

# ОТКЛИК ВЫСШИХ ГАРМОНИК ИНТЕНСИВНОГО КОГЕРЕНТНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ИЗМЕНЕНИЕ ТОПОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ В ГРАФЕНОПОДОБНЫХ НАНОСИСТЕМАХ

*Б. Р. Авчян, А. Г. Казарян\*, К. А. Саргсян, Х. В. Седракян*

*Центр физики сильных полей, Ереванский государственный университет  
0025, Ереван, Армения*

Поступила в редакцию 10 января 2021 г.,  
после переработки 1 февраля 2021 г.  
Принята к публикации 5 февраля 2021 г.

Исследован отклик высших гармоник лазерного поля на изменение топологии поверхности Ферми в графеноподобных наносистемах в процессе генерации. Использована микроскопическая нелинейная квантовая теория взаимодействия интенсивного когерентного электромагнитного излучения с такими системами вблизи критического уровня Ферми. Численно решено уравнение Лиувилля–фон Неймана для матрицы плотности в режиме многофотонного возбуждения. Полученные результаты показывают, что высшие гармоники чувствительны к изменению топологии поверхности Ферми, что может быть использовано для определения энергии Ферми в таких системах.

DOI: 10.31857/S0044451021060018

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие большой интерес представляет создание интенсивных перестраиваемых нанолазеров и умножителей частоты в графеноподобных наносистемах [1–3]. Используются особые нелинейно-оптические свойства графеноподобных наноструктур, возникающие в результате нелинейного отклика таких материалов на внешнее электромагнитное излучение. Задача сводится к исследованию процесса нелинейного взаимодействия света с наносистемой, в которой происходит многофотонное явление — генерация высших гармоник (ГВГ) [4–6]. Все больше внимания уделяется рассмотрению ГВГ в кристаллах [7–13] и двумерных (2D) наноструктурах, таких как графен и его производные [7–30], гексагональный нитрид бора [31] и дихалькогениды переходных металлов [32, 33]. В настоящее время мы наблюдаем рождение новой развивающейся области исследований непертурбативных оптических явлений в наноструктурированных

материалах, таких как графеноподобные квантовые точки или замкнуто-выпуклые фуллерены [34].

В связи с этими проблемами представляет интерес определение энергии Ферми электронов в низкоразмерных наноструктурах [35]. Мы будем рассматривать переходы Лифшица с энергией фотона, много меньшей, чем так называемая энергия Лифшица, когда энергия фотона равна энергии Ферми электрона. Во время перехода Лифшица происходит фрагментация односвязной линии Ферми на четыре отдельные части [36–39]. Используя это свойство, можно теоретически оценить энергию Ферми в графене, состоящем из двух сложенных слоев, А и В (далее АВ-графен). Это позволяет исследовать влияние топологии поверхности Ферми на ГВГ в графеноподобной наноструктуре.

В качестве примера такой структуры можно предложить систему двухслойного графена. Она представляет особую систему, в которой топология зонной структуры может быть выбрана и изменена. Нелинейный когерентный отклик в АВ-графене под действием интенсивного электромагнитного излучения приводит к модификации квазиэнергетического спектра, индукции поляризованных токов долин [40, 41], а также к нелинейно-оптическим эффектам третьего и пятого порядков [42–45]. Двухслой-

\* E-mail: amarkos@ysu.am

ный АВ-графен — хорошо настраиваемый материал. Можно настроить энергию Ферми с помощью внешних возмущений, таких как поперечное электрическое поле или деформация [46–52].

В настоящей статье с помощью разработанного ранее численного моделирования [26–28] и микроскопической нелинейной квантовой теории взаимодействия АВ-графена с линейно поляризованной электромагнитной волной рассматривается процесс генерации гармоник. Численно решается уравнение Лиувилля – фон Неймана для ГВГ в режиме многофотонного возбуждения вблизи точек Дирака зоны Бриллюэна. Полученные результаты показывают, что изменение топологии поверхности Ферми влияет на высшие гармоники. Последнее может быть использовано для определения энергии Ферми в таких системах при ГВГ волны накачки с эффективным выходом в терагерцевой (ТГц) и субТГц-областях спектра при температурах графена выше криогенных.

Работа организована следующим образом. В разд. 2 численно решена система уравнений для одночастичной матрицы плотности в режиме многофотонного взаимодействия. В разд. 3 исследуется влияние изменения топологии поверхности Ферми на генерацию высших гармоник при низкоэнергетическом переходе в графеноподобной наноструктуре. Выводы приведены в разд. 4.

## 2. ОСНОВНАЯ МОДЕЛЬ И ТЕОРИЯ

Рассмотрим влияние топологии поверхности Ферми при генерации высоких гармоник в графеноподобной наноструктуре на примере АВ-графена. В данной статье мы используем результаты микроскопической нелинейной квантовой теории взаимодействия когерентного электромагнитного излучения с двухслойным графеном, развитую в работах [26–28]. Предположим, что линейно поляризованная плоская электромагнитная волна с несущей частотой  $\omega$  и медленно меняющейся амплитудой  $E_0 f(t)$  электрического поля распространяется в направлении, перпендикулярном плоскости  $xy$  слоев графена и имеет вид

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

где  $\mathbf{e}$  — вектор поляризации. Медленно меняющаяся огибающая волны накачки равна

$$f(t) = \begin{cases} \sin^2(\pi t / \mathcal{T}_p), & 0 \leq t \leq \mathcal{T}_p, \\ 0, & \mathcal{T}_p < t < 0, \end{cases}, \quad (2)$$

где  $\mathcal{T}_p = 40\pi / \omega$  — длительность импульса.

Эффективный одночастичный гамильтониан [36, 49, 50] низкоэнергетических возбуждений  $|\varepsilon| < < \gamma_1 \simeq 0.39$  эВ в окрестности точек Дирака  $K_\zeta$ , в АВ-графене может быть представлен формулой

$$\hat{H}_{AB} = \begin{pmatrix} 0 & v_3 \zeta \hat{\pi}_\zeta - \frac{\hat{\pi}_\zeta^2}{2m} \\ v_3 \zeta \hat{\pi}_\zeta - \frac{\hat{\pi}_\zeta^2}{2m} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где  $\hat{\pi}_\zeta = \hat{p}_x + i\zeta \hat{p}_y$ ,  $\hat{\mathbf{p}} = \{\hat{p}_x, \hat{p}_y\}$  — оператор импульса электрона,  $\zeta = \pm 1$  — квантовое число долины. Член  $v_3 = \sqrt{3}a\gamma_3/2\hbar$  в гамильтониане (3) связан с межслоевым переходом  $\gamma_3 = 0.32$  эВ ( $a \approx 0.246$  нм — расстояние между ближайшими А-слоями), вызывает тригональное искривление в зонной дисперсии. Следующий член в уравнении (3) дает пару параболических изолиний  $\varepsilon = \pm p^2/2m$ , где  $m = \gamma_1/2v_F^2$  — эффективная масса,  $\gamma_1 \simeq 0.39$  эВ,  $v_F$  — скорость Ферми в однослойном графене. Функции собственных состояний  $|\mathbf{n}\rangle$  гамильтониана (3) определяются комбинированным квантовым числом  $\mathbf{n} = \{\sigma, \mathbf{p}\}$ . Здесь  $\sigma$  — индекс зоны: для зоны проводимости  $\sigma = 1$ , для валентной зоны  $\sigma = -1$ . Таким образом, имеем

$$|\mathbf{n}\rangle = |\sigma, \mathbf{p}\rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right), \quad (4)$$

где

$$|\sigma, \mathbf{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{E}(\mathbf{n})}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\mathcal{E}(\mathbf{n})} \Upsilon(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right) \quad (5)$$

— спиноры, соответствующие энергиям

$$\mathcal{E}(\mathbf{n}) = \sigma |\Upsilon(\mathbf{p})|. \quad (6)$$

В уравнении (5)

$$\Upsilon(\mathbf{p}) = -\frac{p^2}{2m} e^{2i\zeta\vartheta} + \zeta v_3 p e^{-i\zeta\vartheta}, \quad (7)$$

и  $\vartheta = \arctg(p_y/p_x)$ .

Гамильтониан взаимодействия представим в виде

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) & 0 \\ 0 & e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где  $e$  — элементарный заряд. Для микроскопической теории нелинейного взаимодействия двухслойного графена с сильным полем излучения необходимо решить основное уравнение для матрицы плотности  $\rho_{mn}$ :

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = (\mathcal{E}(\mathbf{m}) - \mathcal{E}(\mathbf{n}))\rho_{mn} + \sum_{\mathbf{l}} \left[ \langle \mathbf{m} | \hat{\mathcal{V}} | \mathbf{l} \rangle \rho_{ln} - \rho_{ml} \langle \mathbf{l} | \hat{\mathcal{V}} | \mathbf{n} \rangle \right] - i\hbar \gamma_{mn} \left( \rho_{mn} - \rho_{mn}^{(0)} \right), \quad (9)$$

где  $\rho_{mn}^{(0)}$  — матрица плотности в равновесии и  $\gamma_{mn}$  — вероятность релаксации. Для  $\rho_{mn}^{(0)}$  мы предполагаем распределение Ферми – Дирака:

$$\rho_{mn}^{(0)} = n_F(\mathbf{n}) \delta_{mn},$$

где

$$n_F(\mathbf{n}) \equiv n_F(\sigma, \mathbf{p}) = \left[ 1 + \exp \left( \frac{\mathcal{E}(\mathbf{n}) - \mu}{k_B T} \right) \right]^{-1}. \quad (10)$$

Здесь  $\mu$  — химический потенциал,  $k_B$  — постоянная Больцмана и  $T$  — абсолютная температура.

С учетом гамильтониана (8), основное уравнение для матрицы плотности (9) сводится к уравнению для  $\rho_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t)$ :

$$\rho_{mn}(t) \equiv \rho(\sigma, \mathbf{p}; \sigma', \mathbf{p}', t) \equiv \rho_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t) \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'},$$

где  $\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$  — символ Кронекера.

Таким образом, имеем

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e \mathbf{E}(t) \frac{\partial \rho_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = (\sigma - \sigma') \times \times |\Upsilon(\mathbf{p})| - i\hbar \gamma_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}) \left( \rho_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t) - \rho_{\sigma, \sigma'}^{(0)}(\mathbf{p}) \right) + + \mathbf{E}(t) [\mathbf{D}_t(\sigma, \mathbf{p}) \rho_{-\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t) - \mathbf{D}_t(-\sigma', \mathbf{p}) \times \times \rho_{\sigma, -\sigma'}(\mathbf{p}, t)], \quad (11)$$

где

$$\mathbf{D}_t(\sigma, \mathbf{p}) = \hbar e \langle \sigma, \mathbf{p} | i \partial_{\mathbf{p}} | -\sigma, \mathbf{p} \rangle \quad (12)$$

— дипольный момент перехода. В соответствии с работами [26–28] составляющими дипольного момента перехода являются

$$D_{tx}(\mathbf{p}) = -\frac{e\hbar}{2\mathcal{E}^2(1, \mathbf{p})} \times \times \left[ \left( \frac{p^2}{2m} - mv_3^2 \right) \frac{\zeta p_y}{m} + \frac{v_3}{m} p_x p_y \right], \quad (13)$$

$$D_{ty}(\mathbf{p}) = -\frac{e\hbar}{2\mathcal{E}^2(1, \mathbf{p})} \times \times \left[ \left( -\frac{p^2}{2m} + mv_3^2 \right) \frac{\zeta p_x}{m} + \frac{v_3}{2m} (p_x^2 - p_y^2) \right]. \quad (14)$$

В уравнении (11) недиагональными элементами являются межзонная поляризация  $\rho_{1, -1}(\mathbf{p}, t) = \mathcal{P}(\mathbf{p}, t)$  и ее комплексно-сопряженная величина

$\rho_{-1, 1}(\mathbf{p}, t) = \mathcal{P}^*(\mathbf{p}, t)$ , а диагональные элементы представляют собой функции распределения частиц для зоны проводимости,  $N_c(\mathbf{p}, t) = \rho_{1, 1}(\mathbf{p}, t)$ , и валентной зоны,  $N_v(\mathbf{p}, t) = \rho_{-1, -1}(\mathbf{p}, t)$ . Релаксацию определим членом  $\gamma_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}) = \Gamma(\mu, T)$ , зависящим от химического потенциала и температуры. Как показано в работах [53, 54], для энергий  $\mu \ll \ll \gamma_1 = 0.39$  эВ доминирующим механизмом релаксации будет электрон-фононная связь через продольные акустические фононы. В низкотемпературном пределе  $k_B T \ll 2(c_{ph}/v_F) \sqrt{\mu \gamma_1}$ , где  $c_{ph} \simeq \simeq 2 \cdot 10^6$  см/с — скорость продольного акустического фонона, скорость релаксации оценивается как [54]

$$\Gamma(\mu, T) \simeq \frac{\pi D^2 k_B^2 T^2}{8 \rho_m \hbar^3 c_{ph}^3 v_F} \sqrt{\frac{\gamma_1}{\mu}}. \quad (15)$$

Здесь  $D \simeq 20$  эВ — постоянная электрон-фононного взаимодействия,  $\rho_m \simeq 15 \cdot 10^{-8}$  г/см<sup>2</sup> — плотность массы двухслойного графена. Принимая во внимание уравнение (11), нам необходимо решить замкнутую систему дифференциальных уравнений для этих величин:

$$i\hbar \frac{\partial N_c(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e \mathbf{E}(t) \frac{\partial N_c(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = = \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t(\mathbf{p}) \mathcal{P}^*(\mathbf{p}, t) - \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t^*(\mathbf{p}) \mathcal{P}(\mathbf{p}, t) - - i\hbar \Gamma(\mu, T) (N_c(\mathbf{p}, t) - n_F(1, \mathbf{p})), \quad (16)$$

$$i\hbar \frac{\partial N_v(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e \mathbf{E}(t) \frac{\partial N_v(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = = -\mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t(\mathbf{p}) \mathcal{P}^*(\mathbf{p}, t) + \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t^*(\mathbf{p}) \mathcal{P}(\mathbf{p}, t) - - i\hbar \Gamma(\mu, T) (N_v(\mathbf{p}, t) - n_F(-1, \mathbf{p})), \quad (17)$$

$$i\hbar \frac{\partial \mathcal{P}(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e \mathbf{E}(t) \frac{\partial \mathcal{P}(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = = [2|\Upsilon(\mathbf{p})| - i\hbar \Gamma(\mu, T)] \mathcal{P}(\mathbf{p}, t) + + \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t(\mathbf{p}) [N_v(\mathbf{p}, t) - N_c(\mathbf{p}, t)]. \quad (18)$$

Оптическое возбуждение импульсом когерентного излучения вызывает переходы в море Ферми – Дирака, в результате чего возникает поверхностный ток. Оператор плотности тока задается формулой

$$g_{\zeta} = -2e \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) | \hat{\mathbf{v}}_{\zeta} | \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (19)$$

Для эффективного  $2 \times 2$ -гамильтониана (3) оператор скорости  $\hat{\mathbf{v}}_{\zeta} = \partial \hat{H} / \partial \hat{\mathbf{p}}$  имеет вид

$$\hat{v}_{\zeta x} = \zeta \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x - i \hat{p}_y) + v_3 \\ -\frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x + i \hat{p}_y) + v_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

$$\hat{v}_{\zeta y} = i \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x - i \hat{p}_y) + v_3 \\ -\frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x + i \hat{p}_y) - v_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

а при ГВГ в АВ-графене внутризонная скорость  $\mathbf{V}(\mathbf{p})$  дается формулой

$$\mathbf{V}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\mathcal{E}(1, \mathbf{p})} \left( v_3 \mathbf{p} - 3\zeta \frac{v_3 p}{2m} \mathbf{p} \cos 3\vartheta + 3\zeta \frac{v_3 p^3}{2m} \sin 3\vartheta \frac{\partial \vartheta}{\partial \mathbf{p}} + 2 \frac{\mathbf{p}^3}{(2m)^2} \right). \quad (22)$$

Используя уравнения (5)–(7) и (3), плотность тока для долины  $\zeta$  мы можем записать в виде

$$\mathbf{g}_{\zeta}(t) = -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^2} \int d\mathbf{p} \left\{ \frac{2i}{\hbar} \mathcal{E}(1, \mathbf{p}) \times [\mathbf{D}_t(\mathbf{p}) \mathcal{P}^*(\mathbf{p}, t) - \mathbf{D}_t^*(\mathbf{p}) \mathcal{P}(\mathbf{p}, t)] + \mathbf{V}(\mathbf{p}) (N_c(\mathbf{p}, t) - N_v(\mathbf{p}, t)) \right\}. \quad (23)$$

В уравнении (23) первое слагаемое описывает ГВГ, возникающую в результате рекомбинации ускоренных электронно-дырочных пар. Второй член — это внутризонный ток, который обусловлен внутризонными высшими гармониками и генерируется в результате независимого движения частиц в своих соответствующих зонах. Мы изучаем многофотонный режим, поэтому вклад обоих механизмов существен. Полный ток может быть получен суммированием по  $\zeta$ :

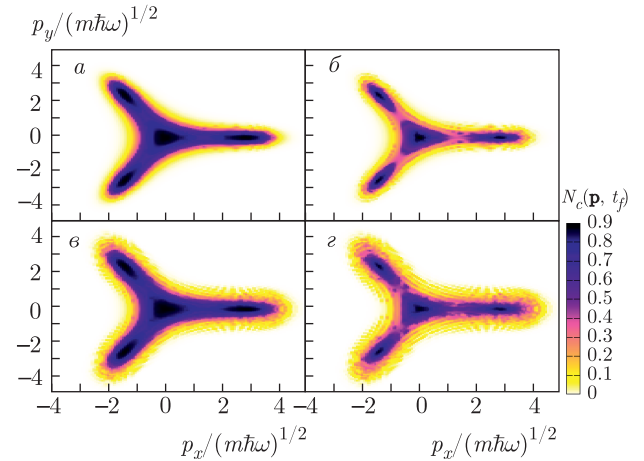
$$g_x = g_{1,x} + g_{-1,x}, \quad (24)$$

$$g_y = g_{1,y} + g_{-1,y}. \quad (25)$$

Ниже мы исследуем нелинейный отклик двухслойного графена в процессе ГВГ под действием лазерного поля в многофотонном режиме с параметром интенсивности  $\chi \gtrsim 1$  и субТГц-частотами  $\omega = 0.4\text{--}0.9$  мэВ/ $\hbar$ .

### 3. ВЛИЯНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ТОПОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ НА ГВГ ПРИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ПЕРЕХОДЕ В ГРАФЕНОПОДОБНОЙ НАНОСТРУКТУРЕ

В этом разделе исследуем влияние изменения топологии поверхности Ферми на ГВГ при низкоэнер-



**Рис. 1.** (В цвете онлайн) Функция распределения частиц  $N_c(\mathbf{p}, t_f)$  (в относительных единицах) после взаимодействия в момент  $t = 40\pi/\omega$  в зависимости от безразмерных компонент импульса. Поле линейно поляризовано вдоль оси  $y$ . Представлено фотоиспускание при переходе Лифшица ( $\hbar\omega = 0.9\mathcal{E}_L$ ) для высокой  $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$  (а, в) и низкой  $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L \simeq \mu$  (б, г) энергий. Параметр  $k_B T/\hbar\omega = 0.4$ , безразмерный параметр интенсивности  $\chi = 0.5$  (а, б) и  $\chi = 1$  (в, г) для долины с индексом  $\zeta = -1$

гетическом переходе в графеноподобной наноструктуре. Взаимодействие частицы с когерентной волной с низкой энергией фотона в ТГц- или субТГц-областях ( $\hbar\omega \ll \mathcal{E}_L = 1$  мэВ, где  $\mathcal{E}_L$  — энергия Лифшица), характеризуется безразмерным параметром интенсивности  $\chi$  [16]:

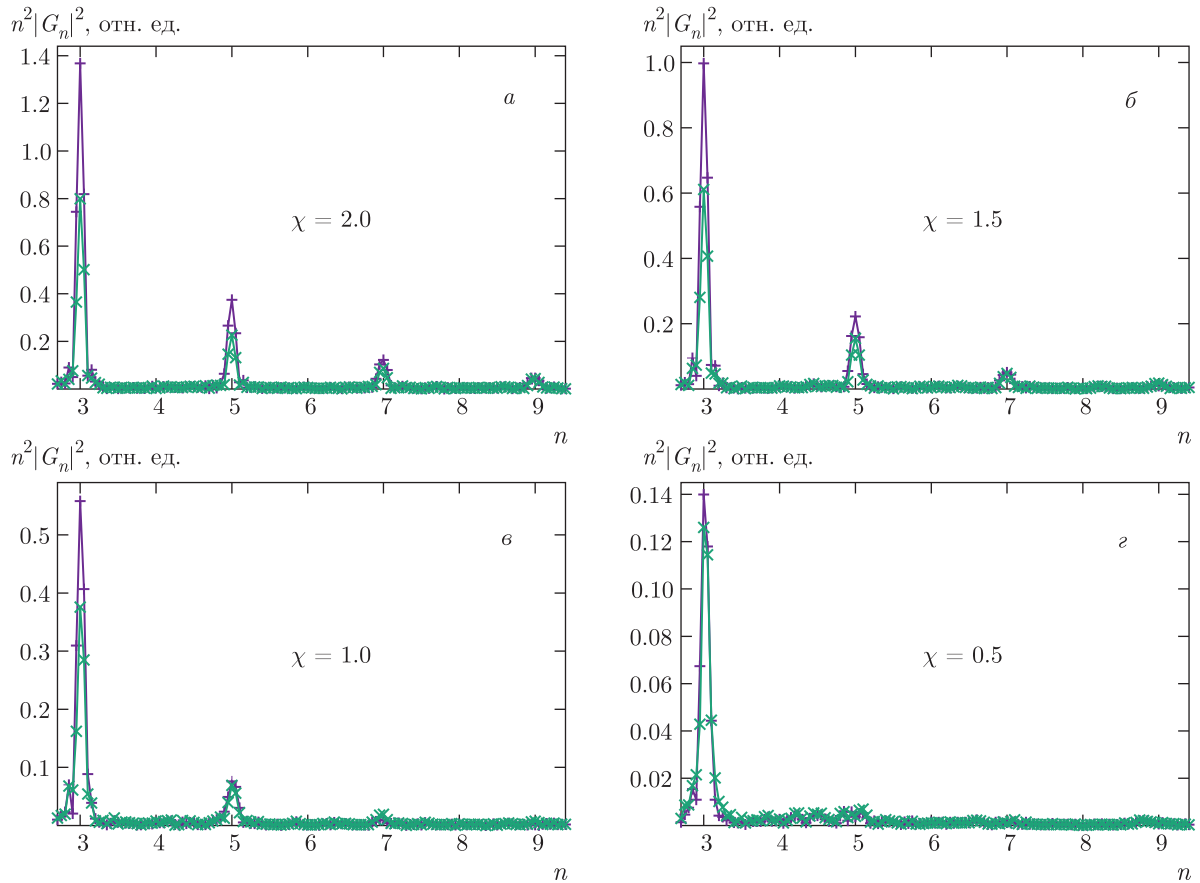
$$\chi = eE_0 v_3 / \hbar\omega^2. \quad (26)$$

Среднюю интенсивность волны [30] можно представить как

$$I_{\chi} = \chi^2 \cdot 1.96 \cdot 10^{13} \text{ Вт/см}^2 (\hbar\omega/\text{эВ})^4.$$

Параметр интенсивности  $\chi$  имеет порядок единицы для многофотонного процесса ГВГ. В частности, для фотонов с энергиями 0.4–0.9 мэВ режим многофотонного взаимодействия может быть реализован при интенсивностях  $I_{\chi} = 1\text{--}10^2$  Вт/см<sup>2</sup>. Отметим, что современные фотонные ТГц- и субТГц-источники (с энергиями 0.4–1.24 мэВ) включают квантовые каскадные лазеры [55, 56].

На примере двухслойного графена, рассмотрим нелинейный отклик графеноподобной наноструктуры в процессе ГВГ при многофотонном возбуждении при переходе Лифшица. Система уравнений (16)–(18) аналитически не решается. Для численно-



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) Вероятности испускания гармоник в двухслойном графене при переходе Лифшица в зависимости от номера гармоники для разных параметров интенсивности  $\chi$  и энергий Ферми  $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$  (косые крестики) и  $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$  (прямые крестики). Параметр  $k_B T/\hbar\omega = 0.4$ . Волна накачки с энергией фотона  $\hbar\omega = 0.9\mathcal{E}_L$  линейно поляризована

го решения выполнено стандартное преобразование и замена переменных на новые,  $t$  и

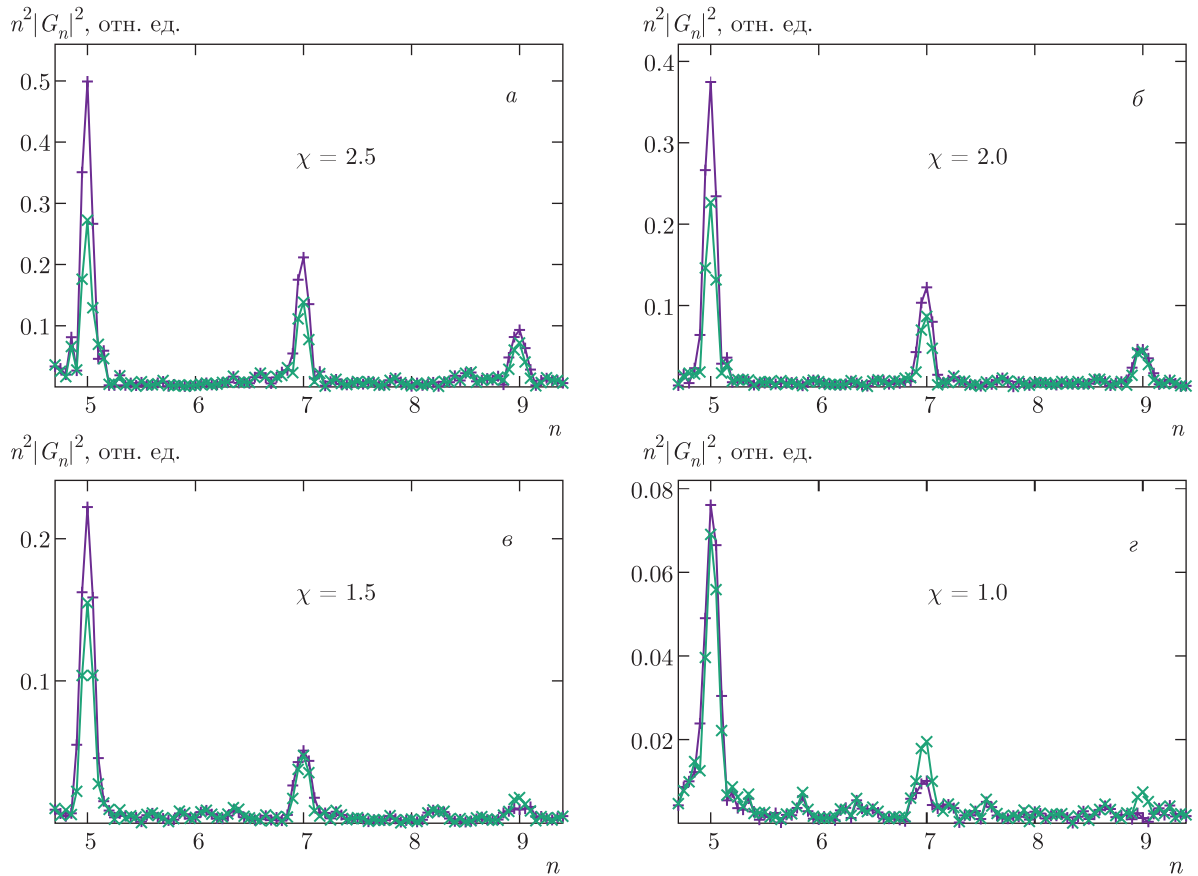
$$\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_E(t), \quad \mathbf{p}_E(t) = -e \int_0^t \mathbf{E}(t') dt',$$

где  $\mathbf{p}_E(t)$  — классический импульс, переданный волновым полем. Преобразуем уравнения с частными производными в обыкновенные. Интегрирование уравнений (16)–(18) выполняется на однородной сетке из  $10^4$  точек  $(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y)$  со стандартным алгоритмом Рунге–Кутты четвертого порядка. В качестве максимального импульса принято значение  $\tilde{p}_{max}/\sqrt{m\hbar\omega} = 5$ . Скорость релаксации  $\Gamma(\mu, T)$  определяется формулой (15).

Нелинейное возбуждение моря Ферми показано на рис. 1 при переходе Лифшица ( $\hbar\omega = 0.9\mathcal{E}_L$ ) при параметрах интенсивности  $\chi = 0.5$  и  $\chi = 1$ . Функция распределения частиц  $N_c(\mathbf{p}, t_f)$  после воздей-

ствия импульса длительностью  $\mathcal{T}_p \approx 90$  пс показана при высокой ( $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$ ) и низкой ( $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$ ) энергиях Ферми. Предполагается, что волна накачки линейно поляризована вдоль оси  $y$ . Как видно из рис. 1б,г для  $\mathcal{E}_F < \mathcal{E}_L$  и  $\hbar\omega < \mathcal{E}_L$  две соприкасающиеся параболы преобразуются в четыре отдельных «кармана». Итак, возбужденные искаженные изолинии дают возможность оценить значение  $\mathcal{E}_F \simeq \mu$  в случае фотона низкой энергии  $\hbar\omega = 0.7\mathcal{E}_L$ .

Отметим, что при параметре интенсивности  $\chi > 1$  количество изолиний увеличивается. Отчетливо видно многофотонное и сильноанизотропное возбуждение моря Ферми–Дирака вдали от точек Дирака. В частности, линии возбуждения искривлены в направлении вектора поляризации волны. Это указывает на то, что созданные пары частица–дырка ускоряются в волновом поле. Таким образом, при исследовании спектра излучения представляют интерес высшие порядки гармоник. Проявляются



**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Вероятности испускания высших гармоник в двухслойном графене при переходе Лифшица в зависимости от номера гармоники показана для разных параметров интенсивности  $\chi$  и энергий Ферми  $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$  (косые крестики) и  $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$  (прямые крестики). Остальные параметры как на рис. 2

предположения о температурной зависимости возбуждения моря Ферми–Дирака. Вероятность ГВГ для рассмотренных случаев слабо зависит от температуры: возбужденные изолинии слегка размываются с повышением температуры.

Будем характеризовать вероятность испускания  $n$ -й гармоники безразмерным нормированным составляющим плотности тока  $g_{x,y}$  (24), (25), определенным как

$$\frac{g_{x,y}}{j_0} = G_{x,y} \left( \omega t, \chi, \gamma, \frac{\mathcal{E}_L}{\hbar\omega}, \frac{k_B T}{\hbar\omega}, \frac{\mu}{\hbar\omega} \right), \quad (27)$$

где

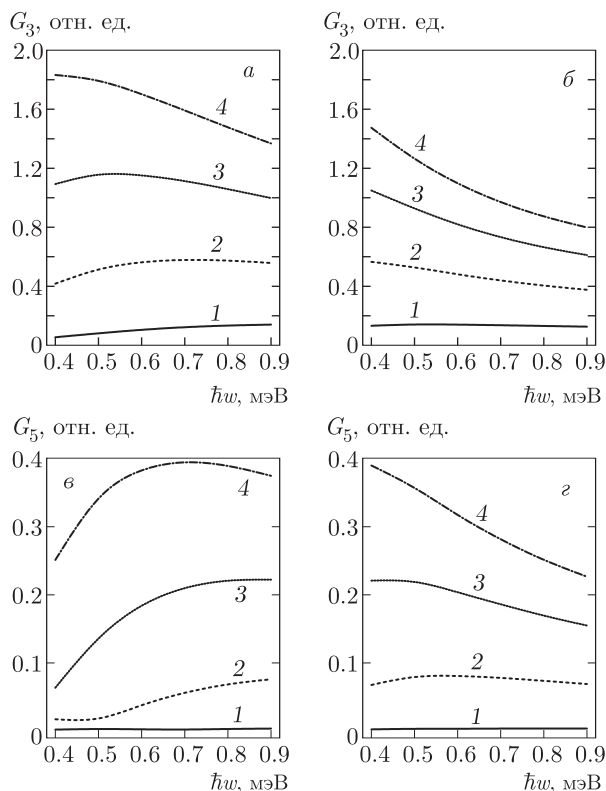
$$j_0 = \frac{e\omega}{\pi^2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad (28)$$

а  $G_x$  и  $G_y$  являются безразмерными периодическими (для монохроматических волн) функциями, которые зависят от параметра интенсивности  $\chi$ , энергии Лифшица  $\mathcal{E}_L$ , энергии Ферми  $\mathcal{E}_F \simeq \mu$  и температуры образца. Таким образом, используя ре-

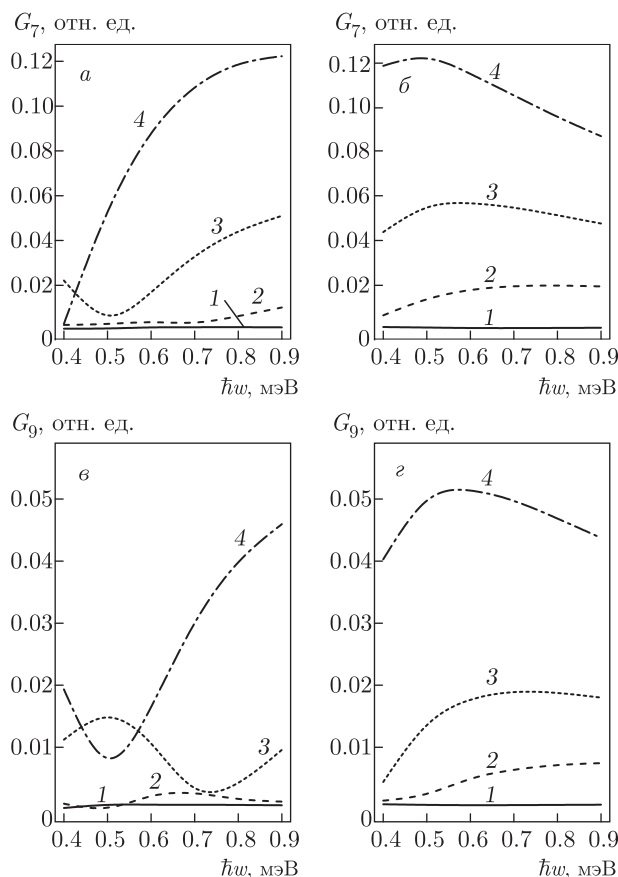
шения уравнений (16)–(18) и проведя интегрирование в уравнении (23), можно вычислить спектры излучения гармоник с помощью преобразования Фурье функции  $G_{x,y}(t)$ . Вероятность испускания  $n$ -й гармоники пропорциональна  $n^2|g_n|^2$ , где  $|g_n|^2 = |g_{xn}|^2 + |g_{yn}|^2$  и  $g_{xn}, g_{yn}$  — компоненты Фурье индуцированного полем полного тока. Чтобы найти  $g_n$ , был использован алгоритм быстрого преобразования Фурье. Для всех графиков мы использовали нормированную плотность тока (27).

На рис. 2 показаны зависимости вероятности испускания гармоник от их номера для различных параметров интенсивности. Как видно на этом рисунке, с увеличением интенсивности волны накачки гармоники выше третьего порядка становятся одинаково существенными.

Чтобы показать различия поведения высших гармоник, на рис. 3 мы построили только высшие гармоники при параметре интенсивности  $\chi > 1$ . Как видно, существуют качественные различия для ве-



**Рис. 4.** Вероятности испускания третьей  $G_3$  и пятой  $G_5$  гармоник в зависимости от энергии фотона  $\hbar\omega$  для параметров интенсивности  $\chi = 0.5$  (кривые 1), 1.0 (2), 1.5 (3), 2.0 (4). Параметр  $k_B T/\hbar\omega = 0.4$ . Волна накачки линейно поляризована. Энергия Ферми  $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$  (а, в) и  $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$  (б, г)



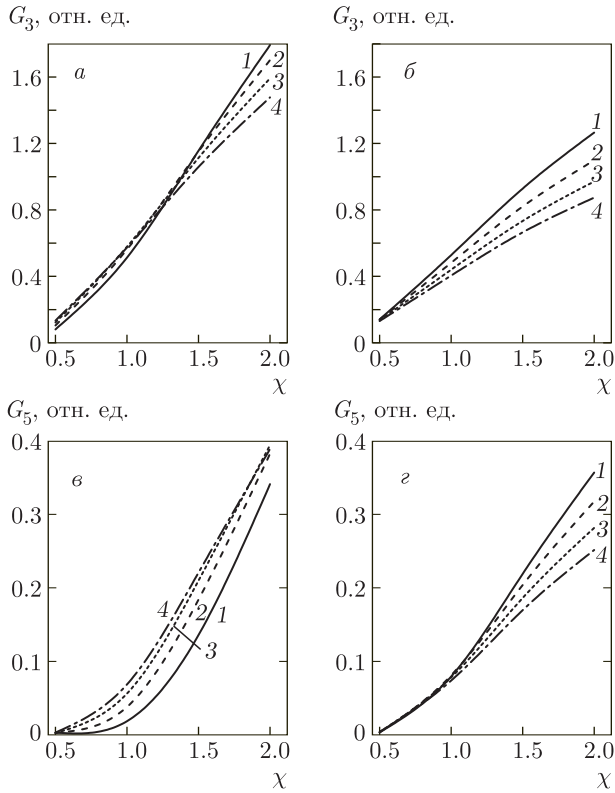
**Рис. 5.** То же, что и на рис. 4, для вероятностей испускания гармоник седьмого  $G_7$  и девятого  $G_9$  порядков

роятностей испускания  $G_n = n^2|g_n|^2$  в зависимости от порядка  $n$ . Функции  $G_7, G_9$  имеют более выраженные нелинейные свойства в сильном поле волны.

Вероятность испускания  $G_n$  высших гармоник в зависимости от частоты волны накачки для различных интенсивностей волны, определяемых параметром  $\chi$ , продемонстрирована на рис. 4 и 5 для  $\mathcal{E}_F > \mathcal{E}_L$  и  $\mathcal{E}_F < \mathcal{E}_L$ . Графики показывают, что для обоих случаев в области низкоэнергетических переходов Лифшица в сильной волне ( $\chi > 1$ ) вероятности испускания  $G_3, G_5$  достигают насыщения с ростом интенсивности волны накачки. Но более высокие гармоники 7 и 9 при  $\mathcal{E}_F > \mathcal{E}_L$  и  $\mathcal{E}_F < \mathcal{E}_L$  с увеличением интенсивности волны ведут себя по-разному. На рис. 6, 7 показаны зависимости вероятности испускания гармоник высшего порядка от интенсивности волны накачки в двухслойном графене. В результате, как видно на рис. 4–7, меняя топологию Ферми и используя ее влияние на ГВГ, можно определить энергию Ферми в графеноподобной на-

ноструктуре. Надо отметить, что при найденных оптимальных параметрах вероятность испускания гармоник значительна при большей интенсивности для рассматриваемой частоты волны.

Чтобы продемонстрировать зависимость скорости излучения от энергии Ферми, на рис. 8 показаны зависимости вероятности испускания третьей  $G_3$ , пятой  $G_5$ , седьмой  $G_7$  и девятой  $G_9$  гармоник от энергии фотонов при фиксированной интенсивности волны накачки и температуре графена. В соответствии с результатами рис. 2–8 при ускорении и аннигиляции частиц или дырок, индуцированных волной накачки, в графеноподобной наноструктуре может быть получено интенсивное излучение высших гармоник при частоте волны накачки в субТГц-области. Таким образом, в сильной волне, определяемой параметром интенсивности  $\chi$ , вероятности испускания высших гармоник различаются по величине для высоких  $\mathcal{E}_F > \mathcal{E}_L$  и низких  $\mathcal{E}_F < \mathcal{E}_L$  энергий Ферми. Это выявляет влияние топологии поверхности Ферми на ГВГ в графеноподобной наноструктуре. Как

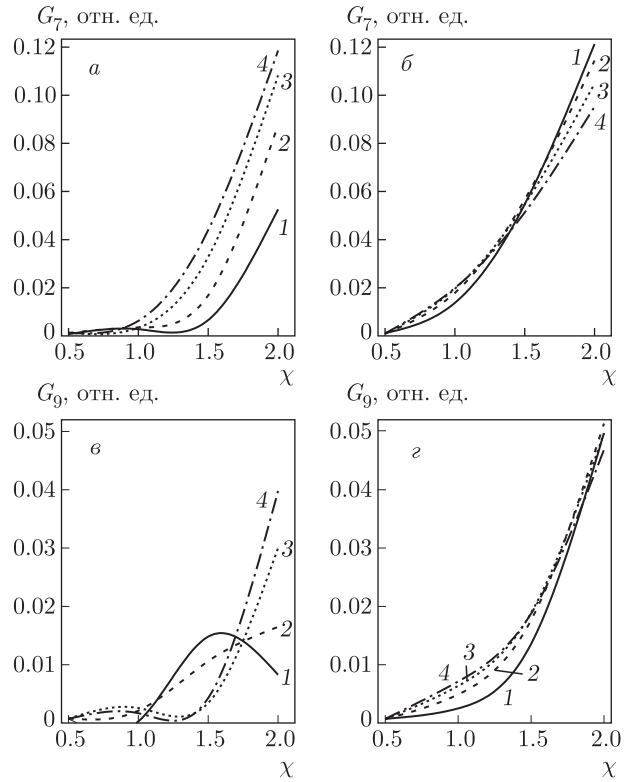


**Рис. 6.** Вероятности испускания гармоник третьего  $G_3$  и пятого  $G_5$  порядков в зависимости от параметра интенсивности  $\chi$  показаны для энергий фотона  $\hbar\omega = 0.5$  мэВ (кривые 1), 0.6 мэВ (кривые 2), 0.7 мэВ (кривые 3), 0.8 мэВ (кривые 4). Параметр  $k_B T/\hbar\omega = 0.4$ . Волна накачки линейно поляризована. Энергия Ферми  $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$  (а, в) и  $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$  (б, г)

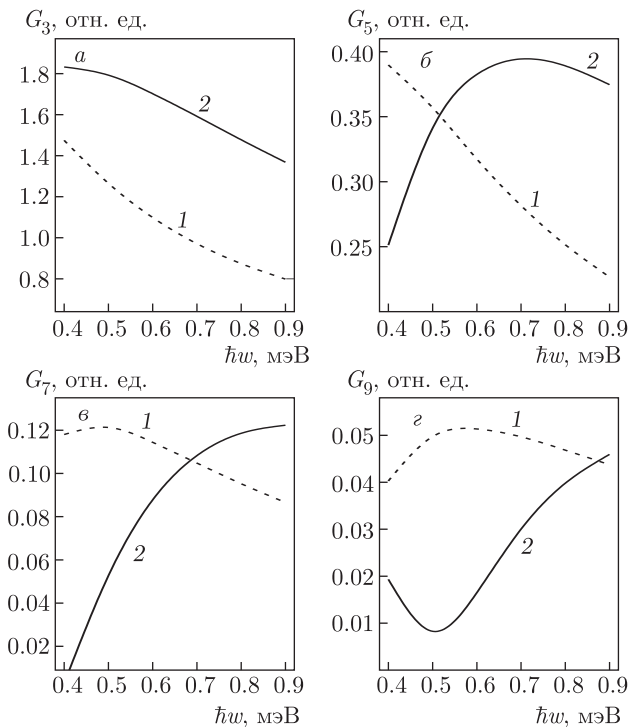
и в случае аналогичных расчетов для интенсивной волны накачки, показано, что вероятность испускания слабо зависит от температуры при  $k_B T < \hbar\omega$ .

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы представили метод исследования влияния топологии поверхности Ферми при ГВГ в графеноподобной наноструктуре на примере двухслойного сложенного АВ-графена. Во время перехода Лифшица происходит фрагментация односвязной линии Ферми на четыре отдельных участка. При этом энергия Ферми равна энергии перехода Лифшица. Итак, теоретическое исследование позволяет оценить энергию Ферми. Мы используем развитую ранее микроскопическую теорию нелинейного взаимодействия двухслойного графена с сильным полем когерентного излучения для случая низкоэнергетического фотона.



**Рис. 7.** То же, что на рис. 6, для вероятностей испускания гармоник седьмого  $G_7$  и девятого  $G_9$  порядков



**Рис. 8.** Зависимости вероятностей испускания третьей  $G_3$ , пятой  $G_5$ , седьмой  $G_7$ , девятой  $G_9$  гармоник от энергии  $\hbar\omega$  фотона для энергий Ферми  $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$  (кривые 1),  $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$  (2). Параметр  $k_B T/\hbar\omega = 0.4$ . Волна накачки с параметром интенсивности  $\chi = 2$  поляризована линейно



Замкнутая система дифференциальных уравнений Лиувилля–фон Неймана для одночастичной матрицы плотности решается численно для переходов Лифшица в двухслойном графене. Для волны накачки взят субТГц-диапазон частот. Показано, что процесс ГВГ для фотонов субТГц-диапазона (длины волн от 0.3 до 1 мм) может наблюдаться уже при интенсивностях  $I_{\chi} = 1\text{--}10^2$  Вт/см<sup>2</sup> при температуре образца  $T < \hbar\omega$ . Полученные результаты показывают, что высшие гармоники чувствительны к изменению топологии поверхности Ферми. Последнее может быть использовано для определения энергии Ферми в таких системах.

**Благодарности.** Выражаем признательность Г. К. Аветисяну за многочисленные обсуждения и постоянное внимание к работе.

**Финансирование.** Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке Республики Армения в рамках научного проекта № 20TTWS-1C010.

## ЛИТЕРАТУРА

1. F. Mackenroth, N. Kumar, A. Di Piazza et al., Proc. SPIE **11039**, 1103902 (2019).
2. H. K. Avetissian, *Relativistic Nonlinear Electrodynamics, The QED Vacuum and Matter in Super-Strong Radiation Fields*, Springer (2016).
3. A. Di Piazza, C. Muller, K. Z. Hatsagortsyan et al., Rev. Mod. Phys. **84**, 1177 (2012).
4. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., Science **306**(5696), 666 (2004).
5. A. K. Geim, Science **324**, 1530 (2009).
6. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
7. F. Langer, M. Hohenleutner, C. P. Schmid et al., Nature **533**, 225 (2016).
8. O. Schubert, M. Hohenleutner, F. Langer et al., Nature Photon. **8**, 119 (2014).
9. G. Vampa, C. R. McDonald, G. Orlando et al., Phys. Rev. Lett. **113**, 073901 (2014).
10. G. Vampa, T. J. Hammond, N. Thir et al., Nature **522**, 462 (2015).
11. G. Ndabashimiye, Sh. Ghimire, M. Wu et al., Nature **534**, 520 (2016).
12. Sh. Ghimire and D. A. Reis, Nature Phys. **15**, 10 (2019).
13. Sh. Imai, A. Ono, and S. Ishihara, Phys. Rev. Lett. **124**, 157404 (2020).
14. S. A. Mikhailov and K. Ziegler, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 384204 (2008).
15. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian et al., Phys. Rev. B **85**, 115443 (2012).
16. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, K. G. Batrakov et al., Phys. Rev. B **88**, 165411 (2013).
17. P. Bowlan, E. Martinez-Moreno, K. Reimann et al., Phys. Rev. B **89**, 041408(R) (2014).
18. I. Al-Naib, J. E. Sipe, and M. M. Dignam, Phys. Rev. B **90**, 245423 (2014).
19. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, Phys. Rev. B **94**, 045419 (2016).
20. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, G. F. Mkrtchian et al., J. Nanophoton. **11**, 016004 (2017).
21. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, Phys. Rev. B **95**, 085436 (2017).
22. D. Dimitrovski, L. B. Madsen, and T. G. Pedersen, Phys. Rev. B **95**, 035405 (2017).
23. N. Yoshikawa, T. Tamaya, and K. Tanaka, Science **356**, 736 (2017).
24. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, Phys. Rev. B **97**, 115454 (2018).
25. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, B. R. Avchyan et al., Phys. Rev. B **100**, 035434 (2019).
26. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan et al., J. Nanophoton. **14**, 026004 (2020).
27. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and Kh. V. Sedrakian, J. Nanophoton. **13**, 036010 (2019).
28. A. G. Ghazaryan, H. H. Matevosyan, and Kh. V. Sedrakian, J. Nanophoton. **14**, 046009 (2020).
29. H. K. Avetissian, B. R. Avchyan, G. F. Mkrtchian, and K. A. Sargsyan, J. Nanophoton. **14**, 026018 (2020).
30. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, Phys. Rev. B **99**, 085432 (2019).
31. G. L. Breton, A. Rubio, and N. Tancogne-Dejean, Phys. Rev. B **98**, 165308 (2018).
32. H. Liu, Y. Li, Y. S. You et al., Nature Phys. **13**, 262 (2017).

33. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, and K. Z. Hatsagortsyan, *Phys. Rev. Res.* **2**, 023072 (2020).
34. A. D. Güçlü, P. Potasz, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, *Graphene Quantum Dots*, Springer-Verlag (2014).
35. Ch. Torre, *Introduction to Quantum Statistical Thermodynamics*, Springer (2015).
36. E. McCann and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 086805 (2006).
37. I. M. Lifshitz, *ЖЭТФ* **38**, 1569 (1960) [*Sov. Phys. JETP* **11**, 1130 (1960)].
38. J. L. Manes, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano, *Phys. Rev. B* **75**, 155424 (2007).
39. G. P. Mikitik and Yu. V. Sharlai, *Phys. Rev. B* **77**, 113407 (2008).
40. D. S. L. Abergel and T. Chakraborty, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 062107 (2009).
41. E. S. Morell and L. E. F. F. Torres, *Phys. Rev. B* **86**, 125449 (2012).
42. J. J. Dean and H. M. van Driel, *Phys. Rev. B* **82**, 125411 (2010).
43. S. Wu, L. Mao, A. M. Jones et al., *Nano Lett.* **12**, 2032 (2012).
44. Y. S. Ang, S. Sultan, and C. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 243110 (2010).
45. N. Kumar, J. Kumar, C. Gerstenkorn et al., *Phys. Rev. B* **87**, 121406 (2013).
46. E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov et al., *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007).
47. J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu et al., *Nature Mater.* **7**, 151 (2008).
48. Y. B. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit et al., *Nature* **459**, 820 (2009).
49. F. Guinea, A. H. C. Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **73**, 245426 (2006).
50. M. Koshino and T. Ando, *Phys. Rev. B* **73**, 245403 (2006).
51. M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Yu. Ivanov et al., *Phys. Rev. A* **49**, 2117 (1994).
52. A. Varleta, M. Mucha-Kruczynski, D. Bischoff et al., *Synth. Met.* **210**, 19 (2015).
53. E. H. Hwang and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **77**, 115449 (2008).
54. J. K. Viljas and T. T. Heikkila, *Phys. Rev. B* **81**, 245404 (2010).
55. I. F. Akyildiz, J. M. Jornet, and C. Han, *Phys. Comm.* **12**, 16 (2014).
56. H. Vettikalladi, W. T. Sethi, A. F. Bin Abas et al., *Int. J. Anten. Propagat.* **2019**, 9573647:1 (2019).