

ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В ТРЕУГОЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ ГРАФЕНОВЫХ ТОЧКАХ

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 26 августа 2021 г.,
после переработки 9 октября 2021 г.
Принята к публикации 11 октября 2021 г.

Генерация высших гармоник в плоских квантовых графеновых точках, инициированная интенсивным когерентным излучением, исследована с помощью динамической теории усредненного поля Хартри – Фока. Развита микроскопическая теория, описывающая экстремальный нелинейно-оптический отклик плоских квантовых графеновых точек. Численно решена замкнутая система дифференциальных уравнений для одночастичной матрицы плотности при многофотонном взаимодействии графеновых квантовых точек и сильного лазерного поля. Полученные решения указывают на важность типа ребер и поперечного размера, а также значимость ширины запрещенной зоны и величины лазерного поля в процессе генерации высших гармоник в треугольной квантовой графеновой точке.

DOI: 10.31857/S0044451022020018

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие растет интерес к распространению генерации высших гармоник (ГВГ) на двумерные кристаллы и наноструктуры, такие как полуметаллический графен [1] и полупроводниковые дихалькогениды переходных металлов [2]. Роль графена как эффективного нелинейно-оптического материала обсуждалась во многих теоретических [3–22], а также экспериментальных [23, 24] исследованиях, которые рассматривают различные экстремальные нелинейные оптические эффекты, в частности ГВГ, происходящие в сильных когерентных полях излучения в многофотонном режиме при возбуждении таких наноструктур [25, 26]. С другой стороны, помимо замечательных и уникальных электронных и оптических свойств графена, отсутствие запрещенной зоны, как у всех полуметаллов, сильно ограничивает его применимость, в отличие, например, от двухслойного графена [27–32].

Проблема нулевой энергетической щели была решена путем уменьшения поперечного размера графена [33]. В результате размерного квантования открывается энергетическая щель. Полуметалличе-

ский графен конечных размеров становится полупроводником. Среди углеродных наноструктур особый интерес как нелинейная среда представляют графеновые ленты (наноленты) [33, 34], графеноподобные квантовые точки, такие как замкнуто-выпуклые фуллерены различной базовой симметрии [21, 22] и графеновые квантовые точки (ГКТ) различного латерального размера. Графеновую наноструктуру можно охарактеризовать по тому, сохраняется ли симметрия подрешетки. ГКТ имеет энергетическую щель, которой можно управлять с помощью ее поперечного размера, формы и типа кромки [33, 35]. Для ГКТ возможны два типа ребер: «кресло» и «зигзаг», а наличие или отсутствие симметрии подрешетки играет важную роль в определении электронных свойств графеновых наноструктур [33]. Поведение ГКТ количественно различно для структур с зигзагообразными и креслообразными краями, что связано с краевыми состояниями, присутствующими в системах с зигзагообразными краями [36]. Итак, представляет интерес исследовать процесс ГВГ в ГКТ с разными ребрами. Такая наноструктура демонстрирует оптические свойства, принципиально отличные от свойств графена [37–39]. В то же время носители в ГКТ обладают не менее выдающимися транспортными свойствами, чем графен [3].

* E-mail: amarkos@ysu.am

Важным преимуществом ГКТ перед графеновыми нанолентами [40] является ограничение квази-частиц в пространстве. Последнее может иметь решающее значение для эффективности ГВГ, поскольку ограничение предотвращает распространение электронного волнового пакета в одном дополнительном измерении и, следовательно, может увеличить выход ГВГ [41].

В настоящей работе исследуется ГВГ в треугольной ГКТ, вызванная интенсивным когерентным излучением. Замкнутая система дифференциальных уравнений для одночастичной матрицы плотности при многофотонном взаимодействии ГКТ и сильного лазерного поля решается численно в рамках микроскопической теории, описывающей экстремальный нелинейно-оптический отклик ГКТ. Кулоновское электрон-электронное взаимодействие (ЭЭВ) рассматривается в приближении Хаббарда. Энергетическая щель ГКТ контролируется ее поперечным размером, формой и типом кромки. Полученные решения указывают на значимость латерального размера для процесса ГВГ в треугольных ГКТ с креслообразным и зигзагообразным краями. Таким образом, мы теоретически исследовали влияние квантового ограничения на ГВГ в ГКТ путем систематического изменения латерального размера модельной точки. Обратите внимание, что рассматриваемые квантовые точки экспериментально [33] доступны.

Работа организована следующим образом. В разд. 2 представлена система уравнений для одночастичной матрицы плотности. В разд. 3 мы рассматриваем многофотонное возбуждение и генерацию гармоник в треугольной ГКТ с различными типами краев и с разными поперечными размерами. Наконец, заключение приведено в разд. 4.

2. ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ УСРЕДНЕННОГО ПОЛЯ ХАРТРИ–ФОКА ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В ГКТ

Предположим расположенную в плоскости xy плоскую ГКТ, ограниченную по осям x и y , которая взаимодействует с плоской квазимонохроматической электромагнитной (ЭМ) волной. Будем считать, что ЭМ-волна распространяется перпендикулярно плоскости xy . Мы считаем ГКТ нейтральными. Они будут описаны с использованием эмпирической модели сильной связи (СС) [42], применение которой к ГКТ обсуждалось в работе [33]. Гамильтониан СС может описывать системы конечного раз-

мера, ограничиваясь матричными элементами туннелирования между атомами внутри ГКТ. Полный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}. \quad (1)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \\ & + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \frac{n_i}{2} \right) \left(c_{i\bar{\sigma}}^\dagger c_{i\bar{\sigma}} - \frac{n_i}{2} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

— свободный гамильтониан ГКТ для модели СС, $c_{i\sigma}^\dagger$ — оператор рождения электрона с поляризацией спина σ в узле i , а $\langle i, j \rangle$ указывает на суммирование по ближайшим соседним узлам с переданной энергией t_{ij} , U — энергия ЭЭВ, n_i — полная электронная плотность для узла i .

Гамильтониан СС описывает системы конечного размера, ограничивая матричные элементы t_{ij} туннелирования между атомами внутри квантовой точки. Ненулевые матричные элементы гамильтониана СС, заданные первым членом в выражении (2), соответствуют матричному элементу туннелирования t_{ij} между энергетическими состояниями в соседних узлах. Второй член в (2) представляет собой гамильтониан кулоновского ЭЭВ ($\hat{H}_{ee}$) в приближении Хаббарда, где игнорируются все элементы матрицы кулоновского рассеяния, за исключением членов локального взаимодействия (порядка U) между электронами со спином вверх и вниз, занимающими одну и ту же позицию i (величина $\bar{\sigma}$ противоположна по поляризации спину σ). Операторы $c_{i\sigma}^\dagger$, $c_{i\sigma}$ удовлетворяют правилам антикоммутации

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

которые гарантируют антисимметрию многочастичных состояний.

Мы предполагаем, что до взаимодействия $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle = n_i$. В расчетах взаимодействие между светом и материей описывается в калибровке длины через скалярный потенциал

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

с элементарным зарядом e , радиус-вектором $\mathbf{r}_i$ и напряженностью электрического поля $\mathbf{E}(t)$. В гамильтониане мы пренебрегаем колебаниями решетки. Интеграл перехода t_{ij} между ближайшими соседними атомами ГКТ может быть определен экспериментально и равен $t_{ij} = 2.7$ эВ [3]. Принимается, что поле волны есть

$$\begin{aligned} E_x(t) &= f(t) E_0 \cos \omega t \cos \theta, \\ E_y(t) &= f(t) E_0 \cos \omega t \sin \theta \end{aligned} \quad (3)$$

с частотой ω , огибающей импульса $f(t) = \sin^2(\pi t/T)$, углом θ между напряженностью электрического поля волны осью x . Длительность импульса T равна 20 периодам волны: $T = 40\pi/\omega$. Из уравнения Гейзенберга

$$i\hbar \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = [\hat{L}, \hat{H}]$$

можно получить эволюционные уравнения для одночастичной матрицы плотности $\rho_{ij}^{(\sigma)} = \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$. Кроме того, мы примем, что система релаксирует с вероятностью γ к равновесному распределению $\rho_{0ij}^{(\sigma)}$. Чтобы получить замкнутую систему уравнений для одночастичной матрицы плотности $\rho_{ij}^{(\sigma)} = \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$, ЭЭВ будет рассматриваться в приближении Хартри–Фока:

$$\hat{H}_{ee}^{HF} \simeq \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} \left(\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle - \frac{n_i}{2} \right) \left(c_{i\bar{\sigma}}^\dagger c_{i\bar{\sigma}} - \frac{n_i}{2} \right). \quad (4)$$

Таким образом, получаем следующее уравнение для матрицы плотности:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho_{ij}^{(\sigma)}}{\partial t} &= \sum_k \left(t_{kj} \rho_{ik}^{(\sigma)} - t_{ik} \rho_{kj}^{(\sigma)} \right) + \\ &+ U \left(\rho_{ii}^{(\bar{\sigma})} - \rho_{jj}^{(\bar{\sigma})} \right) \rho_{ij}^{(\sigma)} + e\mathbf{E}(t) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rho_{ij}^{(\sigma)} - \\ &- i\hbar\gamma \left(\rho_{ij}^{(\sigma)} - \rho_{0ij}^{(\sigma)} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Мы численно диагонализуем гамильтониан сильной связи $\hat{H}_0$. Для статической системы гамильтониан Хартри–Фока обращается в нуль, $\hat{H}_{ee}^{HF} \simeq 0$. Следует отметить, что ЭЭВ в пределе Хартри–Фока входит в эмпирический интеграл перехода между ближайшими соседними атомами, t_{ij} , который выбирается близким к экспериментальным значениям. Итак, локальное ЭЭВ в приближении Хартри–Фока актуально в квантовой динамике, иницированной полем лазера накачки и, как мы увидим ниже, значительно изменяет спектр ГВГ. С помощью численной диагонализации мы находим собственные состояния $\psi_\mu(i)$ и собственные энергии ε_μ ($\mu = 0, 1, \dots, N-1$). Результаты численной диагонализации показаны ниже на рис. 3, 4. Без туннелирования все уровни энергии были вырожденными. Мы видим, что туннелирование сняло вырождение и привело к образованию зоны валентных состояний ниже уровня Ферми, $\varepsilon_\mu = 0$, зоны состояний проводимости над уровнем Ферми и щель на уровне

Ферми (см. также работу [33]). Квантовая динамика сильного поля периодически возбуждаемой ГКТ регулируется замкнутой системой дифференциальных уравнений (5), которая должна быть решена с соответствующими начальными условиями. Построим исходную матрицу плотности $\rho_{0ij}^{(\sigma)}$ через заполнение электронных состояний в валентной зоне согласно распределению Ферми–Дирака. Поскольку запрещенная зона достаточно велика, мы предполагаем, что распределение Ферми–Дирака при нулевой температуре имеет вид

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

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ЭФФЕКТИВНОСТИ ГВГ В ТРЕУГОЛЬНЫХ ГКТ

Спектр ГВГ вычисляется с помощью преобразования Фурье $\mathbf{a}(\Omega)$ дипольного ускорения $\mathbf{a}(t) = d^2\mathbf{d}/dt^2$. Дипольный момент определяется как $\mathbf{d}(t) = \langle \sum_{i\sigma} \mathbf{r}_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$. Для точности мы нормируем ускорение диполя на коэффициент $a_0 = \bar{\omega}^2 \bar{d}$, где $\bar{\omega} = 1 \text{ эВ}/\hbar$ и $\bar{d} = 1 \text{ Å}$. Мощность, излучаемая на данной частоте, пропорциональна $|\mathbf{a}(\Omega)|^2$. Чтобы прояснить основные аспекты ГВГ в треугольной ГКТ, мы предполагаем, что частота возбуждающей волны накачки равна $\omega = 0.1 \text{ эВ}/\hbar$, что намного меньше типичного зазора $U \simeq 3 \text{ эВ}$. Вероятность релаксации равна $\hbar\gamma = 50 \text{ мэВ}$ для всех численных расчетов. В большинстве расчетов предполагается, что волна (3) линейно поляризована вдоль оси x ($\theta = 0$). Ось x находится в плоскости рис. 1, 2 и направлена горизонтально вправо. Взаимодействие волна–частица будет характеризоваться работой электрического поля волны на отрезке между ближайшими атомами углерода: $\mathcal{W} = eE_0a$. Нелинейные и многофотонные эффекты имеют место, когда величина $\mathcal{W}$ становится сравнима или больше, чем энергия фотона $\hbar\omega$. В нашей модели гексагональные двумерные наноструктуры формируются из π -орбиталей атомов углерода. В результате мы пренебрегаем переходами на σ и между орбиталями π – σ . Эти орбитали отделены от σ -орбитали большой энергетической щелью (порядка 10 эВ) в несколько t [43]. Следовательно, мы будем рассматривать умеренно сильные волны накачки: $\hbar\omega \ll \mathcal{W} < t$. Для более сильных полей обязательно нужно учитывать другие орбитали атома.

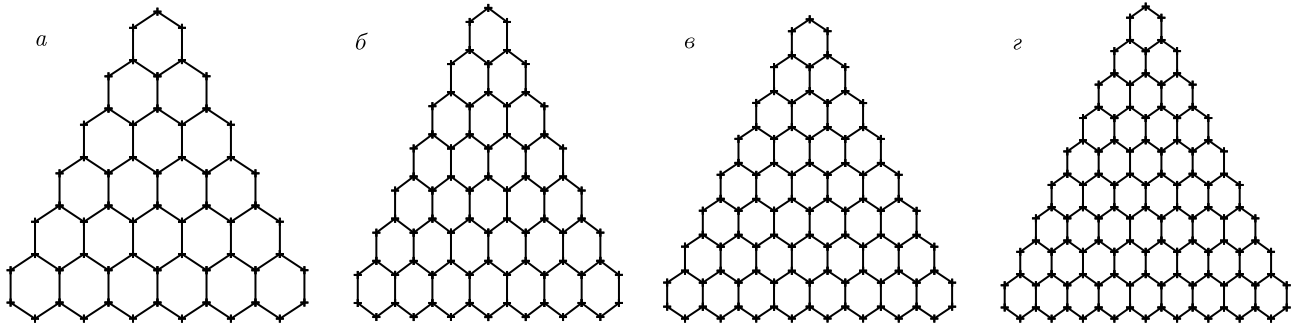


Рис. 1. Схема решетки треугольной ГКТ с зигзагообразными ребрами с $N = 61$ (а), 78 (б), 97 (в), 118 (г) атомами. Расстояние между ближайшими соседними атомами равно $a \simeq 1.42 \text{ \AA}$

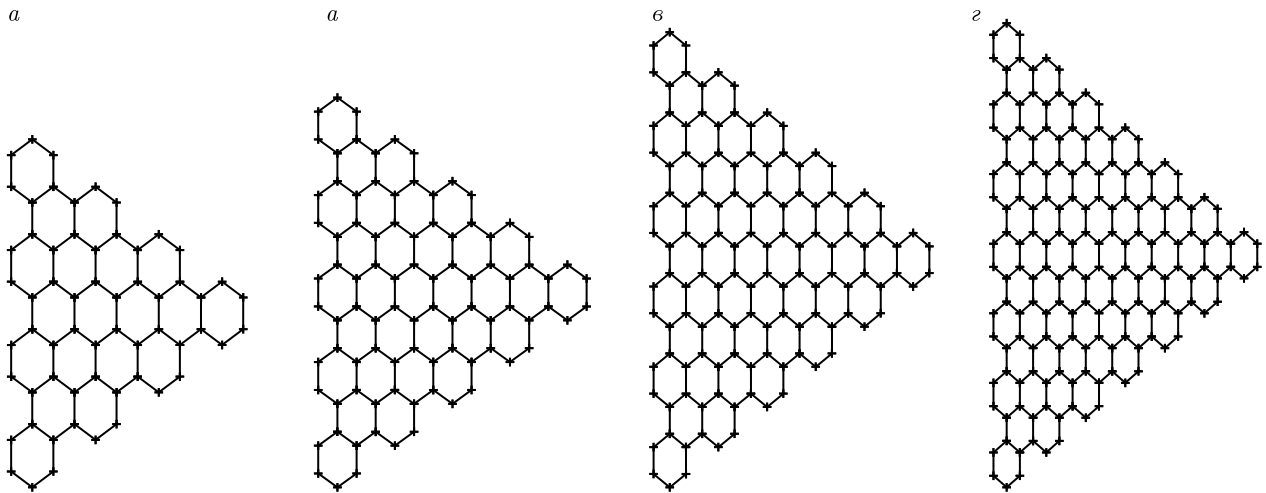


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для треугольной ГКТ с креслообразными краями. Число атомов $N = 60$ (а), 90 (б), 126 (в), 168 (г)

На рис. 1, 2 схематически изображена решетка графена, а на рис. 3, 4 показаны энергетические спектры СС в окрестности уровня Ферми, $\varepsilon_\mu = 0$, для треугольных ГКТ с зигзагообразными и креслообразными краями при разном числе атомов углерода. На рис. 1–4 видно, что с увеличением числа атомов решетки плотность собственных энергетических состояний увеличивается. Как будет видно позже, это увеличит вероятность многофотонного ГВГ.

Чтобы сравнить спектры излучения ГВГ в треугольных ГКТ с разными краями и разным числом атомов решетки, на рис. 5, 6 приведены все результаты для спектров, нормированных на число атомов N . На рис. 5 для компонент $|a_x(\Omega)|$ и $|a_y(\Omega)|$ берется сильная ЭМ-волна с амплитудой $E_0 = 0.3 \text{ В/\AA}$ и энергией ЭЭВ $U \simeq 3 \text{ эВ}$. Как показано на рис. 5, в сильном лазерном поле существенны многофотонные гармоники, а выходы ГВГ для ГКТ одинаково существенны как для креслообразных, так и для

зигзагообразных краев, особенно для больших N . В обоих случаях спектры ГВГ имеют структуру многоступенчатых плато, что связано с возбуждениями собственных энергетических состояний между занятыми энергетическими уровнями и занятым уровнем [33]. ГКТ с креслообразными краями имеет осевую симметрию (см. рис. 2), и, в частности, в этом случае $|a_y| = 0$ (поэтому на рис. 5 кривая $|a_y|$ отсутствует), в то время как в случае зигзагообразных ребер обе компоненты, $|a_x|$ и $|a_y|$, существенны (рис. 5). Кроме того, в спектре ГВГ в ГКТ с креслообразными краями видны только нечетные гармоники, как в обычном графене [1]. Однако для зигзагообразных краев из-за отсутствия инверсионной симметрии в спектре излучения ГВГ присутствуют и нечетные, и четные гармоники. Чтобы это показать наглядно, на рис. 6 отдельно приведены результаты для ГВГ для первых тридцати гармоник при приблизительно одинаковом числе ($N \simeq 60$) атомов треугольной ГКТ с разными краями.

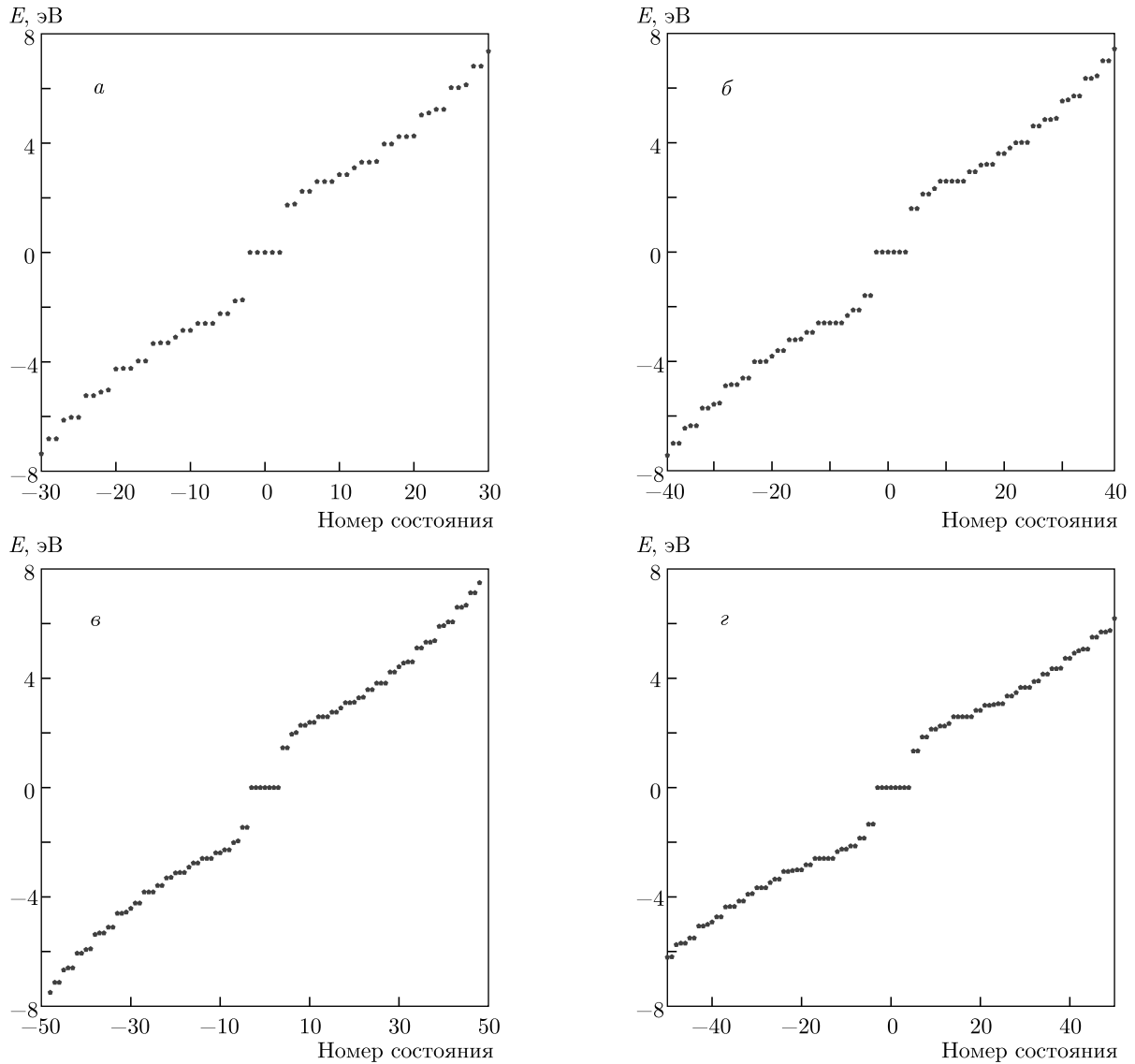


Рис. 3. Собственные энергии в треугольной ГКТ с зигзагообразными ребрами с числом атомов $N = 61$ (а), 78 (б), 97 (в), 118 (г)

Далее мы рассматриваем спектры ГВГ в зависимости от интенсивности волны накачки. На рис. 7 представлены спектры ГВГ в зависимости от амплитуды ЭМ-поля и номеров гармоник при фиксированной энергии ЭЭВ $U \simeq 3$ эВ. Для сравнения мы исследуем ГКТ с приблизительно одинаковым числом атомов углерода, но с разными краями: креслообразными и зигзагообразными. Как показано на рис. 7, вероятность ГВГ возрастает с увеличением числа атомов N и с появлением новых энергетических состояний (также см. рис. 1–4). Номер места отсечки гармоник, когда зависимость на-

чинает резко убывать, линейно возрастает с увеличением напряженности поля. Затем, по достижении гармоник отсечки n_{cut} , соответствующей переходу из самого низкого занятого энергетического уровня на самый высокий незанятый энергетический уровень, скорость ГВГ насыщается (ступенчатая огибающая желтого цвета). Место отсечки гармоник видно на рис. 5: $n_{cut} \simeq 160$. Отметим, что линейная зависимость гармоник отсечки от напряженности поля присуща ГВГ на дискретных уровнях или кристаллам с линейной дисперсией энергии. Как и в случае атомов, для ГКТ при фиксирован-

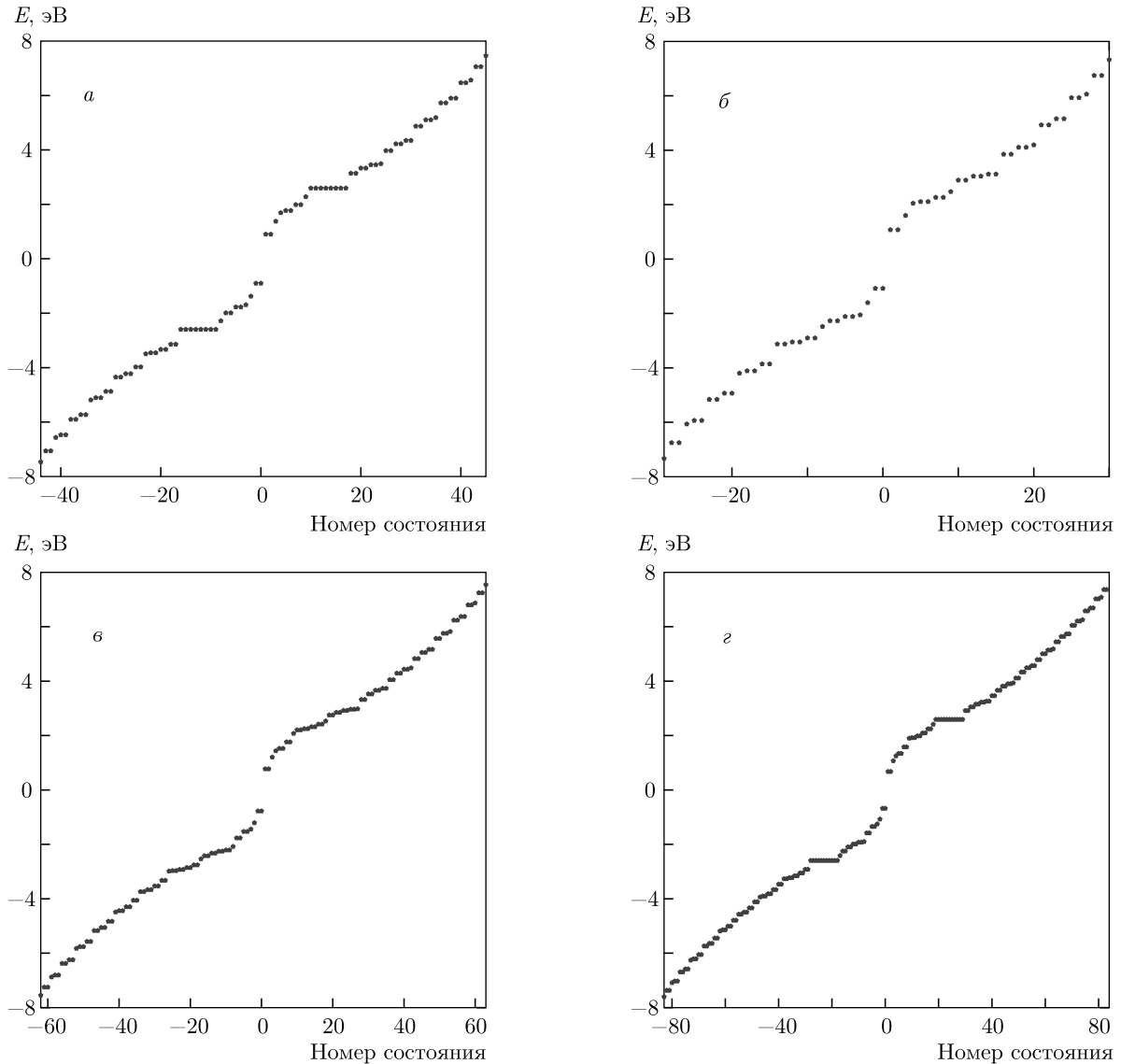


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, но для треугольной ГКТ с креслообразными краями. Число атомов $N = 60$ (а), 90 (б), 126 (в), 168 (г)

ной энергии фотона с увеличением электрической напряженности волны накачки энергия обрезания гармоник ($\hbar\omega_{cut}$) увеличивается.

Кроме того, как было показано в работе [29], локальное ЭЭВ подавляет флуктуацию заряда и снижает поглощенную энергию. Также ожидается подавление выхода ГВГ из-за кулоновского ЭЭВ. Последнее показано на рис. 8, где приведены спектры ГВГ в режиме сильного ЭМ-поля в зависимости от номера гармоники и энергии ЭЭВ для разных краев ГКТ и числа атомов углерода. Как видно на рис. 8, для небольшого числа N атомов ГКТ

с увеличением энергии ЭЭВ скорость ГВГ в целом подавляется (поэтому на рис. 8 приведена зависимость для средних гармоник с номерами меньше чем 40). Последнее не имеет места для больших N , когда увеличивается плотность энергетических состояний (рис. 8в,г). Спектр ГВГ перестает зависеть от кулоновского ЭЭВ. Такое свойство присуще обычному графену [1], неограниченному в пространстве.

Мы также исследовали зависимость спектров ГВГ от ориентации напряженности ЭМ-волны. На рис. 9 представлены графики зависимости спектров при ГВГ от порядка гармоник и ориентации поля

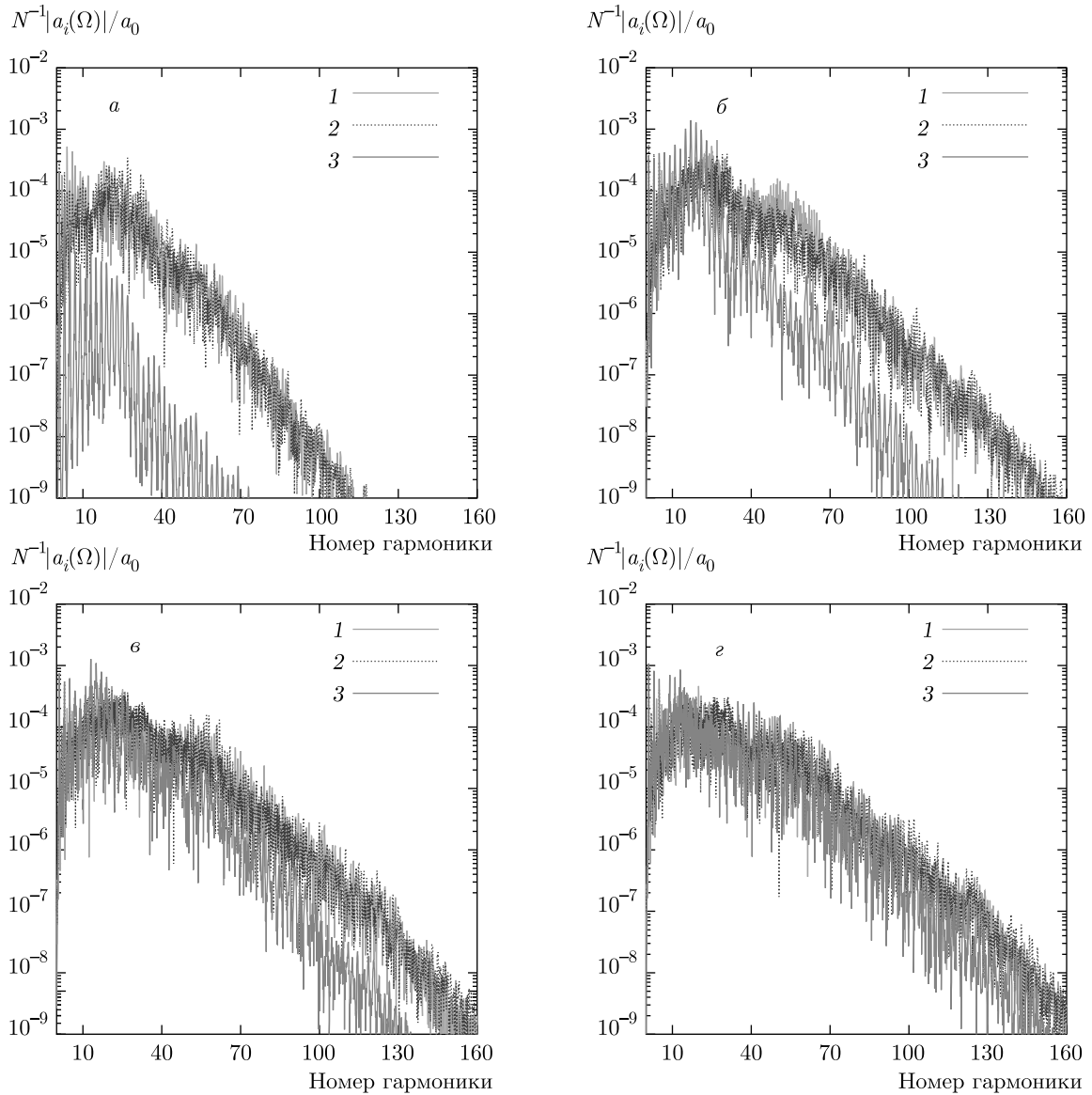


Рис. 5. (В цвете онлайн) Скорость излучения ГВГ, выраженная через преобразование Фурье дипольного ускорения $N^{-1}|a_i(\Omega)|/a_0$, в логарифмическом масштабе в зависимости от номера гармоники волны накачки для треугольной ГКТ. Приведены компоненты $|a_x|$ в треугольной ГКТ с зигзагообразными (1) и креслообразными (3) краями, а также компоненты $|a_y|$ в ГКС с зигзагообразными (2) краями. Число атомов $N = 61$ (*a*), 97 (*б*), 118 (*в*), 141 (*г*) для случаев 1, 2 и $N = 60$ (*a*), 90 (*б*), 126 (*в*), 168 (*г*) для случая 3. ЭМ-волна линейно поляризована по оси x . Частота волны $\omega = 0.1$ эВ/ $\hbar$, напряженность поля $E_0 = 0.3$ В/Å. Спектры показаны для умеренной (типичной) энергии ЭЭВ $U = 3$ эВ. Вероятность релаксации $\hbar\gamma = 50$ мэВ

волны накачки по отношению к оси x фиксированной амплитуды ($E_0 = 0.3$ В/Å) и частоты при умеренной энергии ЭЭВ $U \simeq 3$ эВ. Как видно на рис. 9, ориентация волны накачки под разными углами к оси x приводит к разным спектрам гармоник. Это связано с тем, что у треугольной ГКТ нет инверсной

симметрии (см. рис. 1–4). Как показано на рис. 9*a,б* для углов $0 < \theta < \pi/2$ скорость средних гармоник (максимумы для номеров $n \simeq 10\text{--}40$) увеличивается, а высшие гармоники подавляются. Однако на рис. 9*в,г* видно, что с увеличением плотности энергетических состояний эта закономерность наруша-

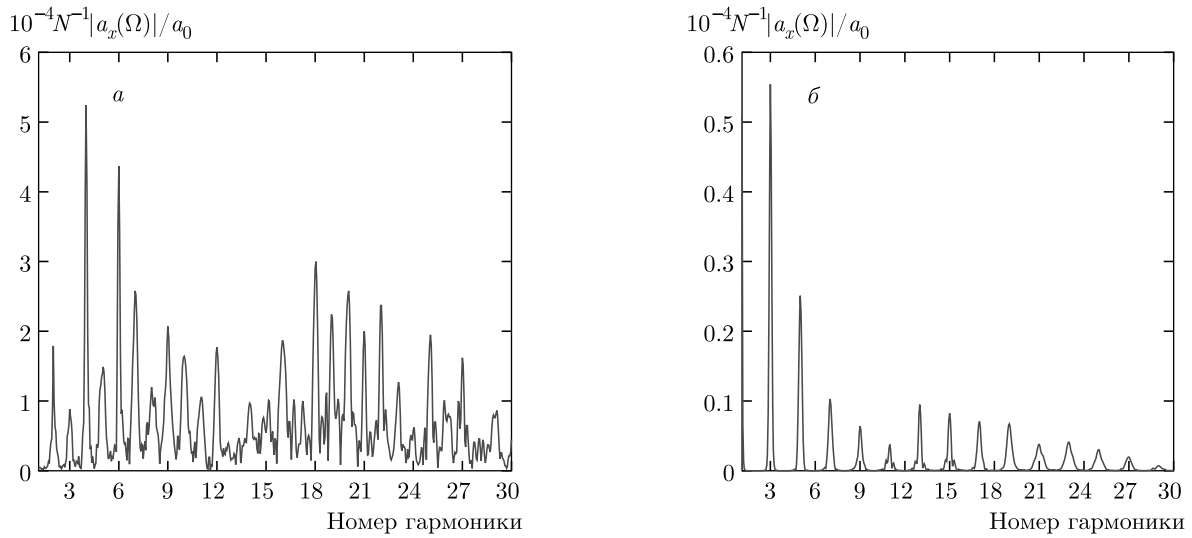


Рис. 6. То же, что и на рис. 5, но вне логарифмического масштаба: показаны гармоники (четные и нечетные) в треугольной ГКТ с зигзагообразными краями для $N = 60$ (а) и гармоники (только нечетные) в ГКТ с креслообразными краями для $N = 61$ (б)

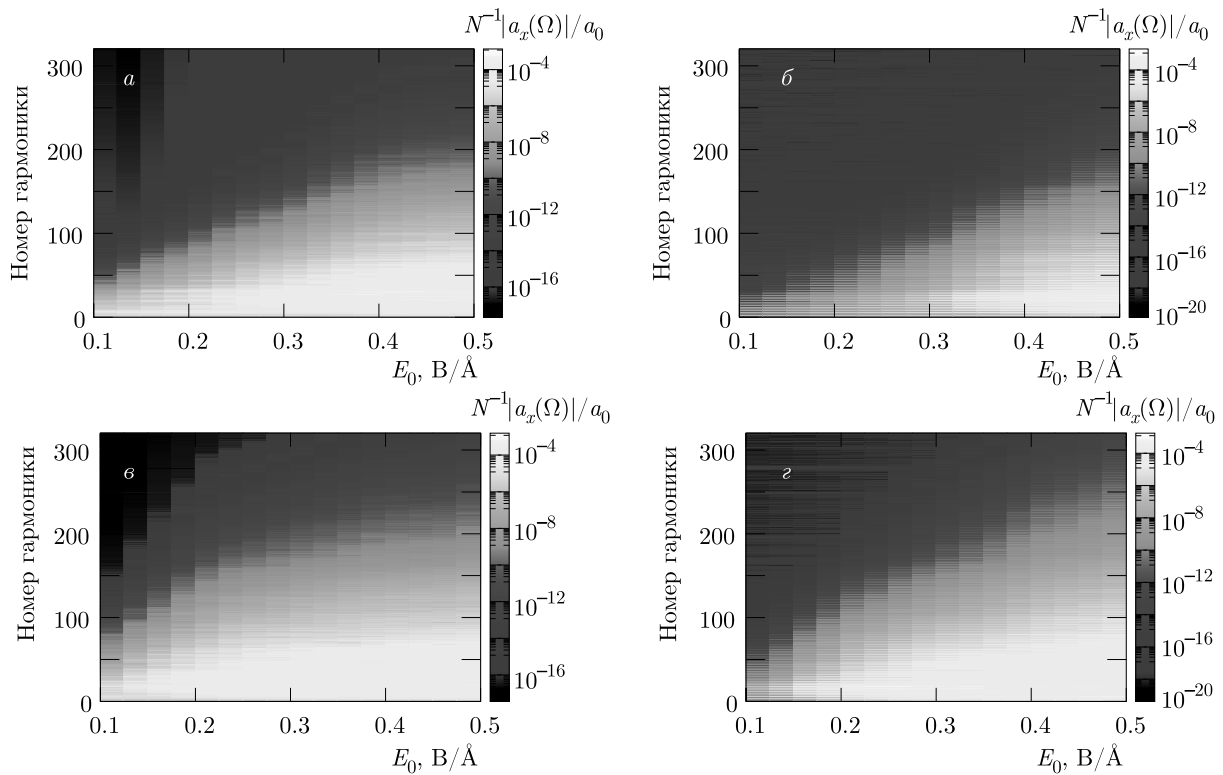


Рис. 7. (В цвете онлайн) Скорость испускания ГВГ, выраженная через преобразование Фурье дипольного ускорения $N^{-1}|a_x(\Omega)|/a_0$ в режиме сильного поля, в логарифмическом масштабе в зависимости от амплитуды ЭМ-поля и номера гармоники для треугольной ГКТ с разными ребрами и числом атомов углерода $N = 61$ (а), 118 (б) для треугольной ГКТ с зигзагообразными краями и $N = 60$ (в), 126 (г) для треугольной ГКТ с креслообразными краями. ЭМ-волна линейно поляризована по оси x . Частота волны $\omega = 0.1$ эВ/ $\hbar$, энергия ЭВ $U = 3$ эВ, вероятность релаксации $\hbar\gamma = 50$ мэВ

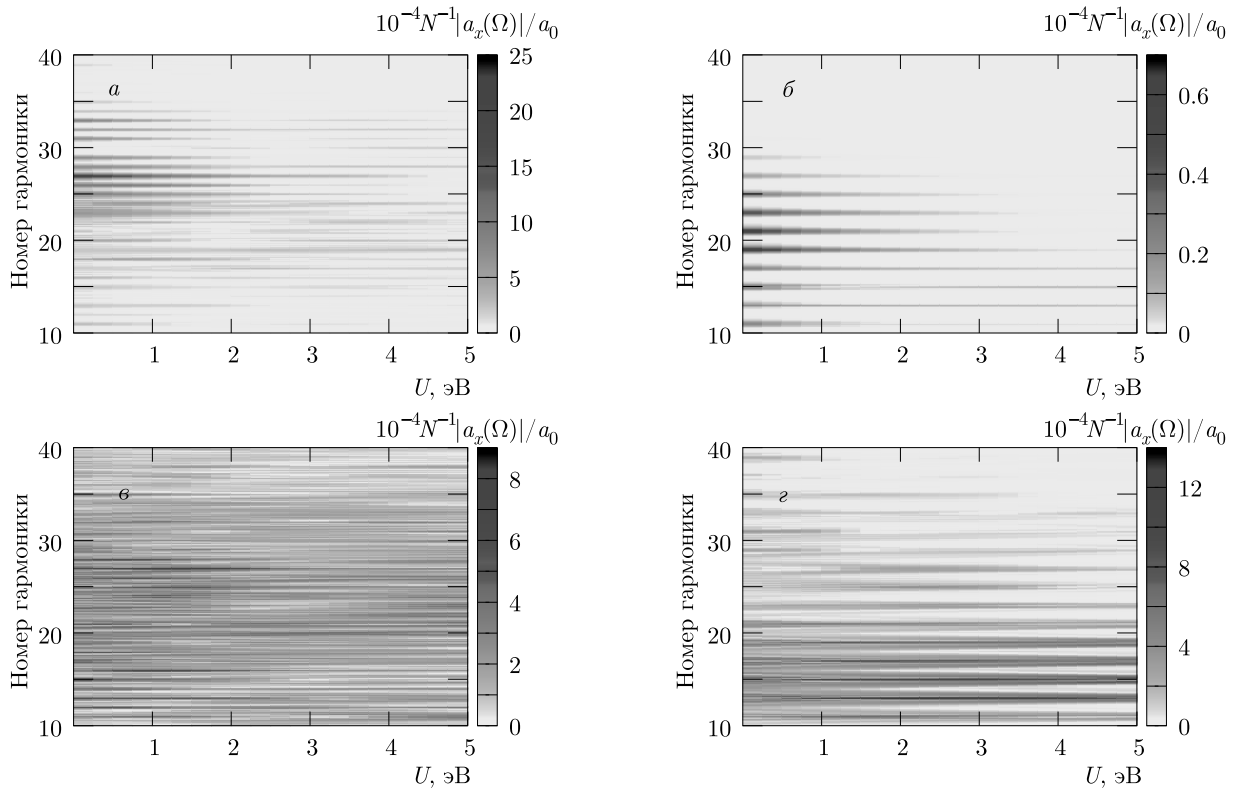


Рис. 8. (В цвете онлайн) То же, что и на рис. 7, но вне логарифмического масштаба в зависимости от энергии ЭВ и порядка гармоник при фиксированной напряженности электромагнитного поля $E_0 = 0.3 \text{ В/Å}$. ЭМ-волна линейно поляризована вдоль оси x

ется и спектр ГВГ перестает зависеть от ориентации силы ЭМ-волны. Этим ГКТ становится похожа на неограниченный в пространстве графен [1].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы исследовали влияние интенсивного когерентного излучения на ГКТ. Была разработана микроскопическая теория для описания экстремального нелинейно-оптического отклика треугольной ГКТ. Численно решена замкнутая система дифференциальных уравнений для одночастичной матрицы плотности при многофотонном взаимодействии ГКТ с сильным лазерным полем. Полученные решения указывают на важность типа кромки и поперечного размера, а также на значимость ширины запрещенной зоны и величины лазерного поля для процесса ГВГ в плоских ГКТ. Номер гармоники отсечки линейно возрастает с увеличением напряженности поля. Как и в случае ГВГ на атомах, для ГКТ с увеличением силы волны накачки при фиксированной энергии фотона энергия обрезания гармоники

($\hbar\omega n_{cut}$) увеличивается линейно. Из-за отсутствия или наличия симметрии подрешетки у треугольной ГКТ с зигзагообразными краями в процессе генерации в поле ЭМ-волны появляются гармоники как нечетного, так и четного порядка, а при креслообразных краях существенны только нечетные гармоники.

Мы также исследовали зависимость спектров ГВГ от ориентации напряженности волны накачки. Как показывают численные результаты, из-за различной симметрии подрешеток одинаковые углы дают разные парциальные выходы в спектрах ГВГ для треугольных ГКТ с креслообразными и зигзагообразными краями. К тому же скорость средних гармоник для малого числа атомов увеличивается, а высшие гармоники подавляются, что не имеет места с увеличением плотности энергетических состояний. Кроме того, с ростом плотности энергетических состояний нарушается правило, согласно которому в случае небольшого числа атомов ГКТ с увеличением энергии ЭВ скорость ГВГ в целом подавляется. Таким образом, с увеличением средней плотности

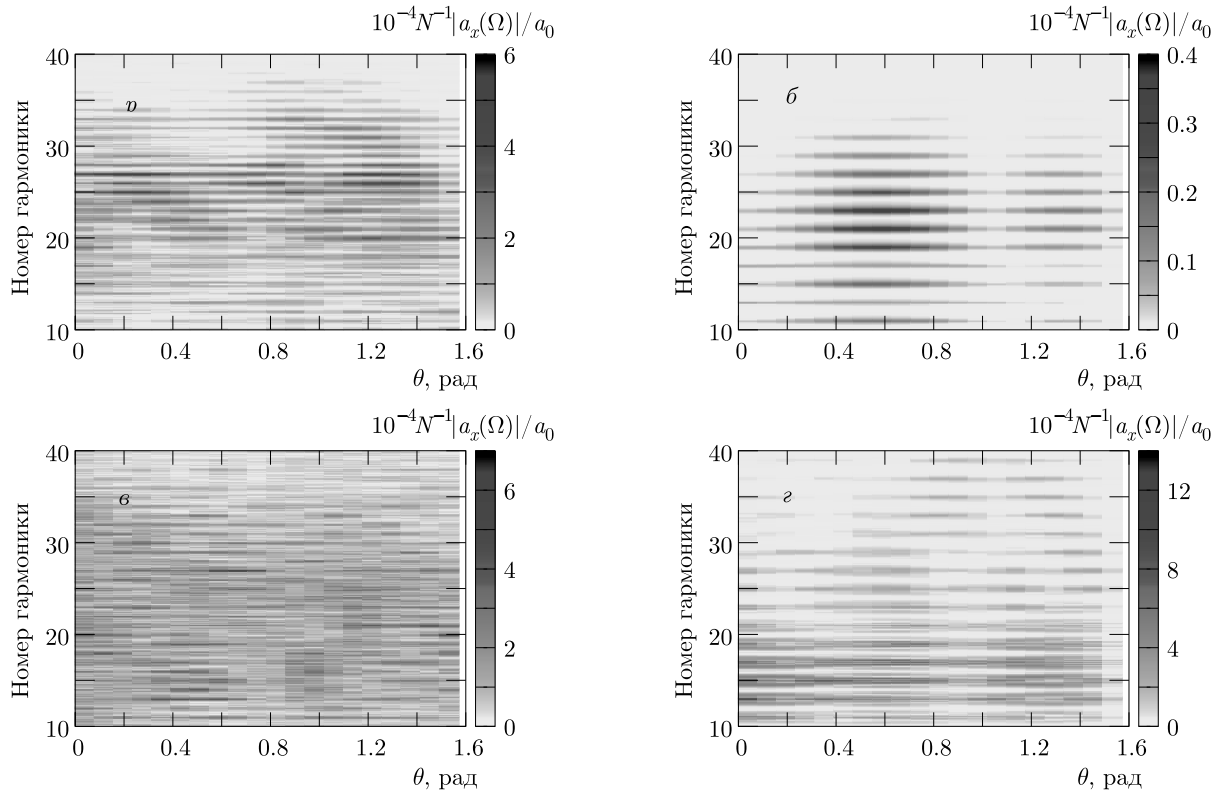


Рис. 9. (В цвете онлайн) Скорость испускания ГВГ, выраженная через преобразование Фурье дипольного ускорения $N^{-1}|a_x(\Omega)|/a_0$, в зависимости от порядка гармоник и угла θ между вектором напряженности ЭМ-поля и осью x при $N = 61$ (а), 118 (б) в треугольной ГКТ с зигзагообразными краями, $N = 60$ (в), 126 (г) в треугольной ГКТ с креслообразными краями. Частота волны $\omega = 0.1$ эВ/ $\hbar$, напряженность поля $E_0 = 0.3$ В/Å, энергия ЭВ $U = 3$ эВ, вероятность релаксации $\hbar\gamma = 50$ мэВ

собственных состояний ГКТ ведет себя как неограниченный в пространстве графен.

Итак, мы исследовали размер и форму ГКТ, используя ограничение квазичастиц в пространстве. Полученные результаты показывают, что ГКТ могут служить эффективной средой для генерации четных и нечетных гармоник высшего порядка при взаимодействии с лазерным полем умеренной интенсивности за счет ограничения квазичастиц в ГКТ. Кроме того, вероятность ГВГ возрастает с увеличением числа атомов ГКТ или с появлением новых энергетических состояний. Это потенциальный способ увеличения выхода и энергии фотонов в процессе ГВГ в графеноподобных квантовых точках.

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

Финансирование. Работа поддержана Комитетом науки Республики Армения в рамках исследовательского проекта 20TTWS-1C010.

ЛИТЕРАТУРА

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Science* **306**(5696), 666 (2004).
2. H. Liu, Y. Li, Y. S. You et al., *Nature Phys.* **13**, 262 (2017).
3. A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
4. S. A. Mikhailov and K. Ziegler, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 384204 (2008).
5. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, K. V. Sedrakian et al., *J. Nanophoton.* **6**, 061702 (2012).
6. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, K. G. Batrakov et al., *Phys. Rev. B* **88**, 165411 (2013).

7. I. Al-Naib, J. E. Sipe, and M. M. Dignam, *New J. Phys.* **17**, 113018 (2015).
8. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, *Phys. Rev. B* **94**, 075412 (2016).
9. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, *Phys. Rev. B* **95**, 085436 (2017).
10. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, G. F. Mkrtchian, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **11**, 016004 (2017).
11. D. Dimitrovski, L. B. Madsen, and T. G. Pedersen, *Phys. Rev. B* **95**, 035405 (2017).
12. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **97**, 115454 (2018).
13. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, B. R. Avchyan, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **100**, 035434 (2019).
14. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **99**, 085432 (2019).
15. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **13**, 036010 (2019).
16. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan et al., *J. Nanophoton.* **14**, 026004 (2020).
17. A. G. Ghazaryan, H. H. Matevosyan, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **14**, 046009 (2020).
18. H. K. Avetissian, *Relativistic Nonlinear Electrodynamics, The QED Vacuum and Matter in Superstrong Radiation Fields*, Springer, Berlin (2016).
19. Б. Р. Авчян, А. Г. Казарян, К. А. Саргсян, Х. В. Седракиян, *ЖЭТФ* **159**, 1003 (2021).
20. А. Г. Казарян, *ЖЭТФ* **159**, 952 (2021).
21. G. P. Zhang and Y. H. Bai, *Phys. Rev. B* **101**, 081412(R) (2020).
22. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **104**, 125436 (2021).
23. P. Bowlan, E. Martinez-Moreno, K. Reimann et al., *Phys. Rev. B* **89**, 041408(R) (2014).
24. N. Yoshikawa, T. Tamaya, and K. Tanaka, *Science* **356**, 736 (2017).
25. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, and Kh. V. Sedrakian, *Phys. Rev. B* **85**, 115443 (2012).
26. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, Kh. V. Sedrakian, and B. R. Avchyan, *J. Nanophotonics* **12**, 016006 (2018).
27. E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov et al., *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007).
28. J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu et al., *Nature Mater.* **7**, 151 (2008).
29. Y. B. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit et al., *Nature* **459**, 820 (2009).
30. F. Guinea, A. H. C. Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **73**, 245426 (2006).
31. M. Koshino and T. Ando, *Phys. Rev. B* **73**, 245403 (2006).
32. A. Varleta, M. Mucha-Kruczynski, D. Bischoff et al., *Synthetic Metals* **210**, 19 (2015).
33. A. D. Guclu, P. Potasz, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, *Graphene Quantum Dots*, Springer, Berlin (2014).
34. H. K. Avetissian, B. R. Avchyan, G. F. Mkrtchian, and K. A. Sargsyan, *J. Nanophoton.* **14**, 026018 (2020).
35. A. D. Guclu, P. Potasz, and P. Hawrylak, in *Future Trends in Microelectronics: Frontiers and Innovations*, ed. by S. Luryi, J. Xu, and A. Zaslavsky, Wiley, New York (2013).
36. A. D. Guclu, P. Potasz, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **82**, 155445 (2010).
37. A. D. Guclu, P. Potasz, O. Voznyy et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 246805 (2009).
38. O. Voznyy, A. D. Guclu, P. Potasz, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **83**, 165417 (2011).
39. W. L. Wang, S. Meng, and E. Kaxiras, *Nano Lett.* **8**, 241 (2008).
40. M. Y. Han, B. Ozyilmaz, Y. Zhang, and Ph. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 206805 (2007).
41. M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Y. Ivanov et al., *Phys. Rev. A* **49**, 2117 (1994).
42. P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
43. S. Reich, C. Thomson, and J. Maultzsch, *Carbon Nanotubes, Basic Concepts and Physical Properties*, Wiley-VCH (2004).