

01

## Нелинейный электромагнитный отклик графена в модели сильной связи

© М.В. Давидович

Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, 410012 Саратов, Россия  
e-mail: davidovichmv@yandex.ru

Поступило в Редакцию 25 декабря 2025 г.  
В окончательной редакции 25 декабря 2025 г.  
Принято к публикации 25 декабря 2025 г.

Рассмотрен линейный и нелинейный отклик взвешенного листа графена при нормальном падении плоской электромагнитной волны в виде квазимонохроматического импульса конечной длительности с резкими фронтами и гармоническим заполнением. Получена генерация нечетных гармоник в отраженном и прошедшем спектрах. Использована теория возмущений на основе квантовой модели сильной связи Уоллеса с разложением по амплитуде поля и с интегрированием по всей зоне Бриллюэна. Решено кинетическое уравнение Больцмана с интегралом столкновений в форме Бхатнагара–Гросса–Крука. Вектор-потенциал поля изменяет квазиимпульс в дисперсионном уравнении. Электромагнитное поле рассмотрено классически. Результаты приведены для THz-частот.

**Ключевые слова:** графен, уравнение Шредингера, модель сильной связи, кинетическое уравнение Больцмана, генерация гармоник.

DOI: 10.61011/JTF.2026.05.62745.338-25

### Введение

Графен обычно ассоциируется как истинно двумерный 2D-материал, что впервые было рассмотрено в приближении модели сильной связи для двумерного стационарного уравнения Шредингера (УШ) с использованием периодического потенциала двух периодических подрешеток атомов углерода в работе [1]. Зонная структура графена имеет вид двух смыкающихся  $\pi^\pm$  подзон с энергиями в виде  $E^\pm(\mathbf{q}) = (\varepsilon_{2p} \pm \gamma_0 w(\mathbf{q})) / (1 \mp \gamma_1 w) \approx \pm \gamma_0 w(\mathbf{q}) + \gamma_1 \gamma_0 w^2(\mathbf{q}) + \varepsilon_{2p}$  [2–6]. Здесь константа связи (nearest-neighbor overlap energy)  $2.5 \leq \gamma_0 \leq 3$ , [eV], существенно больше интеграла перекрытия (overlap integral)  $\gamma_1 < 0.1$  eV,  $\varepsilon_{2p} \approx 0$ . Константы определяются из эксперимента, или из первых принципов вычислений (обычно метод теории функционала плотности). Полагая  $\gamma_1 = 0$ , получаем симметричную структуру зоны Бриллюэна (ЗБ) [5] (см. также [1–14]):

$$w(\mathbf{q}) = \sqrt{1 + 4 \cos(q_x a \sqrt{3}/2) \cos(q_y a/2) + 4 \cos^2(q_y a/2)}. \quad (1)$$

Дисперсионное уравнение (ДУ)  $E(\mathbf{q}) = \pm \gamma_0 w(\mathbf{q})$  связывает энергию продольных движений квазичастиц в плоскости графена с двумерным квазиимпульсом  $\mathbf{p}_\perp = \mathbf{p} = \mathbf{q}\hbar$ , поэтому также обозначаем  $w(\mathbf{q}) = w(\mathbf{p}) = w(p_x, p_y)$  и аналогично для других функций. Константа связи  $\gamma_0 \approx 3$  eV существенно больше интеграла перекрытия  $\gamma_1 \sim 0.1$  eV, которым обычно пренебрегают. В (1)  $a = \sqrt{3}b = 0.246$  nm — постоянная решетки,  $b = 0.142$  nm — расстояние между ближайшими атомами [1–14]. В ряде работ имеет место разброс константы  $\gamma_0$  от 2.5 до 3 eV. Кроме работы Wallace

(1947) зонная структура была получена McClure (1957), а также авторами Slonczewski и Weiss (1958). Если учесть  $\gamma_1$ , то получаем несимметричную ЗБ с энергией

$$E(\mathbf{q}) = \pm \gamma_0 w(\mathbf{q}) / (1 \mp \gamma_1 w) \approx \pm \gamma_0 w(\mathbf{q}) + \gamma_1 \gamma_0 w^2(\mathbf{q}) \quad [4, 15].$$

Эта задача более сложная и не рассматривается. В центре ЗБ функция (1) равна трем. В точках Дирака

$$\mathbf{q}_D = \mathbf{K} = (2\pi/(3\sqrt{3}a), 2\pi/(\sqrt{3}a)) \quad \text{и} \quad w(\mathbf{q}_D^{(\prime)}) = 0.$$

При повороте осей на  $\pi/2$  следует сделать замену  $q_x \leftrightarrow q_y$ , при этом изменяются координаты точек Дирака  $\mathbf{q}_D = \mathbf{K}^{(\prime)}$  [1–14]. В большом числе работ (см. [2–16] и литературу там) ЗБ графена рис. 1, *a, b* представлена в виде дисперсионной поверхности, а также описаны его линейные свойства. В частности, рассмотрена линейная динамическая проводимость графена  $\hat{\sigma}(\omega, k_x, k_y)$  при воздействии плоской электромагнитной волны  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp(-i(\omega t - \mathbf{kr}))$ .

Уравнения Максвелла для плоской волны берем в виде

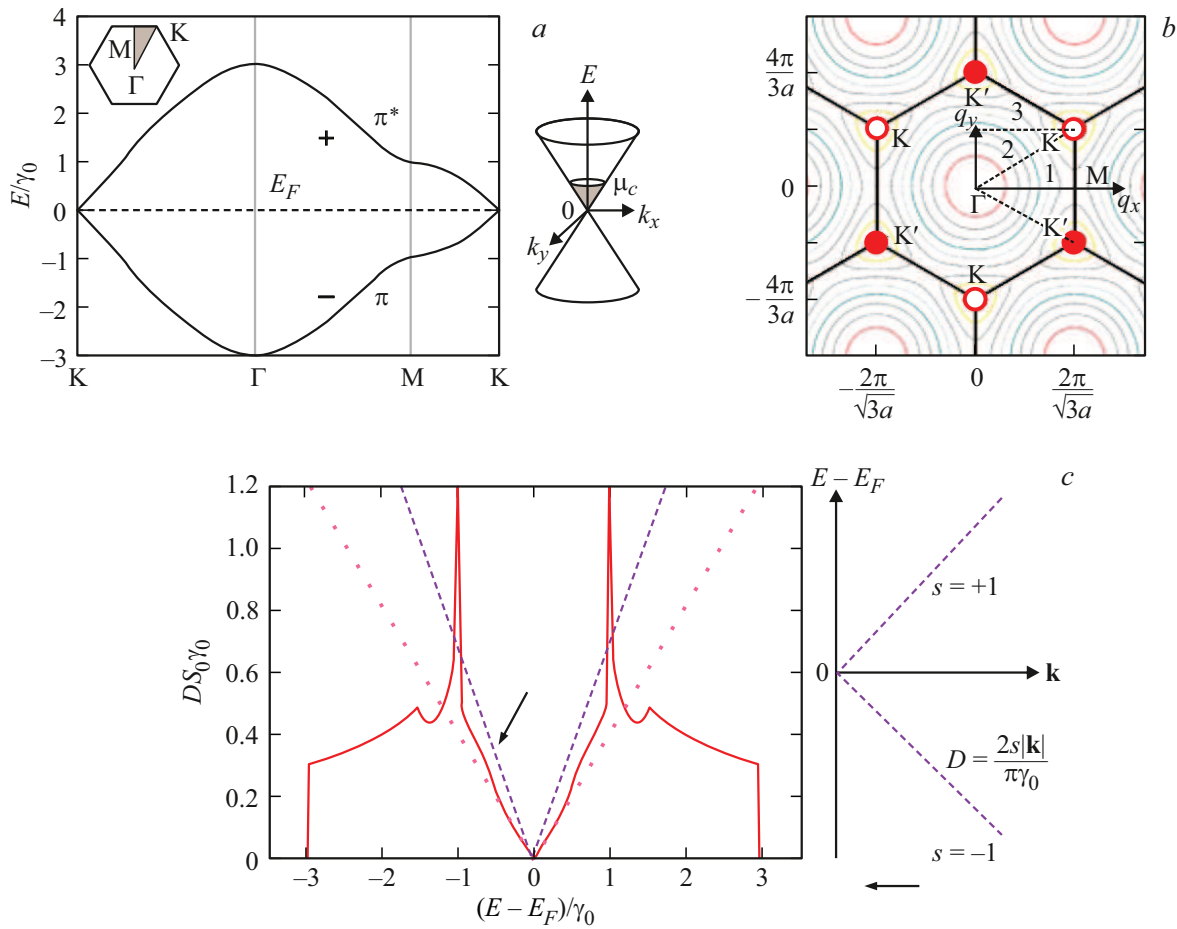
$$\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\mu_0 \partial_t \mathbf{A} + (\partial_t \varepsilon_0)^{-1} \nabla \nabla \cdot \mathbf{A}.$$

Вводим импеданс  $\eta_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$ . Зонная структура (1) получается путем диагонализации 2D-гамильтониана

$$H(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 0 & h(\mathbf{q}) \\ h^*(\mathbf{q}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где

$$h(\mathbf{q}) = \gamma_0 [\exp(iq_x a) + 2 \exp(-iq_x a/2) \cos(q_y a \sqrt{3}/2)].$$



**Рис. 1.** Двумерная зонная структура графена (a) с линиями уровня (b) и плотность состояний на ячейку  $S_0$  при нуле температуры (c). Штриховая линия — линейная модель.

Мы полагаем  $\gamma_0 = 3 \text{ eV}$ , т. е. скорость Ферми

$$v_F = \sqrt{3}\gamma_0 a / (2\hbar) = 0.9739 \cdot 10^6 \text{ m/s.}$$

Вблизи точек Дирака  $h(\mathbf{p}) = v_F[ip_x - p_y]$ . Воздействие электромагнитной волны означает добавление члена  $-e\eta_0 \mathbf{A}/c$  в гамильтониан в виде замены оператора импульса  $\hat{\mathbf{p}}$  на  $\hat{\mathbf{p}} - e\eta_0 \mathbf{A}/c$  (здесь  $e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$  — положительный заряд). Для гармонических полей  $\mathbf{E} = i\omega\eta_0 \mathbf{A}/c$ , что означает введение оператора  $\hat{\mathbf{p}} + ie\mathbf{E}/\omega$ .

Проводимость графена обычно рассматривается как линейный отклик на электрическое поле  $\mathbf{E}$  в модели Кубо–Гринвуда с использованием формализма температурных функций Грина (ФГ) [8]. При конечной температуре графен взаимодействует с тепловым полем как с большим термостатом, не имеет „чистых“ состояний и описывается матрицей плотности  $\hat{\rho}$ , удовлетворяющей уравнению Лиувилля–фон Неймана [17]  $i\hbar\partial_t \hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]$ , а не волновой функцией и УШ. Удобно считать, что в начальном состоянии до воздействия поля матрица является диагональной  $\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_0$  с элементами

$$f^\pm(t_0) = f_0(\epsilon_n(\mathbf{p}^\pm)),$$

где

$$f^\pm(t_0) = f_0^\pm(\mathbf{q}) = [1 + \exp(\pm(\tilde{\gamma}w(\mathbf{q}) - \tilde{\mu}))]^{-1}$$

— функция Ферми–Дирака (ФФД), в которой обозначены безразмерные константы  $\tilde{\gamma} = \gamma_0/(k_B T)$ ,  $\tilde{\mu} = \mu_c/(k_B T)$ . В первом приближении ее диагональные элементы содержат возмущенные функции распределения  $f^\pm(t)$  подзон  $\pi^\pm$ . Для оператора плотности тока в графене имеем [8]:

$$\hat{j}_\alpha = -e\langle \mathbf{q}' | \hat{v}_\alpha(\mathbf{q}', \mathbf{q}) | \mathbf{q} \rangle - e^2 \eta_0 \langle \mathbf{q}' | \hat{m}_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{q}', \mathbf{q}) | \mathbf{q} \rangle A_\beta. \quad (3)$$

Здесь оператор скорости имеет компоненты

$$\hat{v}_\alpha = \partial H(\mathbf{p}) / \partial p_\alpha = \gamma_0 \hbar^{-1} \partial w(\mathbf{q}) / \partial q_\alpha,$$

а обратный оператор тензора массы имеет вид

$$[m_{\alpha\beta}^\pm(\mathbf{q})]^{-1} = \pm(\gamma_0/\hbar^2) \partial_{q_\alpha} \partial_{q_\beta} w(\mathbf{q}),$$

$m_{\alpha\beta}$  — компоненты тензора массы ( $\alpha, \beta = x, y$ ). Величина (3) взята в представлении взаимодействия. При отсутствии взаимодействия усреднение скоростей

$$v_\alpha^\pm(\mathbf{q}) = \pm\gamma_0(\partial/\partial q_\alpha)w(\mathbf{q})/\hbar$$

в подзонах ЗБ с равновесными ФФД дает нуль, т.е. полный средний ток  $\langle \hat{j}_\alpha \rangle$  отсутствует. При действии возмущения от момента  $t_0$  до момента  $t$  систему описываем матрицей плотности. Далее полагаем  $t_0 = 0$ . Нелинейную плотность тока следует взять в виде [8,14]:  $j_\alpha = j_\alpha^+(t) + j_\alpha^-(t)$ ,  $j_\alpha^\pm(t) = j_{0\alpha}^\pm(t) + j_{1\alpha}^\pm(t)$ , где

$$j_\alpha^\pm(t) = \frac{-2e}{(2\pi)^2} \int_{BZ} v_\alpha^\pm(t, \mathbf{q}) f^\pm(t, \mathbf{q}) d^2q + \frac{-2e^2\eta_0}{(2\pi)^2c} \int_{BZ} [m_{\alpha\beta}^\pm(t, \mathbf{q})]^{-1} A_\beta(t) f^\pm(t, \mathbf{q}) d^2q. \quad (4)$$

Здесь индекс  $v = 0$  у  $j_{v\alpha}^\pm(t)$  соответствует нулевой степени явно входящего вектор-потенциала, а  $v = 1$  — первой степени, что соответствует первому и второму членам в (4). Также здесь  $v_\alpha^\pm(\mathbf{q}) = \pm(\gamma_0/\hbar)\partial_{q_\alpha} w(\mathbf{q})$  — компонента групповой скорости в подзонах  $\pi^\pm$ .

Линейный отклик лежащего в плоскости  $z = 0$  бесконечного листа графена на монохроматическую волну

$$\mathbf{E}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\omega_0\mathbf{k}) \cos(\omega_0t - \mathbf{kr}) \quad (5)$$

дается в виде поверхностной плотности тока (далее слово плотность будем опускать) в виде  $j_\alpha(\omega, x, y) = \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k})E_\beta(\omega, x, y, 0)$ ,  $\alpha, \beta = x, y$ , где [8]:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{ie^2}{\pi^2\hbar} \left\{ \sum_{n=1,2} \int_{BZ} \frac{d^2p v_\alpha v_\beta \{f_0(\varepsilon_n(\mathbf{p}^-)) - f_0(\varepsilon_n(\mathbf{p}^+))\}}{[\varepsilon_n(\mathbf{p}^+) - \varepsilon_n(\mathbf{p}^-)]((\omega - i\omega_c)\hbar - \varepsilon_n(\mathbf{p}^+) + \varepsilon_n(\mathbf{p}^-))} + 2\omega\hbar \int_{BZ} \frac{d^2p v_\alpha^2 v_\beta^2 \{f_0(\varepsilon_1(\mathbf{p}^-)) - f_0(\varepsilon_2(\mathbf{p}^+))\}}{[\varepsilon_2(\mathbf{p}^+) - \varepsilon_1(\mathbf{p}^-)]((\omega - i\omega_c)^2\hbar^2 - [\varepsilon_2(\mathbf{p}^+) - \varepsilon_1(\mathbf{p}^-)]^2)} \right\}. \quad (6)$$

В (6)

$$f_0(\varepsilon) = [1 + \exp((\varepsilon - \mu_c)/(k_B T))]^{-1},$$

$$\varepsilon_n(\mathbf{p}) = \varepsilon_n(\hbar\mathbf{q}) = (-1)^n (\gamma_0 w(\mathbf{q}) - \mu_c), \quad n = 1$$

соответствует валентной зоне (ВЗ)  $\pi^-$ ,  $n = 2$  соответствует зоне проводимости (ЗП)  $\pi^+$ , компоненты скорости  $v_\alpha^\pm(\mathbf{q}) = \pm\gamma_0(\partial/\partial q_\alpha)w(\mathbf{q})/\hbar$ ,  $\mathbf{p}^\pm = \mathbf{p} \pm \hbar\mathbf{k}/2 = \hbar(\mathbf{q} \pm \mathbf{k}/2)$ , т.е. учитывается пространственная дисперсия. В частности,

$$\varepsilon_2(\mathbf{p}^+) - \varepsilon_1(\mathbf{p}^-) = \gamma_0 [w(\mathbf{q} + \mathbf{k}/2) + w(\mathbf{q} - \mathbf{k}/2)] - 2\mu_c,$$

$$\varepsilon_n(\mathbf{p}^+) - \varepsilon_n(\mathbf{p}^-) = (-1)^n \gamma_0 [w(\mathbf{q} + \mathbf{k}/2) - w(\mathbf{q} - \mathbf{k}/2)],$$

$$f_0(\varepsilon_n(\mathbf{p}^\pm)) = [1 + \exp((-1)^n (\gamma_0 w(\mathbf{q} \pm \mathbf{k}/2) - \mu_c)/(k_B T))]^{-1}.$$

Интегрирование идет по всей ЗБ. Формула (6) получена как линейный отклик в приближении Кубо с использованием температурных ФГ и техники Мацубары путем усреднения по ансамблю Гиббса, причем учтен только

пропорциональный  $\mathbf{A}$  член в выражении для оператора тока. В ИК- и THz-диапазонах пространственная дисперсия и анизотропные свойства графена не очень существенны [18], поэтому часто используют скалярную проводимость  $\sigma(\omega)$  [7]. В [8] также приведены упрощенные формулы, следующие из (6). Для ультрафиолетового диапазона с квантами  $\hbar\omega \geq \gamma_0$  рвутся  $\sigma$ -связи, и графен можно описать как плазменный слой [19]. Первый член в тензоре (6) соответствует внутризонной проводимости, а второй — межзонной. Тензор (6) действует на спектральную амплитуду  $E_\beta(\omega, x, y, 0)$  электрического поля на графене. Если плоская волна имеет амплитуду  $E_0$  и поляризацию вдоль оси  $x$ , то в (3)  $E_{0x} = E_0 k_z / \sqrt{k_x^2 + k_z^2}$ ,  $E_{0z} = E_0 k_x / \sqrt{k_x^2 + k_z^2} = E_0 k_x / k_0$ . Обозначим  $\tilde{k} = k_x / k_0 = \sqrt{1 - (k_x/k_0)^2}$ . Поскольку  $k_y = 0$ , пространственная дисперсия определяется только компонентой  $k_x$ , и при монохроматическом воздействии в слабом поле имеется линейный отклик

$$j_x(\omega, x, y) = \sigma_{xx}(\omega, k_x) E_x(\omega, k_x x, y, 0) = \sigma_{xx}(\omega, k_x) E_0 \tilde{k},$$

где обозначено полное поле. При распространении плазмонов пространственная дисперсия (ПД) определяется всеми компонентами. Для плоской волны можно записать комплексную амплитуду

$$\dot{\mathbf{E}}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\omega_0\mathbf{k}) \exp(-i(\omega_0t - \mathbf{kr}/c)).$$

При нормальном падении ПД не проявляется.

## 1. Постановка задачи

Пусть плоская квазимонохроматическая волна падает из бесконечности ( $z = -\infty$ ) на бесконечный графеновый лист, расположенный при  $z = 0$ . Полное поле состоит из падающего и дифрагированного полей с компонентами

$$E_x(z, t) = E_x^{in}(z, t) + E_x^d(z, t),$$

$$H_y(z, t) = H_y^{in}(z, t) + H_y^d(z, t),$$

где

$$E_x^{in}(z, t) = E_0 \Pi(t, z) \cos(\omega_0(t - z/c)), \quad (7)$$

$$H_y^{in}(z, t) = E_0 \Pi(t, z) \cos(\omega_0(t - z/c))/\eta_0. \quad (8)$$

Используем зависимость от частоты  $\exp(-iEt/\hbar) = \exp(-i\omega t)$ , обычно применяемую в квантовой механике. В (7) и (8) использован прямоугольный форм-фактор импульса  $\Pi(t, z) = [\chi(t - z/c) - \chi(t - \tau - z/c)]$ , движущийся со скоростью света  $c$ . В нем  $\chi(t)$  — функция Хевисайда. В ряде формул  $\chi(t)$  будем опускать, подразумевая ее наличие. Уравнения (7), (8) соответствуют тому, что в момент  $t = 0$  падающий волновой пакет (импульс) подошел к графену, и в этот момент начинается возбуждение тока и отражение. В этот момент объемная плотность тока  $\mathbf{j} = \mathbf{x}_0 J_x(t)\delta(z)$  на графене нулевая, где

$J_x(t)$  — поверхностная плотность тока, т. е. при  $t \leq 0$  дифракции нет. Для рассмотренной падающей волны можно ввести вектор-потенциал  $\mathbf{A} = -x_0 c \partial_t^{-1} E_x / \eta_0$ . Мы подразумеваем отличие форм-фактора от огибающей, которая всегда плавная. В нестационарной электродинамике имеем ФГ

$$G(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\omega t) d\omega = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|} \delta(t - |\mathbf{r}|/c), \tag{9}$$

$$g(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})}{\mathbf{k}^2 - k_0^2} d^3k = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|} \exp(ik_0|\mathbf{r}|). \tag{10}$$

Она интегрально связывает вектор-потенциал  $\mathbf{A}$  с плотностью тока  $\mathbf{j}(x, y, z, t)$ . В нашем двумерном случае  $\mathbf{j}(x, y, z, t) = \mathbf{J}(x, y, t)\delta(z)$ . Если зависимости от двух координат нет, то соответственно ФГ примет вид  $G(z, t) = c\chi(t - |z|/c)/2$  со спектральным ее значением  $g(z, \omega) = -ic \exp(-i\omega|z|/c)/(2\omega)$ . Эта ФГ удовлетворяет уравнению  $(\partial_z^2 + k_0^2)G(z, t) = -\delta(z)$ . Компонента дифрагированного поля определяется через вектор-потенциал  $x_0 A_x^d(z, t)$ :

$$A_x^d(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} G(z - z', t - t') j_x(z', t') dz' = \frac{c}{2} \int_0^{\infty} \chi(t - t' - |z|/c) J(t') dt', \tag{11}$$

$J(t) = J_x(t)$  — поверхностная плотность тока. Интеграл (11) можно записать в пределах от 0 до  $t - |z|/c$ . Соответственно  $\partial_t A_x^d(z, t) = cJ(t - |z|/c)/2$ . Для падающего поля имеем вектор-потенциал

$$A_x^{in}(z, t) = -\frac{cE_0\Pi(z, t)}{\eta_0\omega_0} \sin(\omega_0(t - z/c)). \tag{12}$$

Очевидно, этот результат можно получить и из спектральной ФГ, если взять  $j_x(\mathbf{r}, \omega) = J(\omega)\delta(z)$ , определив  $J(\omega)$ , а затем обратив результат по Фурье. Такой выбор дает поля в виде (7), (8). После дифференцирования (11) найдем компоненты:

$$E_x^d(z, t) = -\eta_0 J(t - |z|/c)/2, \tag{13}$$

$$H_y^d(z, t) = -\text{sgn}(z)J(t - |z|/c)/2, \tag{14}$$

а также их отношение  $E_x^d(z, t)/H_y^d(z, t) = \text{sgn}(z)\eta_0$ . Дифрагированная волна идет в обе стороны и определяется через плотность тока, которую следует найти. Для полного поля имеем

$$E_x(0, t, k_x) = E_0 \tilde{k} \cos(\omega_0 t) - \frac{\eta_0}{2} \int_0^t \Sigma_{xx}(t - t', k_x) E_x(0, t', k_x) dt',$$

где  $\Sigma_{xx}(t, k_x)$  — некий оператор, вообще говоря, интегральный и нелинейный по  $E_0$ . Поле возбуждает ток  $j_x(t, k_x)$ . Поскольку все величины определены на некий момент времени, их спектры мгновенные, т. е. зависят от времени. Определяемый проводимостью ток имеет вид

$$j_{1x}(t, k_x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\omega t) \sigma_{xx}(t, \omega, k_x) E_x(t, \omega, k_x) d\omega.$$

Здесь  $\sigma_{xx}(t, \omega, k_x)$  — мгновенный спектр полной проводимости, и в общем случае он определяет интегральный оператор вида

$$j_{1x}(t, k_x) = \int_0^t \Sigma_{xx}(t - t', k_x) E_x(0, t', k_x) dt'.$$

Это приводит к необходимости решения нелинейных уравнений. В приближении падающего поля его можно считать квазимонохроматическим, при этом  $E_x(\omega) = -i\omega\eta_0 A_x(\omega)/c$ .

Мы рассматриваем длительное воздействие, т. е. считаем  $t$  большим. Тогда при квазимонохроматическом процессе эта плотность в непрерывном спектре содержит основную и высшие гармоники частоты несущей  $\omega_0$  плюс малый непрерывный спектр. При  $z = 0$  электрическое поле непрерывно, откуда

$$E_x^{in}(-0, t) + E_x^{in}(+0, t) = E_x^{in}(+0, t) + E_x^{in}(+0, t).$$

Это соотношение выполняется автоматически. При  $z = 0$  магнитное поле терпит скачок

$$H_y^d(+0, t) - H_y^d(-0, t) = -J(t) = 2E_x^d(0, t)/\eta_0.$$

Если поле действует весьма долго, процесс можно считать периодическим, и тогда при  $t > 0$

$$J(t) \approx J_1 \cos(\omega_0 t) + J_3 \cos(3\omega_0 t) + J_5 \cos(5\omega_0 t) + \dots$$

Реально на непрерывном спектре  $J(\omega)$  имеют место пики на этих частотах. Вводя коэффициент отражения по электрическому полю как  $R(t) = -\eta_0 J(\omega_0 t) \cos(\omega_0 t)/(2E_0)$  для первой гармоники, имеем  $R_1(t) = -\eta_0 J_1/(2E_0)$ . Пренебрегая остальными гармониками, в силу непрерывности для коэффициента прохождения, имеем  $1 + R_1 = T_1$ . Очевидно, можно ввести коэффициенты трансформации гармоник  $R_n = T_n = -\eta_0 J_n/(2E_0)$ . Полученных соотношений не достаточно, чтобы определить плотность тока  $J(t)$ . В линейном случае таким дополнительным соотношением является связь  $J(\omega) = \sigma(\omega)E_x(\omega)$ , приводящая к уравнению

$$E_x(\omega) = J(\omega)/\sigma(\omega) = i\omega\eta_0 [A_x^{in}(\omega) + A_x^d(\omega)]/c,$$

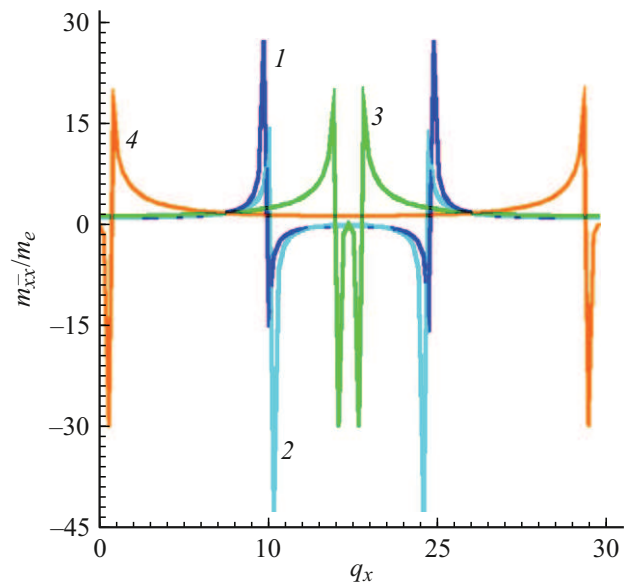
определяющему с учетом  $A_x^d(\omega) = icJ(\omega)/(2\omega)$  плотность тока

$$J(\omega) = \frac{i\omega\eta_0\sigma(\omega)A_x^{in}(\omega)/c}{1 + \eta_0\sigma(\omega)/2}. \tag{15}$$

В нестационарном случае для определения плотности тока следует решать интегральное уравнение во временной области, которое еще и нелинейное при учете нелинейных членов.

Графен — сильно нелинейный материал. Его нелинейные свойства исследованы в большом числе работ. Большинство работ, например, [20–36] использует модель квантовой электродинамики (QED) безмассовых фермионов Дирака в приближении линейной дисперсии  $E(\tilde{\mathbf{q}}) = \pm \hbar |\tilde{\mathbf{q}}| v_F$  с вырождением по долинам  $g_v = 2$  и по спину  $g_x = 2$ , где скорость Ферми равна  $v_F = \sqrt{3} \gamma_0 a / (2\hbar) = 0.974 \cdot 10^6$  м/с (при  $\gamma_0 = 3$  эВ). В такой модели отсчет волнового числа  $\tilde{\mathbf{q}} = \mathbf{q} - \mathbf{q}_D$  и энергии идет от нулевого уровня Ферми (УФ), соответствующего двум точкам Дирака  $\mathbf{K}$  и  $\mathbf{K}'$  (рис. 1, 2). Формальное сходство с QED при воздействии сильного поля на квантовый вакуум привело к большому числу работ по непертурбативным методам определения рождения пар квазичастиц типа эффекта Швингера [29,30] или туннелирования Ландау–Зенера [36]. Следует отметить существенное отличие графена от квантового вакуума. В точках Дирака плотность состояний  $D$  нулевая, как и эффективная масса (рис. 2), а при смещении от них возникает ненулевая эффективная масса, что ставит под сомнение точность моделей безмассовых фермионов. Частицы могут находиться не только в долинах (конусах Дирака), но и в окрестности центра ЗБ, поэтому оценка их числа по плотности состояний (DOS) безмассовой модели приводит к их завышению (на рис. 1, с линейная DOS идет выше реальной). В QED используется электрическая нейтральность, что для функций распределения (ФР) трактуется как электрическая нейтральность электронной и дырочной подсистем  $f(\mathbf{p}, t) = f_e(\mathbf{p}, t) = f_h(\mathbf{p}, t)$  [36]. На самом деле это не так: для графена  $f(\mathbf{p}, t) = f_e(\mathbf{p}, t) = 1 - f_h(\mathbf{p}, t)$  [1,4] (при  $\mu_c = 0$ ), что соответствует сохранению числа частиц (основное условие нормировки в квантовой механике). При нуле температуры в чистом графене зона проводимости ( $\pi^+$  или  $\pi^*$ ) пуста [1], все электроны находятся в валентной зоне (ВЗ), а электрическую нейтральность обеспечивают ионы углерода в решетке. Кроме того, в указанных работах рассматриваются сильные и нестационарные поля, приложенные к графену совместно с линейной дисперсией.

Мы рассматриваем следующие нелинейные эффекты, обуславливающие нелинейный отклик графена. Поле считаем не слишком сильным (не греющим), т.е. не приводящим к разогреву носителей и к изменению температуры и числа частиц в подзонах, а тем более не приводящим к разрыву  $\sigma$ -связей. Такой разрыв происходит в полях порядка  $10^{10}$  В/м, а также при наличии квантов  $\omega \hbar > \gamma_0$ , что может быть при воздействии сильного и очень короткого импульса. Тогда для проводимости следует использовать модель плазменного слоя [19]. Условие  $\omega \hbar < \gamma_0$  означает волновые пакеты с ограниченным спектром. Для такого ограничения можно вместо прямоугольного водить плавные форм-факторы.



**Рис. 2.** Зависимость нормированной эффективной массы  $m_{xx}^-(\mathbf{q})/m_e$  от  $q_x$  при разных  $q_y$ :  $q_y = 0$  (кривая 1),  $q_y = \pi/(3a)$  (2),  $q_y = 2\pi/(3a)$  (3),  $q_y = 4\pi/(3a)$  (4). Пики соответствуют полюсам. Около точек Дирака стремление к нулю почти линейное (кривая 3,  $q_x = 2\pi/(\sqrt{3}a)$ , кривая 4 при  $q_x = 0$  и  $q_x = 4\pi/(\sqrt{3}a)$ ). Диапазон значений  $q_x$ :  $(0, 4\pi/(\sqrt{3}a))$ ,  $\delta = 0$ ,  $\varepsilon = 0$ .

Рассматриваем квазипериодическое поле, действующее достаточно долго и не сильно искажающее ЗБ. Формально мы рассматриваем искажение ЗБ заменой квазиимпульса в (1) на  $\mathbf{p} - \eta_0 e \mathbf{A}(t)/c$  или  $q_x \rightarrow q_x - q_0(t)$ ,  $q_0(t) = e \eta_0 A_x(t)/(\hbar c)$ . Считаем, что усредненная за период „добавка“  $\langle q_0 \rangle$  существенно меньше усредненной по ЗБ величины  $\langle q_x \rangle$ . На момент  $t_0$  действия возмущения система описывается диагональной матрицей плотности, в которую входят невозмущенные ФР подзон. Считаем, что матрица сохраняет диагональный вид, т.е. пренебрегаем недиагональными членами. ФР удовлетворяют кинетическим уравнениям Больцмана (КУБ), которые решаются в приближении Бхатнагара–Гросса–Крука (БГК). Отметим, что по малому параметру  $q_0(t)$  раскладываются как дисперсия (1), так и входящие в (4) компоненты групповых скоростей, тензора эффективной массы и ФР. Указанные разложения имеют вид

$$\begin{aligned} w(t, \mathbf{q}) &= w(\mathbf{q}) + w_1(\mathbf{q})q_0(t) + w_2(\mathbf{q})q_0^2(t) + w_3(\mathbf{q})q_0^3(t), \\ v^\pm(t, \mathbf{q}) &= \pm v_F [v_0(\mathbf{q}) + v_1(\mathbf{q})q_0(t) + v_2(\mathbf{q})q_0^2(t) + v_3(\mathbf{q})q_0^3(t)], \\ f^\pm(t, \mathbf{q}) &= f_0^\pm(t, \mathbf{q}) + f_1^\pm(\mathbf{q})q_0(t) + f_2^\pm(\mathbf{q})q_0^2(t) + f_3^\pm(\mathbf{q})q_0^3(t). \end{aligned} \quad (16)$$

Они приведены в Приложении (формулы (П1)–(П14)). Мы ограничиваемся членами до третьего порядка, что позволяет получить третью гармонику. Поскольку

$$\begin{aligned} [m_{\alpha\beta}^\pm(t, \mathbf{q})]^{-1} A_\beta(t) &= [m_{xx}^\pm(t, \mathbf{q})]^{-1} A_x(t) \\ &= \pm c \gamma_0 [\partial_{q_x}^2 w(t, \mathbf{q})]^{-1} q_0(t) / (e \eta_0 \hbar), \end{aligned}$$

то имеем

$$\begin{aligned} [m_{xx}^{\pm}(t, \mathbf{q})]^{-1} A_x(t) &= \frac{\pm c}{e\eta_0 \hbar w''(\mathbf{q})} \\ &\times \left[ q_0(t) - \frac{w_1''(\mathbf{q})}{w''(\mathbf{q})} q_0^2(t) + \left( \frac{w_1''^2(\mathbf{q})}{w''^2(\mathbf{q})} - \frac{w_2''^2(\mathbf{q})}{w''^2(\mathbf{q})} \right) q_0^3(t) \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Штрих означает производную. После интегрирования по ЗБ в (4) также оставляем члены до третьего порядка, что позволяет определить отклик в виде третьей гармоники. Поскольку мы ввели волновое число  $q_0(t) = e\eta_0 A_x(t)/(\hbar c)$ , то при  $A_x(t) = 1$  А его максимальная амплитуда  $q_0(t) \sim 2 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$ , тогда как среднее значение  $q_x \sim \pi/a \sim 1.3 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}$ . Хотя  $q_x$  изменяется по ЗБ от нуля, можно считать, что при  $A_x(t) < 1 \text{ А/м}^2$  разложение по параметру  $q_0(t)$  справедливо. Считаем  $e\eta_0 A_x(t)a/c \ll 2\hbar$ . На частоте  $\omega = 1 \text{ THz}$  это соответствует напряженности поля  $E_0 < E_{cr} = 1.25 \cdot 10^6 \text{ В/м}$ .

Записывая возмущенный гамильтониан  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \delta\hat{H}$ , имеем уравнение для матрицы плотности  $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0(0) + \delta\hat{\rho}(t)$ :

$$i\hbar\partial_t(\hat{\rho}_0(0) + \delta\hat{\rho}(t)) = \left[ \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\eta_0 \mathbf{A}/c)^2}{2m_e} + V_0(x, y), \hat{\rho}_0(0) + \delta\hat{\rho}(t) \right],$$

где  $V_0$  — периодический потенциал графена, а невозмущенная матрица удовлетворяет уравнению

$$i\hbar\partial_t \hat{\rho}_0(0) = [\hat{H}_0, \hat{\rho}_0(0)] = \hat{H}_0 \hat{\rho}_0(0) - \hat{\rho}_0(0) \hat{H}_0 = 0.$$

Для ее возмущения имеем уравнение

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \delta\hat{\rho}_1(t) &= [\hat{H}_0, \delta\hat{\rho}_1(t)] \\ &+ \left[ \frac{-2e\eta_0 \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}}/c + e\eta_0 \mathbf{A}^2/c^2}{2m_e}, \hat{\rho}_0(0) + \delta\hat{\rho}_1(t) \right] \end{aligned} \quad (18)$$

при начальном условии  $\delta\hat{\rho}(0) = \hat{0}$ . В силу этого условия первый коммутатор при малых временах мал. Величину  $e\eta_0 \mathbf{A}^2/c^2$  во втором коммутаторе можно опустить, поскольку она коммутирует с матрицами. Первый член во втором коммутаторе дает линейный отклик модели Кубо, если слева взять  $\delta\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_1(t)$ , а величину  $\delta\hat{\rho}(t)$  справа в коммутаторе опустить:

$$i\hbar\partial_t \hat{\rho}_1(t) = [\hat{H}_0, \hat{\rho}_1(t)] - \frac{e\eta_0 \mathbf{A}}{m_e c} [\hat{\mathbf{p}}, \hat{\rho}_0(0)]. \quad (19)$$

Если ее оставить, то  $\delta\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_1(t) + \hat{\rho}_2(t)$ , и для нелинейного отклика имеем уравнение

$$i\hbar\partial_t \hat{\rho}_2(t) = [\hat{H}_0, \hat{\rho}_2(t)] - \frac{e\eta_0 \mathbf{A}}{m_e c} [\hat{\mathbf{p}}, \hat{\rho}_1(t) + \hat{\rho}_2(t)].$$

Поскольку  $\hat{\rho}_1(t)$ , согласно (19), пропорциональна  $\mathbf{A} \cdot [\hat{\mathbf{p}}, \hat{\rho}_0(0)]$ , это нелинейное уравнение. Уже матрица  $\hat{\rho}_1(t)$  недиагональная. Если, однако, недиагональные элементы малы, усреднение с матрицей  $\hat{\rho}(t)$  можно заменить на усреднение с ФР  $f^{\pm}(t)$ .

При стационарном решении УШ для графена блоховская волновая функция состоит из двух волновых функций подрешеток:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_A} \psi_A(\mathbf{R}_A) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) + \sum_{\mathbf{R}_B} \psi_B(\mathbf{R}_B) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B),$$

где векторы  $\mathbf{R}_A = n_A \mathbf{a} + n_B \mathbf{b} + \boldsymbol{\tau}_1$  и  $\mathbf{R}_B = n_A \mathbf{a} + n_B \mathbf{b}$  при целочисленных значениях  $n_A$  и  $n_B$ ,  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$  — векторы трансляций

$$\mathbf{a} = a(1, 0), \quad \mathbf{b} = a(-1/2, \sqrt{3}/2), \quad \boldsymbol{\tau}_1 = a(0, 1/\sqrt{3}),$$

$$\boldsymbol{\tau}_2 = a(-1/2, -\sqrt{3}/2), \quad \boldsymbol{\tau}_3 = a(1/2, -\sqrt{3}/2) \quad [2-8],$$

$$\psi_A(\mathbf{R}_Z) = f_A(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_A), \quad \psi_B(\mathbf{R}_B) = f_B(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_B),$$

$$H(\mathbf{q}) \begin{pmatrix} f_A(\mathbf{q}) \\ f_B(\mathbf{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & h(\mathbf{q}) \\ h^*(\mathbf{q}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_A(\mathbf{q}) \\ f_B(\mathbf{q}) \end{pmatrix} = E(\mathbf{q}) \begin{pmatrix} f_A(\mathbf{q}) \\ f_B(\mathbf{q}) \end{pmatrix}.$$

а энергия подзон имеет вид

$$E^{\pm}(\mathbf{q}) = \pm \gamma_0 \left| \sum_{l=1}^3 \exp(-i\mathbf{q}\boldsymbol{\tau}_l) \right|.$$

После диагонализации  $\hat{H}_0 \hat{\rho}_0 = \hat{E} \hat{\rho}_0$ :

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} H_{11} & 0 \\ 0 & H_{22} \end{pmatrix},$$

$$\hat{E} = \begin{pmatrix} +\gamma_0 w(\mathbf{q}) & 0 \\ 0 & -\gamma_0 w(\mathbf{q}) \end{pmatrix},$$

$$\hat{\rho}_0(0) = \begin{pmatrix} f_0^+(\mathbf{q}) & 0 \\ 0 & f_0^-(\mathbf{q}) \end{pmatrix}. \quad (20)$$

При нуле температуры и нулевом химическом потенциале  $f_e(\mathbf{q}) = f^-(\mathbf{q}) = 1$ ,  $f_h(\mathbf{q}) = f^+(\mathbf{q}) = 1 - f_e(\mathbf{q}) = 0$ , электроны полностью заполняют ВЗ, а в ЗП частиц нет. В общем случае для плотности числа частиц имеем

$$n_e(t) = \frac{2}{\Omega S_0} \iint_{BZ} f_e(t, \mathbf{q}) d^2 q,$$

$$n_h(t) = \frac{2}{\Omega S_0} \iint_{BZ} (1 - f_e(t, \mathbf{q})) d^2 q.$$

Здесь  $\Omega = 2(2\pi/a)^2/\sqrt{3}$  —  $2D$  объем ЗБ (рис. 1),  $S_0 = \sqrt{3}a^2/2 = 0.05238 \text{ нм}^2$  — площадь гексагона,  $\Omega S_0 (2\pi)^2$ . Для чистого графена  $n_0 = 3.8 \cdot 10^{19} \text{ 1/м}^2$  соответствует двум  $\pi$ -электронам на гексагон  $S_0$ . Матрица  $\hat{\rho}_1(\mathbf{q})$  не диагональная, но не зависит от координат. Получить решение (18) в общем виде достаточно сложно, но в случае адиабатического включения взаимодействия при квазимонохроматическом процессе для матричных элементов (19) имеем

$$(\rho_1)_{mn} \approx \frac{f_0(E_m) - f_0(E_{mm})}{i\hbar(\omega + i\omega_c) - E_{mm} + E_{nn}} \frac{e\eta_0 \mathbf{A}}{m_e c} \cdot \langle \mathbf{q} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{q} \rangle, \quad (21)$$

где  $\langle \mathbf{q} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{q} \rangle$  — матричный элемент квазимпульса. В нашем случае  $\mathbf{A} = \mathbf{x}_0 A_x = \mathbf{x}_0 c E_x / (i\omega \eta_0)$ ,  $\hat{\mathbf{p}} = \hbar \mathbf{x}_0 \partial_x$ , и формула (21) дает линейный отклик на электрическое поле

при усреднении оператора плотности тока. Ее можно использовать как первое приближение при итерационном решении (18). Мы, однако, не будем решать это уравнение, а будем считать матрицу плотности диагональной. Соответственно тогда надо решать КУБ для ФР:

$$\left( \partial_t + \frac{p_x - \hbar q_0(t)}{m_{xx}(t, \mathbf{q})} \partial_x + \frac{p_y}{m_{yy}(t, \mathbf{q})} \partial_y + F_x \partial_{p_x} + F_y \partial_{p_y} \right) \times f(t, x, y, \mathbf{p}) = J_{col}(t, \mathbf{p}). \quad (22)$$

В этом уравнении  $m_{xx}(t, \mathbf{q})$ ,  $m_{yy}(t, \mathbf{q})$  — компоненты эффективной массы, а  $F_x = -eE_x(t)$ ,  $F_y = -eE_y(t)$  — компоненты силы, действующие на электрон. Поскольку на графене  $E_x$  не зависит от координат, начальная ФР  $f_0(\mathbf{q})$  и интеграл столкновений также не зависят от координат, то можно считать ФР не зависящей от  $x$  и  $y$ , т. е. положить  $\partial_x = 0$  и  $\partial_y = 0$ . Тем самым мы используем ФР в импульсном представлении. В начальный момент  $F_y = -eE_y(0) = 0$ . Решение КУБ следует получать как решения задачи Коши. Для интеграла столкновений в приближении БГК и времени релаксации  $\tau_r(\mathbf{q})$  имеем [4]:

$$J_{col}(t, \mathbf{q}) = \frac{f(0, \mathbf{q}) - f(t, \mathbf{q})}{\tau_r(\mathbf{q})}.$$

Разложения по  $A_x(t)$  есть фактически теория возмущений во времени. Возмущение при квазипериодическом процессе мало, если мала амплитуда. Учитывая, что в начальный момент  $q_0(t) = eE_0 \cos(\omega_0 t) / (\omega_0 \hbar)$ , имеем разложение по амплитуде поля  $E_0$ . Функции  $w'(\mathbf{q}) = w_1(\mathbf{q})$  и  $w'''(\mathbf{q}) = w_3(\mathbf{q})$  нечетные по  $q_x$ , а  $w(\mathbf{q})$  и  $w''(\mathbf{q}) = w_2(\mathbf{q})$  четные. ФР в  $\pi^\pm$  подзонах принимает вид

$$f^\pm(t, \mathbf{q}) = \left[ 1 + \exp \left( \frac{(\pm \gamma_0 (w(\mathbf{q}) + w_1(\mathbf{q}) q_0(t) + w_2(\mathbf{q}) q_0^2(t)/2) - \mu_c)}{k_B T} \right) \right]^{-1}. \quad (23)$$

Знаки  $\pm$  соответствуют  $\pi^\pm$  подзонам. Разлагая экспоненту

$$\exp(u + \delta) = \exp(u) + \exp(u)\delta + \exp(u)\delta^2/2 + \exp(u)\delta^3/6,$$

где обозначены величины

$$\delta = \delta_\pm(t, \mathbf{q}) = \pm \gamma_0 [w_1(\mathbf{q}) q_0(t) / (k_B T) + w_2(\mathbf{q}) q_0^2(t) / (2k_B T)],$$

$$u = u_\pm(\mathbf{q}) = (\pm \gamma_0 w(\mathbf{q}) - \mu_c) / (k_B T),$$

с точностью вплоть до  $q_0^3(t)$ , получаем ( $\pm$  опускаем)

$$f(t, \mathbf{q}) = f(\mathbf{q}) + f_1(\mathbf{q}) q_0(t) + f_2(\mathbf{q}) q_0^2(t) + f_3(\mathbf{q}) q_0^3(t). \quad (24)$$

Коэффициенты приведены в Приложении. Эту формулу запишем также в виде  $f(t, \mathbf{q}) = f(\mathbf{q}) + \Delta f(t, \mathbf{q})$ . Считаем  $k_B T \sim 0.026$  eV, т. е. температуру комнатной.

Внутри ВЗ  $f(\mathbf{q}) \approx 1$ ,  $\exp(u_\pm(\mathbf{q})) \ll 1$ , и поправка экспоненциально мала:  $\Delta f(t, \mathbf{q}) = -\exp(u_\pm(\mathbf{q})) \delta (1 + \delta/2)$ . Внутри ЗП  $f(\mathbf{q}) \approx 0$ ,  $\exp(u_\pm(\mathbf{q})) \gg 1$ , и поправка также экспоненциально мала. Если  $f(\mathbf{q}) = 1/2$  (около УФ), то  $\exp(u_\pm(\mathbf{q})) = 1$ , и поправка также мала:  $\Delta f(t, \mathbf{q}) = -\delta (1 + 3\delta/4)/4$ . В общем случае

$$\Delta f(t, \mathbf{q}) = q_0(t) f_1(\mathbf{q}) + q_0^2(t) f_2(\mathbf{q}) + q_0^3(t) f_3(\mathbf{q})$$

дается формулой (П12).

Указанные формулы можно использовать не решая КУБ, т. е. считая, что возмущение ФР происходит только за счет возмущения ЗБ. Это существенно упрощает задачу. Рассматривая ФР  $f^\pm$  как диагональные элементы матрицы плотности, удовлетворяющие КУБ, получим его решение для гармонического возбуждения. Его удобно рассмотреть в комплексной форме. Тогда для комплексной ФР имеем разложение

$$f^\pm(t, \mathbf{q}) = f^\pm(\mathbf{q}) + f_1^\pm(\mathbf{q}) \exp(-i\omega_0 t) + f_3^\pm(\mathbf{q}) \exp(-3i\omega_0 t),$$

а поле представим через нечетные гармоники

$$\dot{E}_x = E_0 \exp(-i\omega_0 t) + \kappa_{13} E_0 \exp(-3i\omega_0 t).$$

Реальную ФР следует рассматривать как

$$f^\pm(t, \mathbf{q}) = f^\pm(\mathbf{q}) + f_1^\pm(\mathbf{q}) \cos(\omega_0 t) + f_3^\pm(\mathbf{q}) \cos(3\omega_0 t),$$

где взяты модули комплексных амплитуд. Комплексное КУБ в приближении БГК имеет вид

$$\begin{aligned} & \left( -i\omega_0 f_1^\pm + \frac{eE_0}{\hbar} \nabla_{q_x} f_1^\pm(\mathbf{q}) \right) \exp(-i\omega_0 t) \\ & + \left( -3i\omega_0 f_3^\pm + \frac{eE_0 \kappa_{13}}{\hbar} \nabla_{q_x} f_3^\pm(\mathbf{q}) \right) \exp(-3i\omega_0 t) \\ & = - \frac{f_1^\pm(\mathbf{q}) \exp(-i\omega_0 t) + f_3^\pm(\mathbf{q}) \exp(-3i\omega_0 t)}{\tau_r}. \end{aligned} \quad (25)$$

В силу произвольности времени оно распадается на два:

$$(-i\omega_0 + \omega_c) f_1^\pm(\mathbf{q}) = \frac{eE_0}{\hbar} \partial_{q_x} f_1^\pm(\mathbf{q}),$$

$$(-3i\omega_0 + \omega_c) f_3^\pm(\mathbf{q}) = \frac{e}{\hbar} \kappa_{13} E_0 \partial_{q_x} f_3^\pm(\mathbf{q}).$$

Используем приближение

$$\partial_{q_x} f^\pm(\mathbf{q}) \approx \partial_{q_x} f_0^\pm(\mathbf{q}) = \frac{\hbar v_x^\pm}{k_B T} \exp(\pm u(\mathbf{q})) f_0^\pm(\mathbf{q}) [1 - f_0^\pm(\mathbf{q})].$$

В нем  $u(\mathbf{q}) = (\gamma_0 w(\mathbf{q}) - \mu_c) / k_B T$ . Тогда получаем решение

$$f_1^\pm(\mathbf{q}) = \frac{eE_0 v_x^\pm(\mathbf{q})}{k_B T} \exp(\pm u(\mathbf{q})) \frac{f_0^\pm(\mathbf{q}) [1 - f_0^\pm(\mathbf{q})]}{\sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}}, \quad (26)$$

$$f_3^\pm(\mathbf{q}) = \frac{eE_0 \kappa_{13} v_x^\pm(\mathbf{q})}{k_B T} \exp(\pm u(\mathbf{q})) \frac{f_0^\pm(\mathbf{q}) [1 - f_0^\pm(\mathbf{q})]}{\sqrt{9\omega_0^2 + \omega_c^2}}. \quad (27)$$

В них частоту столкновений  $\omega_c = 1/\tau_r$  считаем малой по сравнению с  $\omega_0$ . Если приближено определить  $\kappa_{13}$ , эти соотношения позволяют уточнить третью гармонику, взяв

$$f^\pm(t, \mathbf{q}) = f^\pm(\mathbf{q}) + \left(\frac{\omega_0 \hbar}{eE_0}\right) q_0(t) f_1^\pm(\mathbf{q}) + f_3^\pm(\mathbf{q}) \left[ 4 \left(\frac{\omega_0 \hbar}{eE_0}\right)^3 q_0^3(t) - 3q_0(t) \left(\frac{\omega_0 \hbar}{eE_0}\right) \right]. \tag{28}$$

Малой по сравнению с  $f^0(\mathbf{q})$  величина (26) будет, если  $eE_0 v_F \ll \omega_0 k_B T$ . Взяв частоту  $\omega_0 = 10^{13}$  Hz и полагая время релаксации  $10^{-12}$  s, при комнатной температуре получим поля  $E_0 \ll 10^{10}$  V/m. Поправка (27) меньше примерно в  $\kappa_{13}/3$  раза. Поэтому при не слишком сильных полях и не слишком низких температурах вполне можно взять  $f^\pm(\mathbf{q}) = f_0^\pm(\mathbf{q})$ . Использование (26)–(28) усложняют результат. Считая в (25) ФР  $f_0^\pm(t, \mathbf{q})$  и скорости возмущенными величинами, разложенными по комплексному параметру  $\tilde{q}_0(t) = \tilde{q}_0 \exp(-i\omega_0 t)$ , можно получить более сложные соотношения, учитывающие другие гармоники. В силу нелинейности, решение таких уравнений следует получать итерационно, определяя итерационно  $\kappa_{13}$  с учетом (4).

Строгий временной подход требует вычисления для каждого момента отклика (4) с одновременным решением КУБ во временной области и задачи о возбуждении рассеянного поля током. Соответствующие решения следует использовать в (4). Для получения гармонического состава следует для заданного времени вычислять мгновенные спектры. Такой подход весьма затратный: интегрирование по ЗБ следует проводить для каждого момента времени, а таких моментов для квазимонохроматического процесса весьма много. Интегралы по ЗБ аналитически не вычисляются. Поэтому для получения отклика проще использовать разложения, чтобы интегрировать по ЗБ один раз. Использование разложений позволяет более просто получить отклик в виде третьей гармоники и более высоких гармоник. Если поле не слишком сильное, изменением ФР в КУБ можно пренебречь, т.е. учитываем только разложение (П12). Также можно не учитывать изменение  $A_x$  за счет действия тока.

## 2. Численные результаты

Реально графен следует рассматривать как конечный лист на диэлектрической подложке, возбуждаемый конечным квазимонохроматическим плоским импульсом, как в экспериментах [37–39]. В дисперсии такого листа имеется энергетическая щель  $\delta$  порядка долей eV. Для конечного листа следует одновременно решать нелинейное объемно-поверхностное интегральное уравнение для поля в диэлектрике и плотности тока в графене с учетом полученных выше определений типа (4) и (18) или (22).

При каждом таком моменте времени надо интегрировать по ЗБ и вычислять отклик  $J(t)$ , для которого затем следует определять спектр. Для бесконечного листа необходимо определять отклик с учетом дифракционного поля (11), что также является нелинейной задачей. Нелинейные уравнения следует решать совместно и итерационно. Численная реализация такого процесса — весьма сложная и требующая больших вычислительных ресурсов задача. Существенно проще воспользоваться монохроматическим приближением, используя тот факт, что высшие гармоники малы по сравнению с первой.

Рассмотрим отклик (4). Отсутствие поля приводит к тому, что первый член в (4) при интегрировании по ЗБ обращается в нуль, как и второй. Это связано с тем, что четные функции переменной  $q_x$ , а  $v_x^\pm(0, \mathbf{q})$  — нечетные. Интегрируя во втором члене в (4) интеграл по частям с учетом

$$[m_{xx}^\pm(t, \mathbf{q})]^{-1} = \pm \gamma_0 \partial_{q_x}^2 w(t, \mathbf{q}) / \hbar^2 = \partial_{q_x} v_x^\pm(t, \mathbf{q}) / \hbar,$$

найдем

$$\frac{-2e^2 \eta_0}{(2\pi)^2 c k_B T} \int_{BZ} A_x(t) v_x^{\pm 2}(t, \mathbf{q}) f^\pm(t, \mathbf{q}) [1 - f^\pm(t, \mathbf{q})] d^2 q, \tag{29}$$

поскольку

$$\partial_{q_x} f^\pm(t, \mathbf{q}) = - (f^\pm(t, \mathbf{q}) - f^{\pm 2}(t, \mathbf{q})) v_x^\pm \hbar / (k_B T),$$

а контурный интеграл обращается в нуль. Действительно, при переносе оператора  $\partial_{q_x}$  с  $v_x^\pm$  на  $f^\pm(t, \mathbf{q})$  возникает подстановка  $q_x = \pm 2\pi / (\sqrt{3}a)$  при интегрировании по прямоугольной части ЗБ (рис. 1, b). Она дает нуль в силу периодичности. Остается контурный интеграл, соответствующий треугольной части

$$2 \int_{2\pi/(3a)}^{4\pi/(3a)} [v_x^\pm(t, q_x, q_y) f^\pm(t, q_x, q_y) - v_x^\pm(t, -q_x, q_y) \times f^\pm(t, -q_x, q_y)] dq_y.$$

Имеем  $v_x^\pm(t, \pm q_x, q_y) = 0$  при  $q_y = \pi/a$ . Делая замену  $q'_y = q_y - \pi/a$ , получаем интеграл

$$2 \int_{-\pi/(3a)}^{\pi/(3a)} v_x^\pm(t, q_x, q'_y) [f^\pm(t, q_x, q'_y) + f^\pm(t, -q_x, q'_y)] dq'_y.$$

В нем  $v_x^\pm(t, q_x, q'_y)$  — нечетная функция  $q'_y$ , а  $q_x$  — функция  $q'_y = 0$  функция в скобках четная, поэтому интеграл равен нулю. При использовании разложений по  $q_0$  также легко доказать это утверждение. Таким образом, вторая часть формулы (4) дается интегралом (29).

Интегрирование по ЗБ будем выполнять следующим образом. Обозначим интеграл по треугольнику 1,



(рис. 1, b) как  $I_1(A_x(t))$ . Поскольку  $q_y = \sqrt{3}q_x/2$  на линии  $\Gamma\text{--}\mathbf{K}$ , он равен

$$I_1(A_x(t)) = \int_0^{2\pi/(\sqrt{3}a)} dq_x \left( \int_0^{\sqrt{3}q_x/2} f(\mathbf{q}, A_x(t)) dq_y \right),$$

где  $F(\mathbf{q}, A_x(t))$  — некоторая функция, связанная с  $w$  и ее производными. В силу четности по  $q_y$  такой же интеграл будет по треугольнику ниже первого. По двум треугольникам, зеркально отраженным от оси  $y$ , два интеграла дадут  $2I_1(-A_x(t))$ . Интеграл  $I_2(A_x(t))$  по второму треугольнику 2 определяется также с учетом зависимости  $q_y = -\sqrt{3}q_x/2$  в виде

$$I_2(A_x(t)) = \int_0^{2\pi/(3a)} dq_y \left( \int_0^{-\sqrt{3}q_y/2} f(\mathbf{q}, A_x(t)) dq_x \right).$$

Его также следует удвоить. Аналогично определяется интеграл по треугольнику 3 с вершинами  $(\mathbf{K}', \mathbf{K}, (0, q_y))$  с учетом  $q_y = 4\pi/(3a) - \sqrt{3}q_x/2$ . В интегралах по отраженным от оси  $y$  областям следует изменить знак  $A_x$ . Окончательно полный интеграл по ЗБ равен

$$I(A_x(t)) = 2 \left[ I_1(A_x(t)) + I_1(-A_x(t)) + I_2(A_x(t)) + I_2(-A_x(t)) + I_3(A_x(t)) + I_3(-A_x(t)) \right].$$

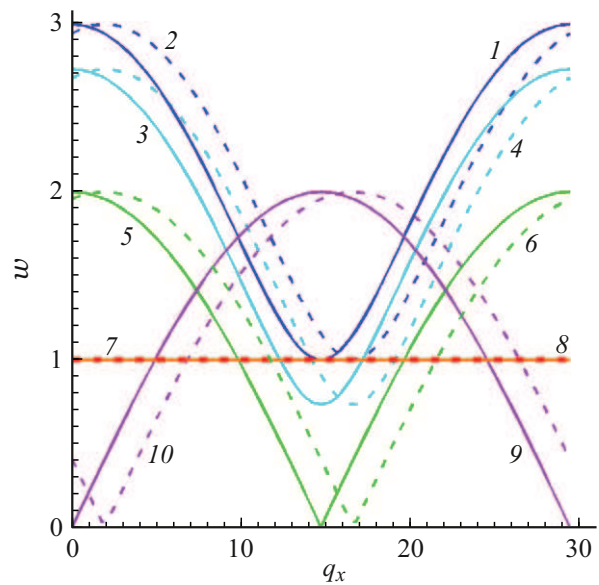
Если возмущения нет, то  $I(0) = 4[I_1(0) + I_2(0) + I_3(0)]$ . Более простой подход к интегрированию состоит в использовании метода стрельбы. Обозначим функцию  $z(x) = 4\pi/(3a) - |x|/\sqrt{3}$ . В двойном цикле с шагами  $\Delta q_x$  и  $\Delta q_y$  по области  $-2\pi/(\sqrt{3}a) < q_x < 2\pi/(\sqrt{3}a)$ ,  $-4\pi/(3a) < q_y < 4\pi/(3a)$  учитываем только те точки, которые удовлетворяют неравенству  $|q_y| < z(q_x)$ . Только они принадлежат ЗБ. Результат следует умножить на отношение числа учтенных точек к полному их числу и на  $\Delta q_x \Delta q_y$ .

Для определения нелинейного отклика рассмотрим соотношение (4). В нем учтем разложения по  $q_0(t)$ . Также можно разлагать массу. Удобнее взять (4) с учетом (30) в виде

$$j_x^\pm(t) = \frac{2e}{(2\pi)^2} \int_{BZ} v_x^\pm(t, \mathbf{q}) f^\pm(t, \mathbf{q}) \times \left[ \frac{q_0(t) v_x^\pm(t, \mathbf{q}) \hbar}{k_B T} (f^\pm(t, \mathbf{q}) - 1) - 1 \right] d^2 q. \quad (30)$$

Мы рассмотрим электроны в ЗП, т.е. берем  $j_x^+(t) = j_{x1}^+ q_0(t) + j_{x3}^+ q_0^3(t)$ , где

$$j_{x1,3}^+ = \frac{2ev}{(2\pi)^2} \int_{BZ} F_{1,3}^+(\mathbf{q}) d^2 q,$$



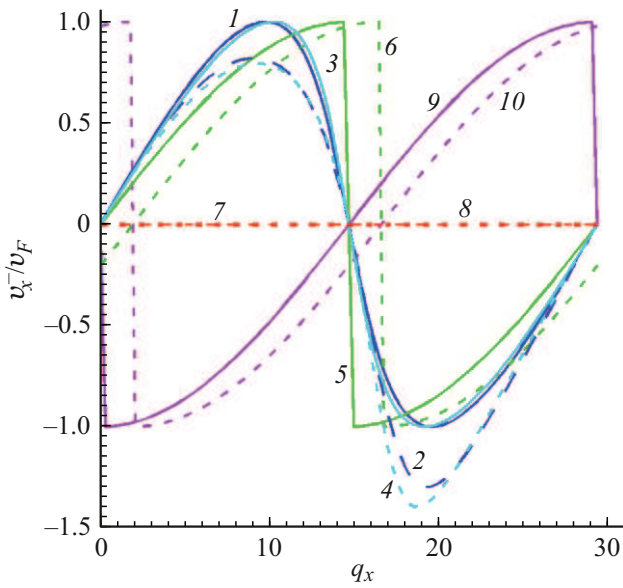
**Рис. 3.** Зависимость невозмущенной ЗБ  $w(\mathbf{q})$  (сплошные линии) и  $w(t, \mathbf{q})$  (штриховые линии) от  $q_x$  (1/nm) при  $q_0 = 1.91 \text{ nm}^{-1}$  ( $A_x = 1 \text{ \AA}$ ) и разных  $q_y$ :  $q_y = 0$  (кривые 1,2),  $q_y = \pi/(3a)$  (3,4),  $q_y = 2\pi/(3a)$  (5,6),  $q_y = \pi/a$  (7,8),  $q_y = 4\pi/(3a)$  (9,10). Диапазон значений  $q_x$ :  $(0, 4\pi/(\sqrt{3}a))$ ,  $\delta = 0$ ,  $\varepsilon = 0$ .

$$F_1^+(\mathbf{q}) = - \left( v_0(\mathbf{q}) f_1^+(\mathbf{q}) + v_1(\mathbf{q}) f_0^+(\mathbf{q}) + v_0(\mathbf{q}) \frac{v_F \hbar}{k_B T} f_0^+(\mathbf{q}) (1 - f_0^+(\mathbf{q})) \right),$$

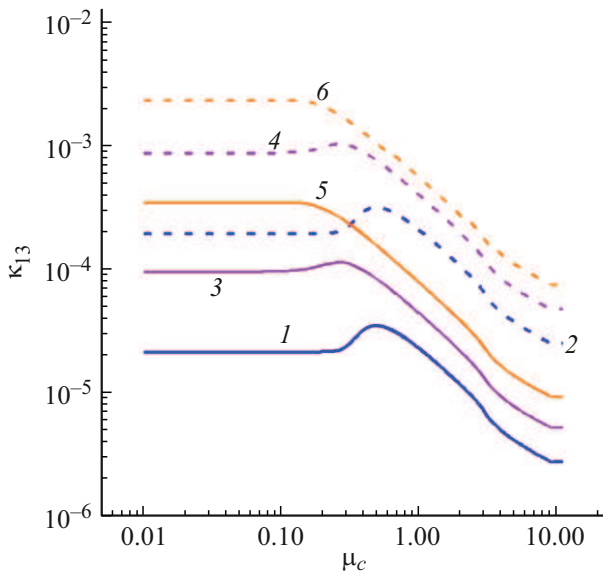
$$F_3^+(\mathbf{q}) = - \left( v_0(\mathbf{q}) f_3^+(\mathbf{q}) + v_3(\mathbf{q}) f_0^+(\mathbf{q}) + v_1(\mathbf{q}) f_2^+(\mathbf{q}) + v_2(\mathbf{q}) f_1^+(\mathbf{q}) + v_1(\mathbf{q}) f_2^+(\mathbf{q}) + v_0(\mathbf{q}) v_0(\mathbf{q}) f_2^+(\mathbf{q}) \frac{v_F \hbar}{k_B T} \right. \\ \times (f_0^+(\mathbf{q}) - 1) + v_0(\mathbf{q}) v_1(\mathbf{q}) f_1^+(\mathbf{q}) \frac{v_F \hbar}{k_B T} (f_0^+(\mathbf{q}) - 1) + 2v_0(\mathbf{q}) \\ \left. \times v(\mathbf{q}) f_1^+(\mathbf{q}) f_0^+(\mathbf{q}) \frac{v_F \hbar}{k_B T} + v_0(\mathbf{q}) v_0(\mathbf{q}) f_2^+(\mathbf{q}) f_0^+(\mathbf{q}) \frac{v_F \hbar}{k_B T} \right).$$

Коэффициент генерации третьей гармоники теперь можно оценить как  $\kappa_{13} = e^2 E_0^2 |j_{x3}^+ / j_{x1}^+| / (\hbar^2 \omega_0^2)$ .

На рис. 2 приведен расчет компоненты  $m_{xx}$  в ВЗ (см. Приложение, формула (П.15)). На рис. 3 приведен расчет ЗБ, а на рис. 4 —  $x$ -компоненты скорости. Показаны их искажения под действием вектор-потенциала. Величина  $q_x$  изменяется от центра ЗБ до центра соседней ЗБ. Величины массы и скорости в подзонах отличаются знаками, поскольку  $E(\mathbf{q}) = \pm \gamma_0 w(\mathbf{q})$ . Компонента эффективной массы, согласно формуле (П.15), имеет полюсы, соответствующие выбросам на рис. 2. От точек Дирака в малых их окрестностях масса изменяется от нуля по линейному закону. Центре ВЗ эффективная масса положительная и скалярная  $m^* = 2\hbar/(\gamma_0 a^2) = 0.834 m_e$ , а в центре ЗП



**Рис. 4.** Зависимость нормированной компоненты скорости  $v_x^-(\mathbf{q})/v_F$  (сплошные линии) и  $v_x^-(t, \mathbf{q})/v_F$  (штриховые линии) от  $q_x$  (1/nm) при  $q_0 = 1.91 \text{ nm}^{-1}$  ( $A_x = 1 \text{ A}$ ) и разных  $q_y$ :  $q_y = 0$  (кривые 1),  $q_y = \pi/(3a)$  (2),  $q_y = 2\pi/(3a)$  (3),  $q_y = \pi/a$  (4),  $q_y = 4\pi/(3a)$  (5). Диапазон значений  $q_x$ :  $(0, 4\pi/(\sqrt{3}a))$ ,  $\delta = 0$ ,  $\varepsilon = 0$ .



**Рис. 5.** Зависимость  $\kappa_{13}$  от химического потенциала  $\mu_c$  (eV) для разных частот (THz), амплитуд поля (V/m) и щели  $\varepsilon$  (eV):  $\omega_0 = 10$ ,  $E_0 = 10^4$ ,  $\varepsilon = 0.3$  (кривая 1);  $\omega_0 = 3.3$ ,  $E_0 = 10^4$ ,  $\varepsilon = 0.3$  (2);  $\omega_0 = 10$ ,  $E_0 = 10^4$ ,  $\varepsilon = 0.16$  (3);  $\omega_0 = 3.3$ ,  $E_0 = 10^4$ ,  $\varepsilon = 0.16$  (4);  $\omega_0 = 10$ ,  $E_0 = 10^4$ ,  $\varepsilon = 0.095$  (кривая 5);  $\omega_0 = 10$ ,  $E_0 = 3.3 \cdot 10^4$ ,  $\varepsilon = 0.095$  (6).

$m^* = -0.834m_e$ . Отрицательная эффективная масса в ЗП соответствует изменению кривизны дисперсии и означает противоположное движение дырки в ВЗ, как это обычно трактуется в теории полупроводников.

На рис. 5 дано вычисление коэффициента  $\kappa_{13}$ . Получение больших значений химического потенциала требует допирования, либо приложение внешнего поля, для чего графен удобно помещать на металлизированную подложку. Это приводит к увеличению нелинейного отклика в отраженной волне. Для комнатной температуры и недопированного графена влияние температуры приводит к значению концентрации [16]  $n_e(T) = \pi(k_B T)^2 / (6\hbar^2 v_F^2) \approx 0.8 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$ . С учетом  $\mu_c = (\hbar v_F) \sqrt{\pi n_e / 2}$  находим  $\mu_c = 0.023 \text{ eV}$ , и для  $E_0 = 10^6 \text{ V/m}$ ,  $\omega_0 = 10^{13} \text{ Hz}$  получаем  $\kappa_{13} = 1.6 \cdot 10^{-3}$ , что согласуется с экспериментами в [37,38]. Используя его и уточнение по (28), получаем коррекцию  $\kappa_{13} = 1.71 \cdot 10^{-3}$ . Решать КУБ для временной области следует для сильно нестационарных процессов.

## Заключение

Для моделирования транспортных процессов в графене часто используют ЗБ в виде конусов Дирака [20–36]. Отметим недостатки указанных подходов. На самом деле конуса имеют не круглые, а треугольные (со сглаженными углами) сечения (рис. 1, b), причем для энергий больше 1 eV они переходят в кривую поверхность центра ЗБ. В работе [29] замена квазиимпульса  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \eta_0 e \mathbf{A} / c$  использована для нестационарного уравнения Дирака с линейным по времени вектор-потенциалом  $\mathbf{A}$ , т.е. с постоянным во времени электрическим полем. Статические поля, при которых происходят явления разрушения связей в графене, весьма высокие: порядка  $10^{10} \text{ V/m}$ . Однако в полях на 2–3 порядка ниже ЗБ существенно искажается (см. далее). В гармонических полях носители заряда колеблются и ускоряются только на половине периода, т.е. их пробег с ростом частоты существенно падает обратно пропорционально квадрату частоты. При этом  $\mathbf{E}(\omega) \sim \omega \mathbf{A}(\omega)$ . Использование линейной дисперсии  $E(\mathbf{q}) = \pm |\mathbf{p}| v_F$  вместо  $E(\mathbf{q}) = \pm \gamma_0 w(\mathbf{q})$  в указанных работах подразумевает, что квазичастицы находятся только в весьма малых окрестностях конусов Дирака (двух долинах). Оценка при таком приближении числа электронов при нуле температуры в ВЗ на основе DOS  $D(E) = g_s g_v |E| / (2\pi \hbar^2 v_F^2)$  дает значение [16]  $n_e^{(0)} = 9\gamma_0^2 / (\pi \hbar^2 v_F^2)$  в 1.6 раза большее, чем  $n_0 = 3.8 \cdot 10^{19} \text{ 1/m}^2$  (соответствующее двум  $\pi$ -электронам на графеновый гексагон  $S_0$ ). Это связано с линейной аппроксимацией  $D$  (стрелка на рис. 1, c) в приближении линейной дисперсии. Распределение типа рис. 1, c получается, в частности, методом теории функционала плотности. Таким образом, долинное вырождение  $g_v = 2$  приводит к завышению DOS. Это говорит о том, что целесообразно строить модели, использующие всю ЗБ. В большом числе работ нелинейные свойства исследованы экспериментально [37–50]. В работе [51] разрабатывается общая квантовая теория нелинейной локальной динамической проводимости третьего порядка для линейной дисперсии. В работе [52]

исследованы феноменологические параметры релаксации на оптическую нелинейность третьего порядка в легированном графене с помощью решения уравнения Блоха в точках Дирака на основе теории возмущений. В большом числе работ теоретически и экспериментально обнаружена генерация нечетных гармоник. В экспериментальных работах [40,47] проводится также и теоретический анализ. Существенное число работ посвящено феноменологическим нелинейным моделям (см. [40,52–54]). В них, как правило, задается нелинейная проводимость  $\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + \sigma_3(\omega)|\mathbf{E}(x, y, t)|^2$  с откликом  $\mathbf{J}(t) = \sigma(\omega)\mathbf{E}(x, y, t)$  и решаются краевые задачи. В частности, в оптическом диапазоне используется полученная в [40] величина  $\sigma_3(\omega) = 9ie^4v_F^2/(32\omega^4\hbar^3)$ . Решается нелинейное уравнение движения для импульса и КУБ. Аналогичная величина для ТГЧ диапазона приведена в [52]:  $\sigma_3(\omega) = 3ie^4v_F^2/(32\omega^3\hbar^2\mu_c)$ . Отметим, что часто одновременно используется спектральное и временное представления, тогда как во временной области строгая связь должна быть интегральной.

В настоящей работе продемонстрирована возможность решения задачи о нелинейном отклике графена в классическом подходе с использованием интегрирования по всей ЗБ при учете тензорных ненулевых эффективных масс квазичастиц в модели сильной связи [1]. Метод позволяет использовать линейную дисперсию, если в ДУ ввести энергетическую щель, при этом масса уже будет не строго нулевая, а малая. По сути метод является методом возмущений. Без использования разложений по малому параметру метод также применим, но следует решать уравнения во временной области. Метод возмущений применим вплоть до полей порядка  $10^7$  V/m. При более сильных полях следует решать уравнения во временной области и исходить из первых принципов вычислений. По-видимому, ограничения возникают для полей порядка  $10^8$ – $10^9$  V/m. Решение может быть обобщено на произвольную поляризацию.

Диэлектрическая подложка позволяет усилить генерацию гармоник. Поскольку амплитуды гармоник малы, можно решать задачу в линейном монохроматическом приближении. Тогда коэффициент отражения есть  $R(\omega) = (1 - Y(\omega))/(1 + Y(\omega))$ , где нормированная входная проводимость на графене равна

$$Y(\omega) = \sqrt{\varepsilon} \frac{1 + i\sqrt{\varepsilon} \tan(k_0 d \sqrt{\varepsilon})}{\sqrt{\varepsilon} + i \tan(k_0 d \sqrt{\varepsilon})} + \eta_0 \sigma(\omega).$$

Для нее имеет место простая эквивалентная схема, легко определить коэффициент прохождения  $T(\omega)$  и плотность  $J(\omega)$ , а также и поглощенную мощность

$$P = \text{Re}(J^2(\omega)/\sigma(\omega))/2 \\ = \sigma'(\omega)E_0^2(1 - |R^2(\omega)|^2 - |T^2(\omega)|^2)/2.$$

Толщину подложки  $d$  следует выбирать из условия максимума  $P$ . Однако в силу малости проводимости графена можно приближенно взять  $k_0 d \sqrt{\varepsilon} = \pi/2$ . В этом случае

$Y(\omega) \approx \varepsilon$ , и при большой диэлектрической проницаемости  $R(\omega) \approx -1$ . Такая структура создает гармоники в основном в отраженном поле. Металлизируя подложку и подавая на графен потенциал, можно изменять  $\mu_c$  и управлять нелинейностью.

### Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Государственного задания (проект № SRR-2026-0006).

### Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] P.R. Wallace. *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947). DOI: 10.1103/PhysRev.71.622
- [2] T. Ando. *J. Phys. Society Jpn.*, **74** (3), 777 (2005). DOI: 10.1143/jpsj
- [3] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (Imperial College Press, London, UK, 1998)
- [4] G. Lovat, G.W. Hanson, R. Araneo, P. Burghignoli. *Phys. Rev. B*, **87**, 115429 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevB.87.115429
- [5] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 109 (2009). DOI: 10.1103/RevModPhys.81.109
- [6] S. Das Sarma, S. Adam, E.H. Hwang, E. Rossi. *Rev. Mod. Phys.*, **83** (2), 407 (2011). DOI: 10.1103/RevModPhys.83.407
- [7] G.W. Hanson. *J. Appl. Phys.*, **103**, 064302 (2008). DOI: 10.1063/1.2891452
- [8] L.A. Falkovsky, A.A. Varlamov. *Eur. Phys. J. B*, **56**, 281 (2007). DOI: 10.1140/epjb/e2007-00142-3
- [9] L.A. Falkovsky. *OpticJ. Phys. Conf. Ser.*, **129** (1), 012004 (2008). DOI: 10.1088/1742-6596/129/1/012004
- [10] L.A. Falkovsky, S.S. Pershoguba. *Phys. Rev. B*, **76** (15), 153410 (2007). DOI: 10.1103/PhysRevB.76.153410
- [11] Л.А. Фальковский. *УФН*, **182**, 1223 (2012). [L.A. Falkovsky. *Phys. Usp.*, **55**, 1140 (2012). DOI: 10.3367/UFNe.0182.201211i.1223]
- [12] Л.А. Фальковский. *УФН*, **178**, 923 (2008). [L.A. Falkovsky. *Phys. Usp.*, **51**, 887 (2008). DOI: 10.1070/PU2008v051n09ABEH006625]
- [13] A.K. Geim, K.S. Novoselov. *Nat. Mater.*, **6**, 183 (2007). DOI: 10.1038/nmat1849
- [14] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, J.P. Carbotte. *Int. J. Mod. Phys. B*, **21**, 4611 (2007). DOI: 10.1142/S0217979207038022
- [15] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen. *Phys. Rev. B*, **669**, 035412 (2002). DOI: 10.1103/PhysRevB.66.035412
- [16] T. Fang, A. Konar, H. Xing, D. Jena. *Appl. Phys. Lett.*, **91**, 092109 (2007). DOI: 10.1063/1.2776887
- [17] Н.Н. Розанов. *Нелинейная оптика. Часть I. Уравнения распространения излучения и нелинейный отклик среды* (СПб. ГУИТМО, СПб, 2008)
- [18] М.В. Давидович. *ЖТФ*, **94** (3), 385 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.03.57376.312-23 [M.V. Davidovich. *Tech. Phys.*, **69** (3), 265 (2024).]

- [19] M.B. Давидович. Квант. электрон., **49** (9), 868 (2019). DOI: 10.1070/QEL16950 [M.V. Davidovich. Quant. Electron., **49** (9), 868 (2019). DOI: 10.1070/QEL16950]
- [20] S.A. Mikhailov. Europhys. Lett., **79**, 27002 (2007). DOI: 10.1209/0295-5075/79/27002
- [21] M. Lewkowicz, B. Rosenstein. Phys. Rev. Lett., **102**, 106802 ((2009). DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.106802
- [22] B. Dora, R. Moessner. Phys. Rev. B, **81**, 165431 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.81.165431
- [23] B. Rosenstein, M. Lewkowicz, H.C. Kao, Y. Korniyenko. Phys. Rev. B, **81**, 041416(R) (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.81.041416
- [24] M. Mecklenburg, J. Woo, B.C. Regan. Phys. Rev. B, **81**, 245401 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.81.245401
- [25] H.C. Kao, M. Lewkowicz, B. Rosenstein. Phys. Rev. B, **82**, 035406 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.82.035406
- [26] N. Vandecasteele, A. Barreiro, M. Lazzari, A. Bachtold, F. Mauri. Phys. Rev. B, **82**, 045416 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.82.045416
- [27] M. Lewkowicz, H.-C. Kao, B. Rosenstein. Phys. Rev. B, **84**, 035414 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevB.84.035414
- [28] M.O. Goerbig. Rev. Mod. Phys., **83**, 1193 (2011). DOI: 10.1103/RevModPhys.83.1193
- [29] S.P. Gavrilov, D.M. Gitman, N. Yokomizo. Phys. Rev. D, **86**, 125022 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevD.86.125022
- [30] N. Yokomizo. Ann. Phys., **351**, 166 (2014). DOI: 10.1016/j.aop.2014.08.024
- [31] E. Barnes, E.H. Hwang, R. Throckmorton, S. Das Sarma. Phys. Rev. B, **89**, 235431 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevB.89.235431
- [32] S.A. Sato, H. Hirori, Y. Sanari, Y. Kanemitsu, A. Rubio. Phys. Rev. B, **103**, L041408 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.L041408
- [33] S.A. Smolyansky, A.D. Panferov, D.B. Blaschke, N.T. Gevorgyan. Particles, **2**, 208 (2019). DOI: 10.3390/particles2020015
- [34] S.A. Smolyansky, D.B. Blaschke, V.V. Dmitriev, A.D. Panferov, N.T. Gevorgyan. Particles, **3**, 456 (2020). DOI: 10.3390/particles3020032
- [35] S.P. Gavrilov, D.M. Gitman. Eur. Phys. J. Plus, **138**, 171 (2023). DOI: 10.1140/epjp/s13360-023-03786-9
- [36] В.А. Церюпа, Д.В. Чурочкин, В.В. Дмитриев, С.А. Смоленский. ЖТФ, **94** (3), 351 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.03.57371.1-24
- [37] T. Higuchi, C. Heide, K. Ullmann, H.B. Weber, P. Hommelhof. Nature, **550**, 224 (2017). DOI: 10.1038/nature23900
- [38] H.A. Hafez, S. Kovalev, J.-C. Deinert, Z. Mics, B. Green, N. Awari, M. Chen, S. Germanskiy, U. Lehnert, J. Teichert, Z. Wang, K.-J. Tielrooij, Z. Liu, Z. Chen, A. Narita, K. Müllen, M. Bonn, M. Gensch, D. Turchinovich. Nature, **561**, 507 (2018). DOI: 10.1038/s41586-018-0508-1
- [39] S. Kovalev, H.A. Hafez, K.-J. Tielrooij, J.-C. Deinert, I. Ilyakov, N. Awari, D. Alkaraz, K. Soundarapandian, D. Saleta, S. Germanskiy, M. Chen, M. Bawatna, B. Green, F.H.L. Koppens, M. Mittendorf, M. Bonn, M. Gensch, D. Turchinovich. Sci. Adv., **7**, eabf9809 (2021). DOI: 10.1126/sciadv.abf9809
- [40] E. Hendry, P.J. Hale, J. Moger, A.K. Savchenko, S.A. Mikhailov. Phys. Rev. Lett., **105**, 097401 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.097401
- [41] Z. Mics, K.-J. Tielrooij, K. Parvez, S.A. Jensen, I. Ivanov, X. Feng, K. Mullen, M. Bonn, D. Turchinovich. Nature Commun., **6**, 7655 (2015). DOI: 10.1038/ncomms8655
- [42] N. Yoshikawa, T. Tamaya, K. Tanaka. Science, **356**, 736 (2017). DOI: 10.1126/science.aam8861
- [43] I.V. Oladyshkin, S.B. Bodrov, Yu.A. Sergeev, A.I. Korytin, M.D. Tokman, A.N. Stepanov. Phys. Rev. B, **96**, 155401 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.96.155401
- [44] I.V. Oladyshkin, S.B. Bodrov, A.V. Korzhimanov, A.A. Murzanev, Yu.A. Sergeev, A.I. Korytin, M.D. Tokman, A.N. Stepanov. Phys. Rev. B, **106**, 205407 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.205407
- [45] C. Heide, T. Eckstein, T. Boolakee, C. Gerner, H.B. Weber, I. Franco, P. Hom-melhoff. Nano Lett., **21**, 9403 (2021). DOI: 10.1021/acs.nanolett.1c02538
- [46] S. Cha, M. Kim, Y. Kim, S. Choi, S. Kang, H. Kim, S. Yoon, G. Moon, T. Kim, Y.W. Lee, G.Y. Cho, M.J. Park, C.-J. Kim, B.J. Kim, J.D. Lee, M.-H. Jo, J. Kim. Nature Commun., **13**, 6630 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-34337-y
- [47] A.I. Berdyugin, N. Xin, H. Gao, S. Slizovskiy, Z. Dong, S. Bhattacharjee, P. Kumaravadeivel, S. Xu, L.A. Ponomarenko, M. Holwill, D.A. Bandurin, M. Kim, Y. Cao, M.T. Greenaway, K.S. Novoselov, I.V. Grigorieva, K. Watanabe, T. Taniguchi, V.I. Fal'ko, L.S. Levitov, R. Krishna Kumar, A.K. Geim. Science, **375** (6579), 430 (2022). DOI: 10.1126/science.abi8627
- [48] A. Schmitt, P. Vallet, D. Mele, M. Rosticher, T. Taniguchi, K. Watanabe, E. Bocquillon, G. Féve, J.M. Berroir, C. Voisin, J. Cayssol, M.O. Goerbig, J. Troost, E. Baudin, B. Plaçais. Nature Phys., **19**, 830 (2023). DOI: 10.1038/s41567-023-01978-9
- [49] K. Nakagawa, W. Mao, S.A. Sato, H. Ago, A. Rubio, Y. Kanemitsu, H. Hirori. APL Photon., **9**, 076107 (2024). DOI: 10.1063/5.0212022
- [50] Y. Kim, M.J. Kim, S. Cha, S. Choi, C.-J. Kim, B.J. Kim, M.-H. Jo, J. Kim, J.D. Lee. Nano Lett., **24**, 1277 (2024). DOI: 10.1021/acs.nanolett.3c04278
- [51] S.A. Mikhailov. Phys. Rev. B, **93**, 085403 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevB.93.085403
- [52] S.A. Mikhailov, K. Ziegler. J. Phys.: Condens. Matter, **20**, 384204 (2008). DOI: 10.1088/0953-8984/20/38/384204
- [53] J.L. Cheng, N. Vermeulen, J.E. Sipe. Phys. Rev. B, **91**, 235320 (2015). DOI: 10.1103/PhysRevB.91.235320
- [54] A. Ptilakis, D. Chatzidimitriou, E.E. Kriezis. Opt. Quant. Electron., **48**, 243 (2016). DOI: 10.1007/s11082-016-0510-5

## Приложение

Используя дисперсию (1) с подстановкой  $q_x \rightarrow q_x - q_0(t)$ , имеем

$$w(t, \mathbf{q}) = w(\mathbf{q}, q_0) = w(t, \mathbf{q}) = w(\mathbf{q}) + w_1(\mathbf{q})q_0(t) + w_2(\mathbf{q})q_0^2(t) + w_3(\mathbf{q})q_0^3(t) + \dots, \quad (\text{П1})$$

$$w_1(\mathbf{q}) = \frac{\sqrt{3}a}{w(\mathbf{q})} \sin\left(\sqrt{3}a \frac{q_x}{2}\right) \cos\left(\frac{q_y a}{2}\right), \quad (\text{П2})$$

$$w_2(\mathbf{q}) = -\cos\left(\frac{q_y a}{2}\right) \times \frac{6a^2 \cos\left(\frac{q_y a}{2}\right) \sin^2\left(\sqrt{3}a \frac{q_x}{2}\right) + w^2(\mathbf{q}) \cos\left(\sqrt{3}a \frac{q_x}{2}\right)}{8w^3(\mathbf{q})} = \frac{\hbar^2}{2\gamma_0 m_{xx}}. \quad (\text{П3})$$

$$w_3(\mathbf{q}) = \sqrt{3}a^3 \cos\left(\frac{q_y a}{2}\right) \sin\left(\sqrt{3}a \frac{q_x}{2}\right) \frac{6a \cos\left(\frac{q_y a}{2}\right) \left[2 \cos\left(\frac{q_y a}{2}\right) \sin^2\left(\sqrt{3}a \frac{q_x}{2}\right) + \cos\left(\sqrt{3}a \frac{q_x}{2}\right) \times w^2(\mathbf{q})\right] - w^4(\mathbf{q})}{8w^5(\mathbf{q})}. \quad (\text{П4})$$

Функции  $w_1$  и  $w_3$  нечетные по  $k_x$ , а функция  $w_2$  четная. По  $k_y$  функции четные. При малом возмущении  $q_0$  вдали от точек Дирака  $w$  положительная величина. В окрестности точек Дирака  $w_1(\mathbf{q}_D) = 0$ , поскольку либо косинус, либо синус обращаются в нуль, тогда как  $w = 0$  только в самих точках, поэтому функция (П1) неотрицательная (рис. 3). Добавляя под корень малую величину  $\varepsilon$  (энергетическую щель), получим положительную  $w$ .

Для вычисления компонент плотности тока используем групповую скорость в подзонах

$$v_x^\pm(t, \mathbf{q}) = \pm \frac{\gamma_0}{\hbar} \partial_{q_x} w(t, \mathbf{q}) = \mp \frac{2v_F}{w(t, \mathbf{q})} \cos\left(\frac{q_y a}{2}\right) \times \sin\left(\sqrt{3}a \frac{q_x - q_0(t)}{2}\right),$$

в которой знаки относятся к подзонам  $\pi^\pm$ . Для разложения имеем

$$v_x^\pm(t, \mathbf{q}) = \mp v_F [v_0(\mathbf{q}) + v_1(\mathbf{q})q_0(t) + v_2(\mathbf{q})q_0^2(t) + v_3(\mathbf{q})q_0^3(t)], \quad (\text{П5})$$

$$v_0(\mathbf{q}) = \frac{2 \cos\left(a \frac{q_y}{2}\right) \sin\left(\sqrt{3}a \frac{q_x}{2}\right)}{w(\mathbf{q})}, \quad (\text{П6})$$

$$v_1(\mathbf{q}) = \frac{2 \cos\left(a \frac{q_y}{2}\right) [s_1 w(\mathbf{q}) - w_1(\mathbf{q}) \sin\left(\sqrt{3}a \frac{q_x}{2}\right)]}{w^2(\mathbf{q})}, \quad (\text{П7})$$

$$v_2(\mathbf{q}) = v_F \times$$

$$\frac{2 \cos\left(\frac{q_y a}{2}\right) [s_2 w(\mathbf{q}) - s_1 w_1(\mathbf{q}) - \sin\left(\frac{q_x \sqrt{3}a}{2}\right) (w_2(\mathbf{q}) - \frac{w_1^2(\mathbf{q})}{w(\mathbf{q})})]}{w^2(\mathbf{q})}, \quad (\text{П8})$$

$$v_3(\mathbf{q}) = \frac{2 \cos\left(\frac{q_y a}{2}\right) [s_3 w(\mathbf{q}) - s_2 w_1(\mathbf{q}) - s_1 (w_2(\mathbf{q}) - w_1^2(\mathbf{q})/w(\mathbf{q})) - \sin\left(\frac{q_x \sqrt{3}a}{2}\right) w_3(\mathbf{q})]}{w^2(\mathbf{q})}. \quad (\text{П9})$$

В них

$$s_1 = -(\sqrt{3}a/2) \cos(\sqrt{3}a q_x/2),$$

$$s_2 = -(3a^2/8) \sin(\sqrt{3}a q_x/2),$$

$$s_3 = (\sqrt{9}a^3/16) \cos(\sqrt{3}a q_x/2).$$

Функции  $v_0$  и  $v_2$  нечетные по  $q_x$ , а функции  $v_1$  и  $v_3$  — четные. По  $q_y$  все функции четные.

Разлагая входящую в ФР

$$f^\pm(t, \mathbf{q}) = [1 + \exp(u_\pm + \delta_\pm)]^{-1}$$

экспоненту, имеем

$$\exp(u_\pm + \delta_\pm) = \exp(u_\pm) [1 + \delta_\pm + \delta_\pm^2/2 + \delta_\pm^3/6],$$

$$u_\pm(\mathbf{q}) = \pm(\gamma_0 w(\mathbf{q}) - \mu_c)/(k_B T),$$

$$u_\pm(\mathbf{q}) = (\pm\gamma_0 w(\mathbf{q}) - \mu_c)/(k_B T),$$

$$\delta_\pm(t, \mathbf{q}) = \pm\gamma_0 (w_1(\mathbf{q})q_0(t) + w_2(\mathbf{q})q_0^2(t) + w_3(\mathbf{q})q_0^3(t))/(k_B T), \quad (\text{П10})$$

$$\exp(u_\pm + \delta_\pm) = \exp(u_\pm) \pm \frac{\gamma_0 w_1(\mathbf{q})}{k_B T} q_0(t)$$

$$+ \left(\frac{\gamma_0^2 w_1^2(\mathbf{q})}{2(k_B T)^2} \pm \frac{\gamma_0 w_2(\mathbf{q})}{k_B T}\right) q_0^2(t) + \left(\frac{\gamma_0^2 2w_1(\mathbf{q})w_2(\mathbf{q})}{2(k_B T)^2}$$

$$\pm \frac{\gamma_0 w_3(\mathbf{q})q_0^3(t)}{k_B T} + \frac{\gamma_0^3 w_1^3(\mathbf{q})}{6(k_B T)^3}\right) q_0^3(t). \quad (\text{П11})$$

Разлагая дробь, получаем

$$f^\pm(t, \mathbf{q}) = f_0^\pm(\mathbf{q}) - f_0^{\pm 2}(\mathbf{q})(e_1^\pm(\mathbf{q})q_0(t) + e_2^\pm(\mathbf{q})q_0^2(t) + e_3^\pm(\mathbf{q})q_0^3(t)) + f_0^{\pm 3}(\mathbf{q})(e_1^{\pm 2}(\mathbf{q})q_0^2(t) + 2e_1^\pm(\mathbf{q})e_2^\pm(\mathbf{q})q_0^3(t)) - f_0^{\pm 4}(\mathbf{q})e_1^{\pm 3}(\mathbf{q})q_0^3(t).$$

Здесь обозначены коэффициенты разложения ФР

$$f^\pm(t, \mathbf{q}) = f_0^{\pm 1}(\mathbf{q}) + f_1^{\pm 1}(\mathbf{q})q_0 + f_2^{\pm 1}(\mathbf{q})q_0^2 + f_3^{\pm 1}(\mathbf{q})q_0^3, \quad (\text{П12})$$

$$f_0^\pm(\mathbf{q}) = \frac{1}{1 + \exp(u_\pm)},$$

$$f_1^\pm(\mathbf{q}) = -f_0^{\pm 2}(\mathbf{q})e_1^\pm(\mathbf{q}),$$

$$f_2^\pm(\mathbf{q}) = -f_0^{\pm 2}(\mathbf{q})e_2^\pm + f_3^{\pm 3}(\mathbf{q})e_1^{\pm 2}, \quad (\text{П13})$$

$$f_3^\pm(\mathbf{q}) = -f_0^{\pm 2}(\mathbf{q})e_3^\pm(\mathbf{q}) + 2f_0^{\pm 3}(\mathbf{q})e_1^\pm(\mathbf{q})e_2^\pm(\mathbf{q}) - f_0^{\pm 4}(\mathbf{q})e_1^{\pm 3}(\mathbf{q}),$$

четность которых совпадает с четностью индексов, а также коэффициенты разложения экспоненты (П11):

$$e_1^\pm(\mathbf{q}) = \pm \frac{\gamma_0 w_1(\mathbf{q})}{k_B T},$$

$$e_2^\pm(\mathbf{q}) = \left(\frac{\gamma_0^2 w_1^2(\mathbf{q})}{2(k_B T)^2} \pm \frac{\gamma_0 w_2(\mathbf{q})}{k_B T}\right), \quad (\text{П14})$$

$$e_3^\pm(\mathbf{q}) = \left(\frac{\gamma_0^2 2w_1(\mathbf{q})w_2(\mathbf{q})}{2(k_B T)^2} \pm \frac{\gamma_0 w_3(\mathbf{q})q_0^3(t)}{k_B T} + \frac{\gamma_0^3 w_1^3(\mathbf{q})}{6(k_B T)^3}\right).$$

Для используемой диагональной компоненты тензора эффективной массы имеем

$$m_{xx}(\mathbf{q}, t) = \frac{-\hbar^2 w^3(\mathbf{q}, t)/(3\gamma_0 a^2)}{\cos\left(\frac{q_x a}{2}\right) \left[ \cos\left(\frac{q_x a}{2}\right) \sin^2\left(\sqrt{3}a \frac{q_x - q_0(t)}{2}\right) + w^2(\mathbf{q}, t) \cos\left(\sqrt{3}a \frac{q_x - q_0(t)}{2}\right)/2 \right]} \quad (\text{П15})$$

Следует разлагать ее обратную величину

$$m_{xx}^{-1}(\mathbf{q}, t) = m_{xx}^{-1}(\mathbf{q}) + q_0(t)m_{xx1}^{-1}(\mathbf{q}) + q_0^2(t)m_{xx2}^{-1}(\mathbf{q}) + q_0^3(t)m_{xx3}^{-1}(\mathbf{q}),$$

однако это сложное разложение мы не приводим, поскольку удобнее использовать разложение скорости.