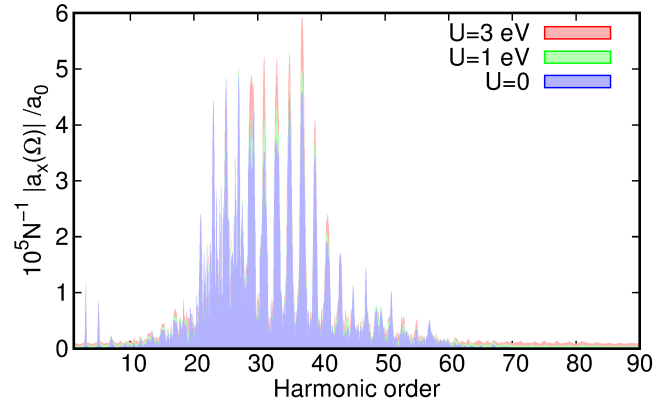


Рис. 7. (В цвете онлайн) Спектры ГВГ в режиме сильного поля для различных энергий ЭЭВ через преобразование Фурье дипольного ускорения  $N^{-1}|a_x(\Omega)|/a_0$  (в условных единицах) в прямоугольной ГКТ с  $N = 164$  атомами для разных энергий ЭЭВ  $U$  ( $V \simeq 0.3U$ ), кроме первой гармоники. Частота линейно поляризованной волны  $\omega = 0.1 \text{ эВ}/\hbar$ , напряженность волнового поля  $E_0 = 0.1 \text{ В}/\text{Å}$  при фиксированном угле  $\theta = 0$ . Вероятность релаксации  $\hbar\gamma = 50 \text{ мэВ}$

энергии ЭЭВ приводят к разным максимумам спектров гармоник и разным энергиям отсечки. Как также видно на рис. 7, имеет место сильное кулоновское усиление выхода ГВГ, как и в случае графена, вызванное экситонными эффектами в наносистемах на основе графена.

### 3. ВЫВОДЫ

В настоящей работе рассмотрены процессы многофотонного возбуждения и генерации высших гармоник в ГКТ прямоугольной формы с зигзагообразным краем. Использована микроскопическая квантовая теория, описывающая взаимодействие квантовой точки с полем лазера в рамках динамического приближения Хартри–Фока. Полученные спектры ГВГ с множественной структурой плато противоречат линейной теории возмущений. При этом доминирующее плато смещается в сторону более высоких частот с увеличением числа атомов квантовой точки. Следовательно, при изменении латерального размера наноструктуры можно увеличить порядки гармоник в пределах основного плато. Кроме того, энергия фотона отсечки с увеличением поперечного размера наноструктуры также смещается в сторону синей области спектра. Мы показали, что спектры ГВГ имеют сильную анизотропию в зависимости от ориентации напряженности поля электромагнитной волны относительно зигзагообразного края прямоугольной ГКТ. Различные углы поляризации приводят к различным максимумам спектров гармоник и различным энергиям отсечки. Мы также показа-

ли сильное кулоновское усиление выхода ГВГ, как и в случае графена, что открывает дополнительную степень свободы для манипулирования спектрами ГВГ с индуцированным подложкой экранированием в двумерных наноструктурах.

### ПРИЛОЖЕНИЕ ГАМИЛЬТониАН ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Здесь мы кратко представляем полный гамильтониан по эмпирической модели сильной связи [91] в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}, \quad (5)$$

где

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} V_{ij} n_i n_j + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad (6)$$

есть гамильтониан прямоугольной ГКТ. Здесь  $c_{i\sigma}^\dagger$  — оператор рождения электрона со спиновой поляризацией  $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$  в узле  $i$ , а суммирование по  $\langle i, j \rangle$  проводится по ближайшим соседним узлам с энергией переноса  $t_{ij}$  ( $\bar{\sigma}$  противоположная спиновая поляризация);  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  — оператор электронной плотности с полной электронной плотностью  $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$  для узла  $i$ . Первый и второй члены в свободном гамильтониане (6) соответствуют ЭЭВ в расширенном приближении Хаббарда ( $\hat{H}_{ee}$ ) с межузловыми (порядка  $V_{ij}$ ) и внутриузловыми (порядка  $U$ ) кулоновскими энергиями отталкивания. Межузловое кулоновское отталкивание описывается расстоянием  $d_{ij}$  между ближайшими соседними парами узлов:  $V_{ij} = V d_{min}/d_{ij}$  ( $d_{min}$  — минимальное расстояние между ближайшими соседними парами). Для всех расчетов мы приняли  $V = 0.3U$  [97, 98]. Третий член в (6) представляет собой часть кинетической энергии гамильтониана сильной связи с матрицей туннелирования  $t_{ij}$  соседних узлов. Интеграл переноса  $t_{ij}$  между ближайшими соседними атомами ГКТ может быть определен экспериментально. Для прямоугольной ГКТ он принимается равным  $t_{ij} = 2.7\text{эВ}$  [57]. Отметим, что в гамильтониане мы пренебрегли колебаниями решетки.

Взаимодействие лазера с прямоугольной ГКТ описывается в калибровке длины через скалярный потенциал

$$\hat{H}_{int} = e \sum_{i\sigma} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E}(t) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma},$$

где  $\mathbf{r}_i$  — радиус-вектор,  $e$  — элементарный заряд. Получим эволюционные уравнения для одночастичной матрицы плотности  $\rho_{ij}^{(\sigma)} = \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$  из уравнения Гейзенберга  $i\hbar \partial \hat{L} / \partial t = [\hat{L}, \hat{H}]$ . Пусть система со

скоростью  $\gamma$  релаксирует к равновесию с матрицей плотности  $\rho_{0ij}^{(\sigma)}$ . ЭЭВ будем изучать в рамках приближения Хартри–Фока. Для описания замкнутого множества уравнений для одночастичной матрицы плотности  $\rho_{ij}^{(\sigma)}$  рассмотрим гамильтониан (6) в виде

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^{HF} \simeq & - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i (\bar{n}_{i\uparrow} - \bar{n}_{0i\uparrow}) n_{i\downarrow} + \\ & + U \sum_{i\sigma} (\bar{n}_{i\downarrow} - \bar{n}_{0i\downarrow}) n_{i\uparrow} + \sum_{\langle i,j \rangle} V_{ij} (\bar{n}_j - \bar{n}_{0j}) n_i - \\ & - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} V_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle - \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle_0), \quad (7) \end{aligned}$$

где  $\bar{n}_{i\sigma} = \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle = \rho_{ii}^{(\sigma)}$ . Таким образом, получается следующее уравнение для матрицы плотности:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho_{ij}^{(\sigma)}}{\partial t} = & \sum_k \left( \tau_{kj\sigma} \rho_{ik}^{(\sigma)} - \tau_{ik\sigma} \rho_{kj}^{(\sigma)} \right) + (V_{i\sigma} - V_{j\sigma}) \rho_{ij}^{(\sigma)} + \\ & + e \mathbf{E} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rho_{ij}^{(\sigma)} - i\hbar \gamma \left( \rho_{ij}^{(\sigma)} - \rho_{0ij}^{(\sigma)} \right), \quad (8) \end{aligned}$$

а матрицы  $V_{i\sigma}$ ,  $\tau_{ij\sigma}$  аппроксимируются матрицами плотности  $\partial \rho_{ij}^{(\sigma)}$ :

$$\begin{aligned} V_{i\sigma} = & \sum_{j\alpha} V_{ij} \left( \rho_{jj}^{(\alpha)} - \rho_{0jj}^{(\alpha)} \right) + U \left( \rho_{ii}^{(\bar{\sigma})} - \rho_{0ii}^{(\bar{\sigma})} \right), \quad (9) \\ \tau_{ij\sigma} = & t_{ij} + V_{ij} \left( \rho_{ji}^{(\sigma)} - \rho_{0ji}^{(\sigma)} \right). \end{aligned}$$

В этом представлении начальное значение матрицы плотности  $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle_0$  определяется через гамильтониан сильной связи:

$$\hat{H}_0^{TB} = - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}.$$

Мы численно диагоналируем гамильтониан  $\hat{H}_0$ . В итоге, в статическом пределе гамильтониан Хартри–Фока обращается в нуль,  $\hat{H}_{ee}^{HF} \simeq 0$ , и ЭЭВ в пределе Хартри–Фока включено в эмпирический интеграл переноса  $t_{ij}$  между ближайшим атомами, который выбирается близким к экспериментальным данным [57]. Таким образом, ЭЭВ в приближении Хартри–Фока соответствует только квантовой динамике, индуцированной полем лазера накачки.

**Благодарности.** Авторы глубоко признательны Г. К. Аветисяну и Г. Ф. Мкртчяну за постоянные обсуждения и ценные рекомендации.

**Финансирование.** Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Республики Армения в рамках Проекта 21AG-1C014.

## ЛИТЕРАТУРА

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Science* **306**, 666 (2004).
2. A. K. Geim, *Science* **324**, 1530 (2009).
3. A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
4. T. Brabec and F. Krausz, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 545 (2000).
5. P. B. Corkum and F. Krausz, *Nature Phys.* **3**, 381 (2007).
6. P. Agostini and L. F. Di Mauro, *Rep. Prog. Phys.* **67**, 813 (2004).
7. M. C. Kohler, T. Pfeifer, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, *Adv. Atom. Mol. Opt. Phys.* **61**, 159 (2012).
8. H. K. Avetissian, *Relativistic Nonlinear Electrodynamics: The QED Vacuum and Matter in Super-Strong Radiation Fields*, Springer, New York (2016).
9. M. Ferray, A. L'Huillier, X. F. Li, L. A. Lompre et al., *J. Phys. B* **21**, L31 (1988).
10. S. Ghimire, A. D. DiChiara, E. Sistrunk et al., *Nature Phys.* **7**, 138 (2011).
11. O. Schubert, M. Hohenleutner, F. Langer et al., *Nature Photon.* **8**, 119 (2014).
12. G. Vampa, T. J. Hammond, N. Thiré et al., *Nature* **522**, 462 (2015).
13. G. Ndabashimiye, S. Ghimire, M. Wu et al., *Nature* **534**, 520 (2016).
14. Y. S. You, D. A. Reis, and S. Ghimire, *Nature Phys.* **13**, 345 (2017).
15. H. Liu, C. Guo, G. Vampa et al. *Nature Phys.* **14**, 1006 (2018).
16. S. A. Mikhailov and K. Ziegler, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 384204 (2008).
17. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, and Kh. V. Sedrakian, *Phys. Rev. B* **85**, 115443 (2012).
18. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, K. V. Sedrakian et al., *J. Nanophoton.* **6**, 061702 (2012).
19. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, K. G. Batrakov et al., *Phys. Rev. B* **88**, 165411 (2013).
20. P. Bownan, E. Martinez-Moreno, K. Reimann et al., *Phys. Rev. B* **89**, 041408(R) (2014).
21. I. Al-Naib, J. E. Sipe, and M. M. Dignam, *New J. Phys.* **17**, 113018 (2015).
22. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, *Phys. Rev. B* **94**, 075412 (2016).
23. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **94**, 045419 (2016).
24. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, G. F. Mkrtchian, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **11**, 016004 (2017).
25. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, et al., *J. Nanophoton.* **14**, 026004 (2020).
26. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, *Phys. Rev. B* **95**, 085436 (2017).
27. D. Dimitrovski, L. B. Madsen, and T. G. Pedersen, *Phys. Rev. B* **95**, 035405 (2017).
28. N. Yoshikawa, T. Tamaya, and K. Tanaka, *Science* **356**, 736 (2017).
29. A. Golub, R. Egger, C. Muller, and S. Villalba-Chavez, *Phys. Rev. Lett* **124**, 110403 (2020).
30. A. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **97**, 115454 (2018).
31. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **13**, 036010 (2019).
32. A. G. Ghazaryan and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **13**, 046004 (2019).
33. A. G. Ghazaryan and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **13**, 046008 (2019).
34. G. Oztarhan, E. B. Kul, E. Okcu, and A. D. Guclu, arXiv: 2210.14696 (2022).
35. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, Kh. V. Sedrakian, and B. R. Avchyan, *J. Nanophoton.* **12**, 016006 (2018).
36. A. D. Guclu and Nejat Bulut, *Phys. Rev. B* **91**, 125403 (2015).
37. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, B. R. Avchyan, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **100**, 035434 (2019).
38. Yu. Bludov, N. Peres, and M. Vasilevskiy, *Phys. Rev. B* **101**, 075415 (2020).
39. H. Liu, Y. Li, Y. S. You et al., *Nature Phys.* **13**, 262 (2017).
40. G. F. Mkrtchian, A. Knorr, and M. Selig, *Phys. Rev. B* **100**, 125401 (2020).
41. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, and K. Z. Hatsagortsyan, *Phys. Rev. Res.* **2**, 023072 (2020).



42. G. Le Breton, A. Rubio, and N. Tancogne-Dejean, *Phys. Rev. B* **98**, 165308 (2018).
43. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, B. R. Avchyan, and G. F. Mkrtchian, *J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 185302 (2018).
44. T. Zhang, P. Cheng, X. Chen et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 266803 (2009).
45. T. G. Pedersen, *Phys. Rev. B* **95**, 235419 (2017).
46. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **99**, 085432 (2019).
47. S. Almalki, A. M. Parks, G. Bart et al., *Phys. Rev. B* **98**, 144307 (2018).
48. B. Cheng, N. Kanda, T. N. Ikeda et al., *Phys. Rev. Lett.* **124**, 117402 (2020).
49. T. Cao, Z. Li, and S. G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 236602 (2015).
50. L. Seixas, A. S. Rodin, A. Carvalho, and A. H. C. Neto, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 206803 (2016).
51. W. S. Whitney, V. W. Brar, Y. Ou et al., *Nano Lett.* **17**, 255 (2017).
52. X. Zhang, T. Zhu, H. Du et al., arXiv:2112.08790 (2021).
53. J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco et al., *Science* **264** 553 (1994).
54. G. P. Zhang and Y. H. Bai, *Phys. Rev. B* **101**, 081412(R) (2020).
55. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **104**, 125436 (2021).
56. Б. Р. Авчян, А. Г. Казарян, К. А. Саргсян, Х. В. Седракян, *ЖЭТФ* **161**, 155 (2022) [*JETP* **134**, 125 (2022)].
57. A. D. Guclu, P. Potasz, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, *Graphene Quantum Dots*, Springer, Berlin (2014).
58. S. Gnawali, R. Ghimire, K. Rana et al., *Phys. Rev. B* **106**, 075149 (2022).
59. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. A* **105**, 063504 (2022).
60. M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1920 (1996).
61. K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
62. Y.-W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 216803 (2006).
63. M. Ezawa, *Physica E* **40**, 1421 (2008).
64. M. Ezawa, *Phys. Rev. B* **73**, 045432 (2006).
65. W. Chu, Y. Xie, S. Duan et al., *Phys. Rev. B* **82**, 125301 (2010).
66. H. Yoon, M. Park, J. Kim et al., *Chem. Phys. Rev.* **2**, 031303 (2021).
67. M. Y. Han, B. Ozyilmaz, Y. Zhang, and Ph. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 206805 (2007).
68. L. Brey and H. A. Fertig, *Phys. Rev. B* **73**, 235411 (2006).
69. Sh. Yamijala, M. Mukhopadhyay, and S. Pati, *J. Phys. Chem. C* **119**, 12079 (2015).
70. S. Luryi, J. Xu, and A. Zaslavsky, *Future Trends in Microelectronics: Frontiers and Innovations*, Wiley, New York (2013).
71. A. D. Guclu, P. Potasz, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **82**, 155445 (2010).
72. X. Feng, Y. Qin, and Y. Liu, *Opt. Express* **26**, 7132 (2018).
73. A. D. Guclu, P. Potasz, O. Voznyy et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 246805 (2009).
74. O. Voznyy, A. D. Guclu, P. Potasz, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **83**, 165417 (2011).
75. W. L. Wang, S. Meng, and E. Kaxiras, *Nano Lett.* **8**, 241 (2008).
76. L. Yang, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Nano Lett.* **7**, 3112 (2007).
77. D. Prezzi, D. Varsano, A. Ruini, et al., *Phys. Rev. B* **77**, 041404 (2008).
78. D. Prezzi, D. Varsano, A. Ruini, and E. Molinari, *Phys. Rev. B* **84**, 041401 (2011).
79. C. B. Murray, C. R. Kagan, and M. G. Bawendi, *Ann. Rev. Mater. Sci.* **30**, 545 (2000).
80. D. Bera, L. Qian, T.-K. Tseng, and P. H. Holloway, *Materials* **3**, 2260 (2010).
81. A. Kumar, S. E. Laux, and F. Stern, *Phys. Rev. B* **42**, 5166 (1990).
82. R. C. Ashoori, H. L. Stormer, J. S. Weiner et al., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 613 (1993).
83. A. Hoge, S. Seidl, M. Kroner et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 217401 (2004).
84. M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Y. Ivanov et al., *Phys. Rev. A* **49**, 2117 (1994).

85. R. B. Chen, C. P. Chang, and M. F. Lin, *Physica E* **42**, 2812 (2010).
86. C. P. Chang, Y. C. Huang, C. L. Lu et al., *Carbon* **44**, 508 (2006).
87. Y. Qin, X. Feng, and Y. Liu, *Appl. Sci.* **9**, 325 (2019).
88. B. R. Avchyan, A. G. Ghazaryan, Kh. V. Sedrakian, and S. S. Israelyan, *J. Nanophoton.* **16**, 036001 (2022).
89. Б. Р. Авчян, А. Г. Казарян, К. А. Саргсян, Х. В. Седракиян, *Письма в ЖЭТФ* **116**, 426 (2022) [*JETP Lett.* **116**, 428 (2022)].
90. S. Acharya, D. Pashov, A. N. Rudenko et al., *npj Computational Materials* **7**, 208 (2021).
91. P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
92. O. Zurrón-Cifuentes, R. Boyero-García, C. Hernández-García et al., *Opt. Express* **27**, 7776 (2019).
93. H. K. Avetissian, B. R. Avchyan, and G. F. Mkrtchian, *J. Phys. B* **45**, 025402 (2012).
94. H. K. Avetissian, A. G. Markossian, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. A* **84**, 013418 (2011).
95. H. K. Avetissian, A. G. Markossian, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Lett. A* **375**, 3699 (2011).
96. G. Vampa, C. R. McDonald, G. Orlando et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 073901 (2014).
97. R. L. Martin and J. P. Ritchie, *Phys. Rev. B* **48**, 4845 (1993).
98. G. P. Zhang, *Phys. Rev. B* **61** 4377 (2000).