



ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2024. Т. 24, вып. 3. С. 198–208
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2024, vol. 24, iss. 3, pp. 198–208
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2024-24-3-198-208>, EDN: EWJDQE

Научная статья
УДК 004.942:538.958:538.975

Реализация квантового кинетического уравнения для графена на основе модели сильного взаимодействия ближайших соседей

А. Д. Панферов[✉], И. А. Щербаков

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

Панферов Анатолий Дмитриевич, кандидат физико-математических наук, заместитель начальника управления цифровых и информационных технологий, panferovad@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2332-0982>

Щербаков Илья Алексеевич, младший научный сотрудник отдела информационных ресурсов и систем в управлении цифровых и информационных технологий, greentech676@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0003-0599-3099>

Аннотация. Представлена реализация квантового кинетического уравнения для электронной подсистемы графена, полностью отражающая характеристики и особенности модели сильной связи ближайших соседей по кристаллической решетке для этого материала. В отличие от версии, построенной на основе приближения безмассовых фермионов, предложенное решение свободно от ограничений на допустимые значения энергии рассматриваемых состояний. Это обеспечивает возможность численно моделировать процессы заселения электронных состояний в зоне проводимости и их эволюцию во внешнем электрическом поле в расширенном диапазоне частот и значений напряженности поля. Последнее важно для исследования сверхбыстрой динамики электронов и нелинейных эффектов в этом перспективном материале.

Выполнено сравнение результатов использования кинетического уравнения при ограничении энергии возбуждаемых состояний непосредственной окрестностью точки Дирака, где результаты новой реализации и приближения безмассовых фермионов ожидаемо близки. Вне таких ограничений продемонстрированы качественные и количественные различия, учет которых необходим для корректного моделирования процессов в сильных полях.

Ключевые слова: графен, квантовое кинетическое уравнение, модель сильной связи ближайших соседей, сверхбыстрая динамика электронов, нелинейные эффекты

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-21-00047, <https://rscf.ru/project/23-21-00047/>).

Для цитирования: Панферов А. Д., Щербаков И. А. Реализация квантового кинетического уравнения для графена на основе модели сильного взаимодействия ближайших соседей // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2024. Т. 24, вып. 3. С. 198–208. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2024-24-3-198-208>, EDN: EWJDQE

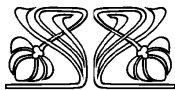
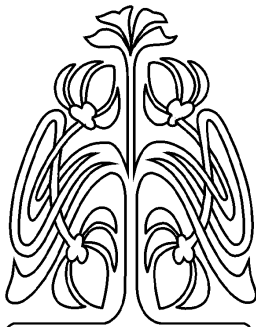
Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Article

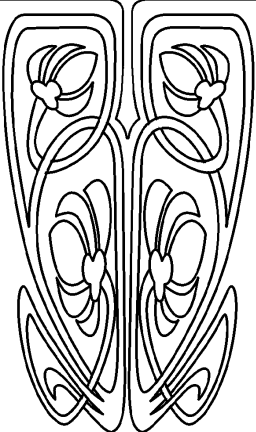
Tight-binding implementation of the quantum kinetic equation for graphene

A. D. Panferov[✉], I. A. Shcherbakov

© Панферов А. Д., Щербаков И. А., 2024



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

Anatolii D. Panferov, panferovad@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2332-0982>

Ilya A. Shcherbakov, greentech676@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0003-0599-3099>

Abstract. Background and Objectives: Progress in the development of pulsed radiation sources with high energy density makes it possible to study the nonlinear response of condensed matter to the disturbing influence of high-intensity electromagnetic fields. To understand the processes occurring in this case, adequate models are needed that qualitatively and quantitatively reproduce the characteristics of the materials under study. In this area, graphene is considered one of the most promising materials due to the specificity of its band structure. The purpose of the work is to present and test a new model based on the quantum kinetic equation, free from restrictions on such parameters as the frequency and strength of the electric field of the disturbing influence. **Materials and Method:** The approach used in the work is based on the quantum kinetic equation for the distribution function of charge carriers in the state space. It makes it possible, in the one-electron approximation, to nonperturbatively reproduce the ultrafast dynamics of carriers in an external classical electric field. The system under consideration is specified by the electron dispersion law. The approach was developed and implemented for the pseudo-relativistic approximation of massless fermions, successfully used in describing the features of graphene. However, by its definition, this approximation quite accurately reproduces the real dispersion law only in the low-energy region in the vicinity of the Dirac points. Therefore, the direct use of this version of the model to describe processes in which electronic states with high excitation energies are known to participate raises questions about the accuracy of the results obtained. The problem can be resolved by moving to an exact definition of the dispersion law through the parameters of the tight-binding model of nearest neighbors in the crystal lattice of the graphene. The presented work proposes an implementation option for such a procedure and verifies the results obtained. A generalization of the formalism for a two-level system with a massless Hamiltonian of general form is used, which universally defines the explicit form of the quantum kinetic equation and expressions for macroscopic observable parameters. **Results:** A computational model based on the exact tight-binding model Hamiltonian has been determined, which strictly takes into account the real law of graphene dispersion in reciprocal space. The new model has been verified. For this purpose, the results of its use are compared with the results of a similar model based on the massless fermion approximation. Under conditions of limiting the parameters of the perturbing influence, ensuring the generation of excited states with only low energies in the immediate vicinity of the Dirac points, an exact coincidence has been demonstrated both at the stage of determining the values of the distribution function and for the observed parameters. It has been shown that going beyond the applicability limits of the massless fermion approximation is accompanied by the appearance of qualitative and quantitative differences in the results obtained. **Conclusion:** The results of the work provide new opportunities for studying the behavior of graphene under extreme conditions of strong high-frequency fields, modeling and searching for new nonlinear effects, and accurately reproducing the ultrafast quantum dynamics of its electrons for states with high energy values.

Keywords: graphene, quantum kinetic equation, tight-binding model, ultrafast electron dynamics, nonlinear effects

Acknowledgements: The study was supported by the Russian Science Foundation (project No. 23-21-00047, <https://rscf.ru/project/23-21-00047/>).

For citation: Panferov A. D., Shcherbakov I. A. Tight-binding implementation of the quantum kinetic equation for graphene. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2024, vol. 24, iss. 3, pp. 198–208 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2024-24-3-198-208>, EDN: EWJDQE

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

Введение

Развитие технологий формирования ультракоротких лазерных импульсов высокой интенсивности и расширение спектра доступных частот предоставило новые возможности в исследовании сверхбыстрой динамики электронов твердых тел во внешних электрических полях. Особый интерес представляет исследование процессов такого типа в графене в связи со своеобразием его зонной структуры и связанными с этим перспективами использования этого материала [1]. Для воспроизведения нестационарной квантовой динамики электронной подсистемы в условиях действия внешних электрических полей разработаны и используются ряд концептуально схожих подходов: метод функции Грина [2, 3], метод зависящего от времени функционала плотности [4, 5] и зависящее от времени уравнение Шредингера в форме уравнения Блоха [6, 7]. Их основная идея – переход от рассмотрения многочастичной системы к описанию квантовой эволюции

одноэлектронных состояний в нестационарных условиях. Для графена достаточно учитывать в гамма-зоне только верхнюю валентную зону и нижнюю зону проводимости. В простейшем случае это реализуется с использованием приближения безмассовых дираковских фермионов (massless fermions – MLF) [8–10].

Близость приближения MLF к физическому электрон-позитронному вакууму квантовой электродинамики позволила рассматривать развитый применительно к проблематике эффекта Швингера непертурбативный кинетический формализм [11–14] в качестве основы еще одного подхода для описания процессов рождения пар электрон-дырка в графене и их последующей квантовой эволюции. Такая адаптация формализма была выполнена в работах [15–19] и продемонстрировала хорошее согласие с существующими результатами, в том числе экспериментальными.

Приближение MLF по определению является линейной аппроксимацией закона дисперсии



графена в непосредственной окрестности точек Дирака. Особенности этого материала, обусловленные свойствами низкоэнергетических состояний в пределах 0.3–0.5 эВ, хорошо воспроизводятся в рамках этой модели. Однако при рассмотрении процессов в экстремально высоких электрических полях или условиях воздействия высокочастотных полей с энергией фотонов выше указанного порога нельзя рассчитывать на точное их описание при её использовании. Необходимость работать с состояниями в пределах всей зоны Бриллюэна требует перехода к строгому учету реального закона дисперсии в соответствии с параметрами модели сильной связи ближайших соседей (tight-binding model – ТВМ).

В статье представлена реализация полученной модели в рамках кинетического подхода и выполнено сравнение предсказываемой динамики заселенности электронных состояний, наблюдаемых значений индуцированной поверхностной плотности носителей и тока с результатами приближения MLF в условиях воздействия внешних импульсных электрических полей.

1. Квантовое кинетическое уравнение для двухуровневой системы с безмассовым спектром

Отклик графена на действие внешнего электрического поля определяется поведением электронов, находящихся в $p_z(\pi)$ состояниях. Структура соответствующей этим состояниям энергетической зоны позволяет в одноэлектронном приближении рассматривать графен как двухуровневую квантовую систему со специфическим законом дисперсии. Всю возможную информацию о её поведении можно получить, решая уравнение Шредингера с соответствующим гамильтонианом. Поскольку гексагональная решетка содержит в каждой элементарной ячейке по два атома и может рассматриваться как суперпозиция двух эквивалентных подрешеток, гамильтониан в рассматриваемом случае имеет псевдоспинорную форму и определяется в виде матрицы (например, [10]):

$$H(\vec{p}, t) = \begin{pmatrix} 0 & B(\vec{p}, t) \\ B^*(\vec{p}, t) & 0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Решениями уравнения Шредингера с таким гамильтонианом будут двухкомпонентные псевдоспиноры. Удобно явно выделять вещественную и мнимую компоненты этой матрицы с использованием определения:

$$B(\vec{p}, t) = B'(\vec{p}, t) + iB''(\vec{p}, t). \quad (2)$$

В отсутствие явной зависимости от времени система стационарна и решение уравнения Шредингера с корректно определенным гамильтонианом даёт спектр состояний и набор собственных волновых функций системы [20]. Появление внешнего возмущающего воздействия привносит в гамильтониан явную зависимость от времени. Лежащее в основе непертурбативного кинетического подхода [15–17] квантовое кинетическое уравнение определяет нестационарную эволюцию функции распределения электронов по энергетическим состояниям $f(\vec{p}, t)$. Оно является прямым следствием уравнения Шредингера и может быть представлено в форме замкнутой системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) для самой $f(\vec{p}, t)$ и вспомогательных функций $u(\vec{p}, t)$, $v(\vec{p}, t)$ в выбранной точке \vec{p} двумерного импульсного пространства:

$$\begin{aligned} \dot{f}(\vec{p}, t) &= \frac{\lambda(\vec{p}, t)}{2} u(\vec{p}, t), \\ \dot{u}(\vec{p}, t) &= \lambda(\vec{p}, t)(1 - 2f(\vec{p}, t)) - \frac{2\varepsilon(\vec{p}, t)}{\hbar} v(\vec{p}, t), \\ \dot{v}(\vec{p}, t) &= \frac{2\varepsilon(\vec{p}, t)}{\hbar} u(\vec{p}, t). \end{aligned} \quad (3)$$

Присутствующие здесь коэффициенты определяются гамильтонианом. Первый из них $\lambda(\vec{p}, t)$ можно интерпретировать как скорость изменения вероятности заселения уровня, а $\varepsilon(\vec{p}, t)$ является законом дисперсии, определяя связь импульса состояния с его энергией. В общем случае для гамильтонианов вида (1) с использованием представления (2) имеем

$$\lambda(\vec{p}, t) = \frac{\dot{B}'(\vec{p}, t)B''(\vec{p}, t) - B'(\vec{p}, t)\dot{B}''(\vec{p}, t)}{\varepsilon^2(\vec{p}, t)}, \quad (4)$$

$$\varepsilon(\vec{p}, t) = \sqrt{B'(\vec{p}, t)^2 + B''(\vec{p}, t)^2}. \quad (5)$$

В стационарном состоянии $\dot{B}'(\vec{p}, t) = \dot{B}''(\vec{p}, t) = 0$. Следовательно, функция распределения сохраняет постоянное значение. Зависимость от времени возникает только в нестационарных условиях.

Далее полагаем, что нестационарность обусловлена действием внешнего электрического поля. Вид гамильтониана в присутствии внешнего электрического поля $\vec{E}(t)$ определяется через его стационарную форму в общем виде. Для этого удобно задать поле векторным потенциалом $\vec{E}(t) = -\dot{\vec{A}}(t)$. Однозначность определения обеспечивается использованием гамильтоновой калибровки, в которой скалярный потенциал строго равен нулю. В рассматриваемой двумерной задаче принимаем $A_k(t) = (A_1(t), A_2(t), 0)$. Тогда



при любом выборе явного вида гамильтониана его зависимость от времени во внешнем классическом электрическом поле будет определяться заменой компонент импульса вида

$$p_k \rightarrow P_k = p_k - eA_k(t), \quad k = 1, 2. \quad (6)$$

Формализм предоставляет возможность рассматривать начальные равновесные состояния с произвольной заданной температурой и учитывать релаксационные процессы в приближении времени релаксации за счет соответствующей модификации правых частей в системе уравнений (3). Численное решение системы (3) позволяет с заданной точностью воспроизводить функции $f(\bar{p}, t)$, $u(\bar{p}, t)$ и $v(\bar{p}, t)$ для любого момента времени в любой заданной точке импульсного пространства.

Наблюдаемые параметры, такие как поверхностная плотность носителей в образце и поверхностная плотность тока, могут быть вычислены, если мы знаем решения системы уравнений (3) достаточно хорошо, чтобы интегрировать их по импульсному пространству всей первой зоны Бриллюэна. Так, плотность носителей определяется интегрированием функции распределения по состояниям, вероятность заселения которых не равна нулю:

$$n(t) = N \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} f(\bar{p}, t), \quad (7)$$

где $N = 4$ в условиях равенства концентрации электронов и дырок с учетом двукратного вырождения по псевдоспину.

Появляющийся в неравновесных условиях поверхностный ток является откликом системы на действие внешнего возмущения и может быть определен в общем виде выражением [21, 22]

$$j_k(t) = -\frac{\delta H(t)}{\delta A_k(t)}. \quad (8)$$

Для гамильтониана вида (1) из этого определения следует:

$$j_k(t) = e \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \frac{1}{\varepsilon(\bar{p}, t)} \times \left\{ \frac{\partial B'(\bar{p}, t)}{\partial P_k} (2B'(\bar{p}, t)f(\bar{p}, t) + B''(\bar{p}, t)u(\bar{p}, t)) + \frac{\partial B''(\bar{p}, t)}{\partial P_k} (2B(\bar{p}, t)f(\bar{p}, t) - B'(\bar{p}, t)u(\bar{p}, t)) \right\}. \quad (9)$$

При изучении нелинейных оптических явлений, в том числе и в графене, существен учет отличий и взаимного влияния эффектов, обусловленных внутризонной динамикой электронов

и межзонными переходами [23–26]. Поэтому далее будем явно выделять внутризонный ток проводимости $j_k^{cond}(t)$ и поляризационный ток межзонных переходов $j_k^{pol}(t)$, полагая что полный наблюдаемый ток является их суммой $j_k(t) = j_k^{cond}(t) + j_k^{pol}(t)$. В используемом формализме

$$j_k^{cond}(t) = e \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \frac{1}{\varepsilon(\bar{p}, t)} \times \left\{ \frac{\partial B'(\bar{p}, t)}{\partial P_k} 2B'(\bar{p}, t)f(\bar{p}, t) + \frac{\partial B''(\bar{p}, t)}{\partial P_k} 2B(\bar{p}, t)f(\bar{p}, t) \right\}, \quad (10)$$

$$j_k^{pol}(t) = e \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \frac{1}{\varepsilon(\bar{p}, t)} \times \left\{ \frac{\partial B'(\bar{p}, t)}{\partial P_k} B''(\bar{p}, t)u(\bar{p}, t) - \frac{\partial B''(\bar{p}, t)}{\partial P_k} B'(\bar{p}, t)u(\bar{p}, t) \right\}. \quad (11)$$

2. Варианты реализации кинетического уравнения для графена и определение наблюдаемых параметров

Для поиска решений системы уравнений (3) необходимо выбрать явный вид гамильтониана (1). Исходно [20] для определения зонной структуры графена использовалась ТВМ модель сильной связи, учитывающая взаимодействие с тремя ближайшими соседями по решетке. Данная модель является существенным упрощением реальности, но она хорошо воспроизводит свойства рассматриваемого материала качественно и количественно, как было подтверждено более поздними исследованиями [27]. С первых экспериментов с графеном для обоснования их результатов предложено и успешно используется приближение MLF [8–10], являющееся линейной аппроксимацией ТВМ в области малых энергий в окрестностях точек соприкосновения валентной зоны и зоны проводимости (точек Дирака). Воспроизводя ключевые особенности энергетического спектра, эта модель проще и при этом позволяет объяснить многие необычные свойства рассматриваемого материала.

Для приближения MLF гамильтониан определяется в системе координат с началом в одной из точек Дирака (рис. 1, синяя точка K) выражениями [7, 10]

$$B'(\bar{p}, t) = V_F P_1, \quad B''(\bar{p}, t) = -V_F P_2, \quad (12)$$

где P_1 и P_2 включают вклады от внешнего классического электрического поля в соответствии с (6), а $V_F \approx 10^6$ м/с – скорость Ферми. В соответствии с определениями (4), (5) и связью между векторным потенциалом и напряженностью электрического поля для коэффициентов



в уравнении (3) в этом случае получаем:

$$\lambda_{MLF}(\vec{p}, t) = eV_F^2 \frac{E_2(t)P_1 - E_1(t)P_2}{\epsilon_{MLF}^2(\vec{p}, t)}. \quad (13)$$

$$\epsilon_{MLF}(\vec{p}, t) = V_F \sqrt{P_1^2 + P_2^2}. \quad (14)$$

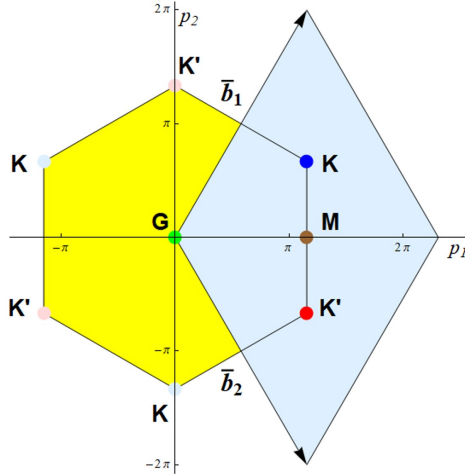


Рис. 1. Обратная решетка графена: \vec{b}_1 и \vec{b}_2 – векторы трансляций, G – центр зоны Бриллюэна, K, K' – точки Дирака, M – начало системы координат для модели ТВМ. Единичное значение по осям $[p] = \hbar/a$, где $a = 0.246$ нм – постоянная решетки графена (цвет онлайн)

Fig. 1. Reciprocal lattice of graphene. \vec{b}_1 and \vec{b}_2 are translation vectors, G is the center of the Brillouin zone, K, K' are the Dirac points, M is the origin of the coordinate system for the TBVM model. The unit value for the axes is $[p] = \hbar/a$, where $a = 0.246$ nm is the graphene lattice constant (color online)

Использование данной модели позволяет в кинетическом подходе воспроизводить характерные особенности реакции графена на действие внешнего электрического поля, такие как нелинейная проводимость в постоянном поле [15], генерация высокочастотных гармоник импульсами инфракрасного диапазона [17, 18]. Однако количественная оценка вкладов в наблюдаемые эффекты возбуждений с энергиями более примерно 0.5 эВ требует перехода к точной ТВМ модели.

В данном случае две точки Дирака, эквивалентные в приближении MLF, необходимо рассматривать независимо. Для этого удобно перенести начало отсчета системы координат в середину отрезка, соединяющего две ближайшие не эквивалентные точки Дирака (рис. 1, коричневая точка M). В этом случае ТВМ гамильтониан может быть определен выражениями вида:

$$B'(\vec{p}, t) = \frac{2\hbar V_F}{\sqrt{3}a} \left(\sin\left(\frac{aP_1}{\sqrt{3}\hbar} + \frac{\pi}{6}\right) + \sin\left(\frac{aP_1}{2\sqrt{3}\hbar} + \frac{aP_2}{2\hbar} - \frac{\pi}{6}\right) + \sin\left(\frac{aP_1}{2\sqrt{3}\hbar} - \frac{aP_2}{2\hbar} - \frac{\pi}{6}\right) \right), \quad (15)$$

$$j_{TBVM 1}^{cond}(t) = e \frac{8V_F^2 \hbar}{3a} \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \sqrt{3} \left(1 + 2 \cos\left(\frac{aP_1}{\sqrt{3}\hbar}\right) \right) \sin\left(\frac{aP_1}{2\sqrt{3}\hbar}\right) \cos\left(\frac{aP_2}{2\hbar}\right) \frac{f(\vec{p}, t)}{\epsilon_{TBVM}(\vec{p}, t)}, \quad (23)$$

$$B''(\vec{p}, t) = \frac{2\hbar V_F}{\sqrt{3}a} \left(\cos\left(\frac{aP_1}{\sqrt{3}\hbar} + \frac{\pi}{6}\right) - \cos\left(\frac{aP_1}{2\sqrt{3}\hbar} + \frac{aP_2}{2\hbar} - \frac{\pi}{6}\right) - \cos\left(\frac{aP_1}{2\sqrt{3}\hbar} - \frac{aP_2}{2\hbar} - \frac{\pi}{6}\right) \right). \quad (16)$$

Тогда выражения для коэффициентов кинетического уравнения (3) в соответствии с общими определениями (4) и (5) можно привести к виду:

$$\lambda_{TBVM}(\vec{p}, t) = -\frac{4e\hbar V_F^2}{9a\epsilon_{TBVM}^2(\vec{p}, t)} \times \left(E_1(t) \sqrt{3} \left(\cos\left(\frac{\sqrt{3}aP_1}{2\hbar}\right) \cos\left(\frac{aP_2}{2\hbar}\right) + \cos\left(\frac{aP_2}{\hbar}\right) \right) + E_2(t) 3 \sin\left(\frac{\sqrt{3}aP_1}{2\hbar}\right) \sin\left(\frac{aP_2}{2\hbar}\right) \right), \quad (17)$$

$$\epsilon_{TBVM}(\vec{p}, t) = \frac{2\hbar V_F}{\sqrt{3}a} \sqrt{3 - 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}aP_1}{2\hbar}\right) \cos\left(\frac{aP_2}{2\hbar}\right) + 2 \cos(aP_2/\hbar)}. \quad (18)$$

Определение наблюдаемой плотности носителей (7) не имеет явной зависимости от выбора модели. Необходимо только корректно определить значение коэффициента N с учетом наличия или отсутствия в реализации модели вырождения по псевдоспину.

Выражения для компонент поверхностной плотности тока (9) существенным образом зависят от явного вида гамильтониана. Исходя из определения (12) для приближения MLF имеем

$$j_{MLF 1}^{cond}(t) = eV_F^2 4 \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \frac{P_1}{\epsilon_{MLF}(\vec{p}, t)} f(\vec{p}, t), \quad (19)$$

$$j_{MLF 2}^{cond}(t) = eV_F^2 4 \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \frac{P_2}{\epsilon_{MLF}(\vec{p}, t)} f(\vec{p}, t), \quad (20)$$

$$j_{MLF 1}^{pol}(t) = -eV_F^2 2 \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \frac{P_2}{\epsilon_{MLF}(\vec{p}, t)} u(\vec{p}, t), \quad (21)$$

$$j_{MLF 2}^{pol}(t) = eV_F^2 2 \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \frac{P_1}{\epsilon_{MLF}(\vec{p}, t)} u(\vec{p}, t). \quad (22)$$

Как и использованное определение (12), эти выражения справедливы в системе отсчета с началом в точке Дирака K , а интегрирование выполняется по верхней половине примитивной ячейки обратной решетки. Вклад нижней половины учтен в коэффициентах выражений (19)–(22).

Для ТВМ с использованием определений (15) и (16) получаем:



$$j_{TBM\ 2}^{cond}(t) = e \frac{8V_F^2 \hbar}{3a} \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \left(\cos\left(\frac{\sqrt{3}aP_1}{2\hbar}\right) \sin\left(\frac{aP_2}{2\hbar}\right) - \sin\left(\frac{aP_2}{\hbar}\right) \right) \frac{f(\vec{p}, t)}{\epsilon_{TBM}(\vec{p}, t)}, \quad (24)$$

$$j_{TBM\ 1}^{pol}(t) = -e \frac{4V_F^2 \hbar}{3a} \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\cos\left(\frac{\sqrt{3}aP_1}{2\hbar}\right) \cos\left(\frac{aP_2}{2\hbar}\right) + \cos\left(\frac{aP_2}{\hbar}\right) \right) \frac{u(\vec{p}, t)}{\epsilon_{TBM}(\vec{p}, t)}, \quad (25)$$

$$j_{TBM\ 2}^{pol}(t) = -e \frac{4V_F^2 \hbar}{3a} \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \left(1 + 2 \cos\left(\frac{aP_1}{\sqrt{3}\hbar}\right) \right) \sin\left(\frac{aP_1}{2\sqrt{3}\hbar}\right) \sin\left(\frac{aP_2}{2\hbar}\right) \frac{u(\vec{p}, t)}{\epsilon_{TBM}(\vec{p}, t)}. \quad (26)$$

Приведенные здесь выражения для компонент токов справедливы в системе отсчета с началом в точке M . Интегрировать необходимо по всей примитивной ячейке обратной решетки, поскольку в этой модели точки K и K' не эквивалентны.

3. Результаты и их обсуждение

Представленная модель должна воспроизводить результаты приближения MLF в области низких энергий и демонстрировать возрастающее отличие результатов с ростом энергии возбуждаемых состояний. Сравнение проводилось на адаптивных сетках переменного шага, полностью покрывающих примитивную ячейку обратной решетки. Для построения таких сеток была разработана специальная итерационная процедура [28]. В качестве внешнего возмущения рассматриваются короткие высокочастотные импульсы с гауссовой огибающей. Компоненты их векторного потенциала определим в виде:

$$A_1(t) = -\frac{E_{10}}{2\pi\nu} \sin(2\pi\nu t) e^{-t^2/2\tau^2}, \quad (27)$$

$$A_2(t) = -\frac{E_{20}}{2\pi\nu} \sin(2\pi\nu t + \phi) e^{-t^2/2\tau^2}. \quad (28)$$

Здесь E_{10} и E_{20} – амплитудные значения двух компонент напряженности электрического поля в плоскости образца, ν – частота, ϕ – разность фаз между компонентами поля, определяющая тип поляризации, и τ – длительность импульса. Ограничимся следующими дополнительными условиями: $E_{10} = E_{20}$ и $\phi = \pi/2$ (круговая поляризация), длительность импульса определена соотношением $2\pi\nu\tau = 10$. Далее полагаем, что в начальном состоянии зона проводимости свободна, диссипативные процессы не учитываются.

Характерную энергию генерируемых возбужденных состояний определяют два фактора: энергия фотонов поля $\hbar\nu$ и амплитуда изменения энергии за счет смещений рассматриваемого состояния в импульсном пространстве в поле волны в соответствии с определением (6). Для оценки второго фактора будем использовать значение

$\frac{eV_F}{2\pi\nu} \sqrt{E_{10}^2 + E_{20}^2}$ в соответствии с законом дисперсии MLF.

На первом этапе воспроизводятся результаты действия импульса с частотой $\nu = 3.0 \cdot 10^{12}$ Гц и амплитудным значением напряженности электрического поля $E_{10} = E_{20} = 1.5 \cdot 10^3$ В/см. В этом случае будут возбуждаться только состояния с энергией порядка 0.01 эВ. Результаты воспроизведения функции распределения в момент времени $t = 0$, когда достигается абсолютный максимум напряженности внешнего поля в окрестностях верхней точки Дирака K , показаны на рис. 2, а. Результаты использования двух моделей очень близки и визуально не различимы. Окружность вокруг точки Дирака с близкой к 1.0 заселенностью соответствует состояниям с энергией ≈ 0.01 эВ. Хотя $f(p_1, p_2, t = 0)_{MLF}$ и $f(p_1, p_2, t = 0)_{TBM}$ близки по значениям, они не тождественны. Разностные значения приведены на рис. 2, б. Они малы, но даже в этом случае наблюдается присущая ТВМ анизотропия. Интегральные значения для наблюдаемых (7), (10) и (11) совпадают с точностью до 4–6 значащих цифр. Полученные результаты верифицируют новую модель на основе ТВМ для процессов с малой энергией возбуждений.

На втором этапе воспроизводятся результаты действия импульса с частотой $\nu = 300.0 \times 10^{12}$ Гц и амплитудным значением напряженности электрического поля $E_{10} = E_{20} = 1.5 \cdot 10^7$ В/см. Необходимо отметить, что и при этих, и при рассматривавшихся выше параметрах импульса, плотность потока действующей на графен энергии ниже порога возникновения оптического пробоя [29]. При выбранных параметрах ожидаемая энергия возбуждаемых состояний должна превышать 1.0 эВ. Результаты воспроизведения функции распределения показаны на рис. 3. Как и на предыдущем рисунке, центр соответствует точке Дирака K , но линейные размеры представленной области в 80 раз больше. Для удобства сравнения шаг сетки увеличен в 100 раз.

Отметим сходство рис. 2, а и рис. 3, а. Оно наглядно демонстрирует линейное поведение

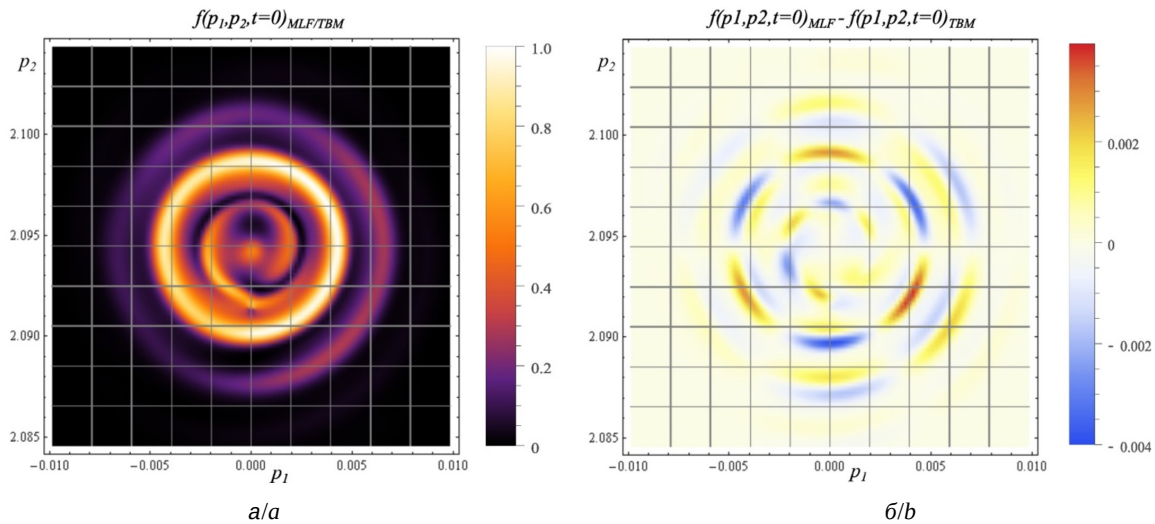


Рис. 2. Результаты использования моделей MLF и TBM при низкой энергии возбуждающего возмущения: а – функция распределения $f(p_1, p_2, t = 0)_{MLF/TBM}$, б – разность $f(p_1, p_2, t = 0)_{MLF} - f(p_1, p_2, t = 0)_{TBM}$, $[p] = \hbar/a$ (цвет онлайн)
 Fig. 2. Results of using the MLF and TBM models at low energy of exciting disturbance: а – distribution function $f(p_1, p_2, t = 0)_{MLF/TBM}$, б – difference $f(p_1, p_2, t = 0)_{MLF} - f(p_1, p_2, t = 0)_{TBM}$, $[p] = \hbar/a$ (color online)

модели MLF при масштабировании параметров возмущающего воздействия. Поведение же $f(p_1, p_2, t = 0)_{TBM}$ в импульсном пространстве визуально отлично. Так, явно проявляется тригональная симметрия соответствующей подрешетки, с которой ассоциирована точка K .

Различия в поведении функций распределения в импульсном пространстве показаны на рис. 4, а. На рис. 4, б демонстрируется поведение во времени функций распределения в од-

ной выбранной точке импульсного пространства. В представленном случае это точка с координатами $p_1 = -0.40497092$, $p_2 = 2.29483525$. В качестве критерия выбора использовалось близкое к максимальному значение функции распределения в момент времени $t = 0$. Кроме собственно функций распределения $f(p_1, p_2, t)_{MLF}$ и $f(p_1, p_2, t)_{TBM}$ прорисована первая компонента внешнего электрического поля (в условных единицах).

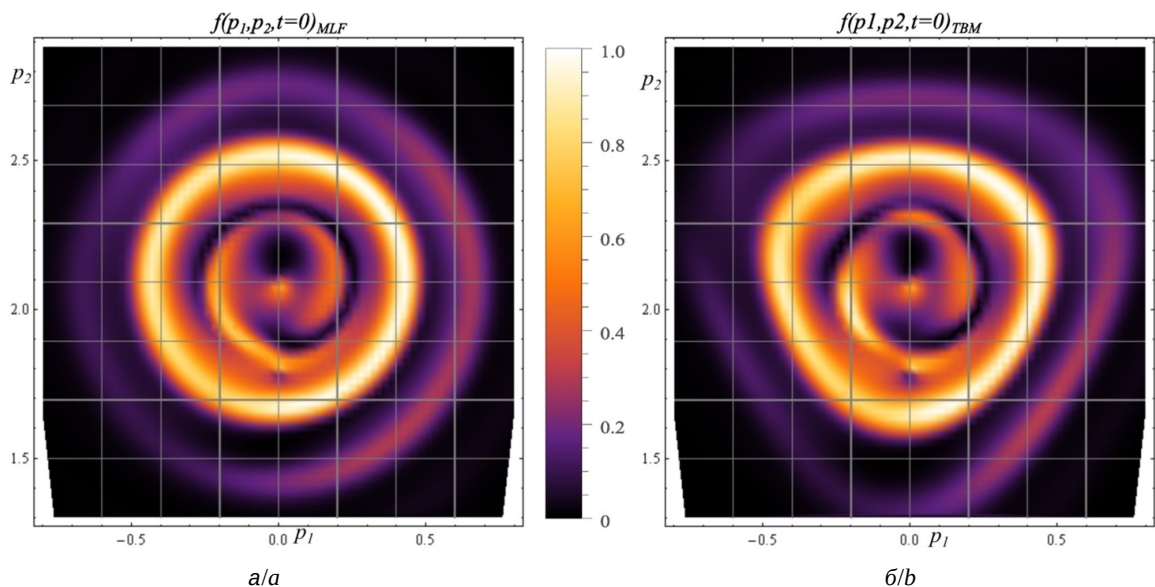


Рис. 3. Результаты для импульса с $\nu = 300.0 \cdot 10^{12}$ Гц и $E_{10} = E_{20} = 1.5 \cdot 10^7$ В/см: а – функция распределения $f(p_1, p_2, t = 0)_{MLF}$, б – функция распределения $f(p_1, p_2, t = 0)_{TBM}$, $[p] = \hbar/a$ (цвет онлайн)
 Fig. 3. Results for the pulse with parameters $\nu = 300.0 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$ and $E_{10} = E_{20} = 1.5 \cdot 10^7 \text{ V/cm}$: а – distribution function $f(p_1, p_2, t = 0)_{MLF}$, б – distribution function $f(p_1, p_2, t = 0)_{TBM}$, $[p] = \hbar/a$ (color online)

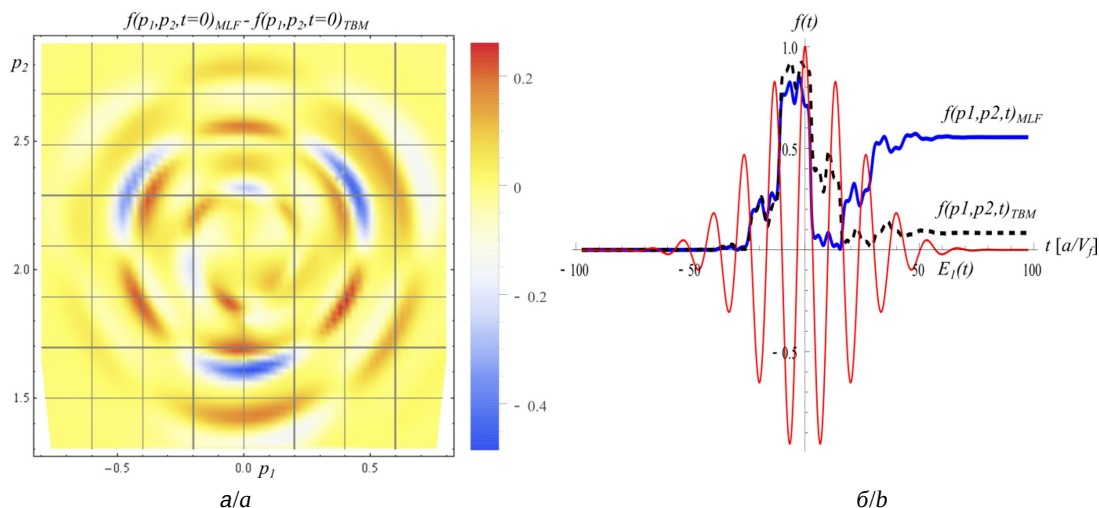


Рис. 4. Распределение разностных значений для функций $f(p_1, p_2, t = 0)_{MLF}$ и $f(p_1, p_2, t = 0)_{TBM}$ с рис. 3 а. Зависимость от времени для $f(p_1, p_2, t)_{MLF}$ и $f(p_1, p_2, t)_{TBM}$ в точке $(p_1 = -0.40497092, p_2 = 2.29483525)$ на фоне первой пространственной компоненты электрического поля (б) (цвет онлайн)

Fig. 4. Distribution of difference values for functions $f(p_1, p_2, t = 0)_{MLF}$ and $f(p_1, p_2, t = 0)_{TBM}$ from Fig. 3 (a). Time dependence for $f(p_1, p_2, t)_{MLF}$ and $f(p_1, p_2, t)_{TBM}$ at the point $(p_1 = -0.40497092, p_2 = 2.29483525)$ on the background of the first spatial component of the electric field (b) (color online)

Приведенные результаты показывают, что в условиях высокоэнергетического воздействия поведение модели на основе ТВМ демонстрирует заметные и существенные отличия от модели на основе приближения безмассовых фермионов. Их учет необходим, например, для метода интерферометрии блоховских электронов в сильном поле [30].

Различие результатов для макроскопических наблюдаемых (7), (10) и (11) проиллюстрированы на рис. 5 и рис. 6. Параметры импульса те же, что

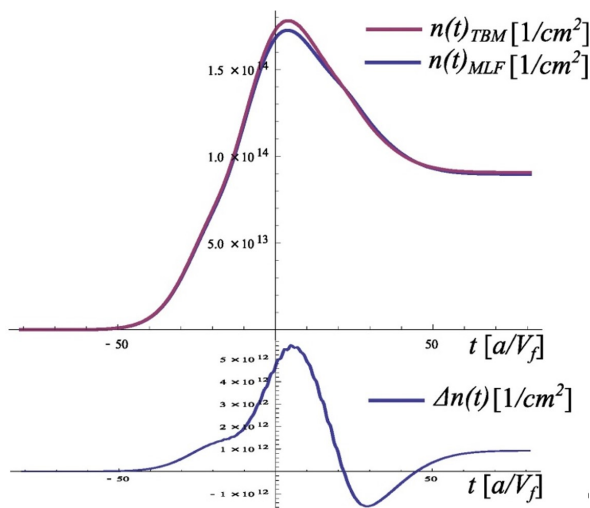


Рис. 5. Зависимость от времени плотности носителей (7) и разницы значений для двух моделей (color online)

Fig. 5. Time dependence of the carrier density (7) and the difference in values for the two models (color online)

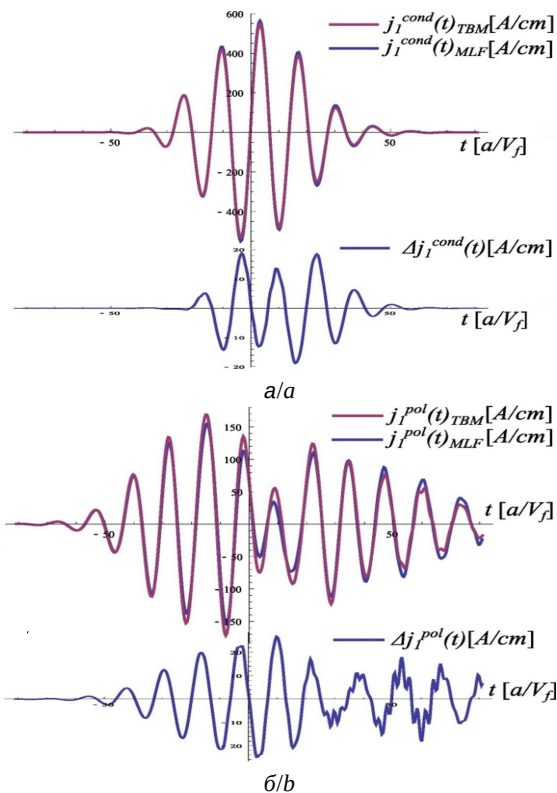


Рис. 6. Зависимость от времени первой компоненты тока проводимости (10) и разницы значений для двух моделей (а). Зависимость от времени первой компоненты поляризационного тока (11) и разницы значений для двух моделей (б) (цвет онлайн)

Fig. 6. Time dependence of the first component of the conduction current (10) and the difference in values for the two models (a). Time dependence of the first component of the polarization current (11) and the difference in values for the two models (b) (color online)



и для рис. 3 и рис. 4. Эти различия относительно не велики и не превышают нескольких процентов, но вполне наблюдаемы. Наиболее заметно их проявление для поляризационного тока.

Заключение

Интерес к нелинейным эффектам и сверхбыстрой динамике электронов в графене в условиях действия на него импульсов электромагнитного излучения с высокой плотностью энергии требует наличия адекватных моделей, позволяющих не только качественно, но и количественно воспроизводить особенности таких процессов.

В работе представлены результаты обобщения метода квантового кинетического уравнения для точной модели сильного взаимодействия ближайших соседей. Получены явные выражения для коэффициентов системы дифференциальных уравнений модели и интегральных выражений для наблюдаемых параметров.

Выполнено сравнение результатов численного моделирования с использованием приближения безмассовых фермионов и новой точной модели. Продемонстрировано строгое совпадение результатов для процессов, в которых существенна роль только низкоэнергетических возбуждений в непосредственной окрестности точек Дирака. Для процессов, протекающих с участием возбужденных состояний вдали от точек Дирака с энергиями порядка 1 эВ и более, показано наличие качественных и количественных различий в предсказываемых результатах.

Результаты работы предоставляют новые возможности в исследовании особенностей поведения графена в экстремальных условиях действия сильных высокочастотных полей, моделирования и поиска новых нелинейных эффектов, точного воспроизведения сверхбыстрой квантовой динамики его электронов для состояний с высокими значениями энергии.

Список литературы

1. Higuchi T., Heide Ch., Ullmann K., Weber H. B., Hommelhof P. Light-field-driven currents in graphene // *Nature*. 2017. Vol. 550. P. 224–228. <https://doi.org/10.1038/nature23900>
2. Aryasetiawan F., Gunnarsson O. The GW method // *Rep. Prog. Phys.* 1998. Vol. 61. P. 237. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/61/3/002>
3. Golze D., Dvorak M., Rinke P. The GW Compendium: A Practical Guide to Theoretical Photoemission Spectroscopy // *Frontiers in Chemistry*. 2019. Vol. 7. Article number 377. <https://doi.org/10.3389/fchem.2019.00377>
4. Provorse M. R., Isborn Ch. M. Electron Dynamics with Real-Time Time-Dependent Density Functional Theory // *International Journal of Quantum Chemistry*. 2016. Vol. 116 P. 739–749. <https://doi.org/10.1002/qua.25096>
5. Mocci P., Mallocci G., Bosin A., Cappellini G. Time-Dependent Density Functional Theory Investigation on the Electronic and Optical Properties of Poly-C,Si,Ge-acenes // *ASC Omega*. 2020. Vol. 5. P. 16654–16663. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c01516>
6. Wilhelm J., Grössing P., Seith A., Crewse J., Nitsch M., Weigl L., Schmid Chr., Evers F. Semiconductor Bloch-equations formalism: Derivation and application to high-harmonic generation from Dirac fermions // *Phys. Rev. B*. 2021. Vol. 103. Article number 125419. <https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.103.125419>
7. Ornigotti M., Carvalho D. N., Biancalana F. Nonlinear optics in graphene: Theoretical background and recent advances // *La Rivista del Nuovo Cimento*. 2023. Vol. 46. P. 295–380. <https://doi.org/10.1007/s40766-023-00043-8>
8. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Katsnelson M. I., Grigorieva I. V., Dubonos S. V., Firsov A. A. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene // *Nature*. 2005. Vol. 438. P. 197–200. <https://doi.org/10.1038/nature04233>
9. Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S., Geim A. K. The electronic properties of graphene // *Rev. Mod. Phys.* 2009. Vol. 81. P. 109–162. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
10. Katsnelson M. I. *The Physics of Graphene*. Cambridge University Press, 2020. 425 p. <https://doi.org/10.1017/9781108617567>
11. Гриб А. А., Мамаев С. Г., Мостепаненко В. М. Вакуумные квантовые эффекты в сильных полях. М.: Энергоатомиздат, 1988. 288 с.
12. Bialynicky-Birula I., Gornicki P., Rafelski J. Phase space structure of the Dirac vacuum // *Phys. Rev. D*. 1991. Vol. 44. P. 1825–1835. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.44.1825>
13. Schmidt S. M., Blaschke D., Röpke G., Smolyansky S. A., Prozorkevich A. V., Toneev V. D. A Quantum kinetic equation for particle production in the Schwinger mechanism // *Int. J. Mod. Phys. E*. 1998. Vol. 7. P. 709–718. <https://doi.org/10.1142/S0218301398000403>
14. Blaschke D. B., Prozorkevich A. V., Röpke G., Roberts C. D., Schmidt S. M., Shkirmanov D. S., Smolyansky S. A. Dynamical Schwinger effect and high-intensity lasers. Realising nonperturbative QED // *Eur. Phys. J. D*. 2009. Vol. 55. P. 341–358. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2009-00156-y>
15. Panferov A., Smolyansky S., Blaschke D., Gevorgyan N. Comparing two different descriptions of the I–V characteristic of graphene: Theory and experiment // *EPJ Web Conf.* 2019. Vol. 204. Article number 06008. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201920406008>
16. Smolyansky S. A., Panferov A. D., Blaschke D. B., Gevorgyan N. T. Nonperturbative kinetic description of electron-hole excitations in graphene in a time dependent electric field of arbitrary polarization //



- Particles. 2019. Vol. 2. P. 208–230. <https://doi.org/10.3390/particles2020015>
17. Smolyansky S. A., Blaschke D. B., Dmitriev V. V., Panferov A. D., Gevorgyan N. T. Kinetic equation approach to graphene in strong external fields // *Particles*. 2020. Vol. 3. P. 456–476. <https://doi.org/10.3390/particles3020032>
 18. Панферов А. Д., Новиков Н. А. Характеристики индуцированного излучения в условиях действия на графен коротких высокочастотных импульсов // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика*. 2023. Т. 23, вып. 3. С. 254–264. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-3-254-264>
 19. Церюпа В. А., Чурочкин Д. В., Дмитриев В. В., Смолянский С. А. Излучение в графене: кинетический подход // *Журнал технической физики*. 2024. Т. 94, вып. 3. С. 351–357. <https://doi.org/10.61011/JTF.2024.03.57371.1-24>
 20. Wallace P. R. The Band Theory of Graphite // *Phys. Rev.* 1947. Vol. 71. P. 622–634. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>
 21. Martin P. C., Schwinger J. Theory of many-particle systems. I // *Phys. Rev.* 1959. Vol. 115. P. 1342–1373. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.115.1342>
 22. Ахиезер А. И., Пелетминский С. В. Методы статистической физики. М. : Наука, 1977. 367 с.
 23. Sipe J. E., Shkrebtii A. I. Second-order optical response in semiconductors // *Phys. Rev. B*. 2000. Vol. 61. P. 5337–5352. <https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.61.5337>
 24. Ishikawa K. L. Nonlinear optical response of graphene in time domain // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 82. Article number 201402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.201402>
 25. Yoshikawa N., Tamaya T., Tanaka K. High-harmonic generation in graphene enhanced by elliptically polarized light excitation // *Science*. 2017. Vol. 356. P. 736–738. <https://doi.org/10.1126/science.aam8861>
 26. Sato Sh. A., Hirori H., Sanari Y., Kanemitsu Y., Rubio A. High-order harmonic generation in graphene: Nonlinear coupling of intraband and interband transitions // *Phys. Rev. B*. 2021. Vol. 103. Article number. L041408. <https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.103.L041408>
 27. Reich S., Maultzsch J., Thomsen C. Tight-binding description of grapheme // *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 66. Article number 035412. <https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.66.035412>
 28. Панферов А. Д., Поснова Н. В., Ульянова А. А. Моделирование поведения двухуровневой квантовой системы с использованием масштабируемых регулярных сеток // *Программные системы: теория и приложения*. 2023. Т. 14, вып. 2. С. 27–47. <https://doi.org/10.25209/2079-3316-2023-14-2-27-47>
 29. Gil-Villalba A., Meyer R., Giust R., Rapp L., Billet C., Courvoisier F. Single shot femtosecond laser nano-ablation of CVD monolayer graphene // *Scientific Reports*. 2018. Vol. 8. Article number 14601. <https://dx.doi.org/10.1038/s41598-018-32957-3>
 30. Weitz T., Heide Chr., Hommelhoff P. Strong-Field Bloch Electron interferometry for Band Structure Retrieval // [arXiv:2309.16313v1](https://arxiv.org/abs/2309.16313v1). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2309.16313>

References

1. Higuchi T., Heide Ch., Ullmann K., Weber H. B., Hommelhoff P. Light-field-driven currents in grapheme. *Nature*, 2017, vol. 550, pp. 224–228. <https://doi.org/10.1038/nature23900>
2. Aryasetiawan F., Gunnarsson O. The GW method. *Rep. Prog. Phys.*, 1998, vol. 61, pp. 237. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/61/3/002>
3. Golze D., Dvorak M., Rinke P. The GW Compendium: A Practical Guide to Theoretical Photoemission Spectroscopy. *Frontiers in Chemistry*, 2019, vol. 7, article no. 377. <https://doi.org/10.3389/fchem.2019.00377>
4. Provorse M. R., Isborn Ch. M. Electron Dynamics with Real-Time Time-Dependent Density Functional Theory. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2016, vol. 116, pp. 739–749. <https://doi.org/10.1002/qua.25096>
5. Mocci P., Mallocci G., Bosin A., Cappellini G. Time-Dependent Density Functional Theory Investigation on the Electronic and Optical Properties of Poly-C, Si, Geacenes. *ASC Omega*, 2020, vol. 5, pp. 16654–16663. <https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.0c01516>
6. Wilhelm J., Grössing P., Seith A., Crewse J., Nitsch M., Weigl L., Schmid Chr., Evers F. Semiconductor Bloch-equations formalism: Derivation and application to high-harmonic generation from Dirac fermions. *Phys. Rev. B*, 2021, vol. 103, article no. 125419. <https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.103.125419>
7. Ornigotti M., Carvalho D. N., Biancalana F. Nonlinear optics in graphene: Theoretical background and recent advances. *La Rivista del Nuovo Cimento*, 2023, vol. 46, pp. 295–380. <https://doi.org/10.1007/s40766-023-00043-8>
8. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Katsnelson M. I., Grigorieva I. V., Dubonos S. V., Firsov A. A. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in grapheme. *Nature*, 2005, vol. 438, pp. 197–200. <https://doi.org/10.1038/nature04233>
9. Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S., Geim A. K. The electronic properties of grapheme. *Rev. Mod. Phys.*, 2009, vol. 81, pp. 109–162. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
10. Katsnelson M. I. *The Physics of Graphene*. Cambridge University Press, 2020. 425 p. <https://doi.org/10.1017/9781108617567>
11. Greeb A. A., Mamaev S. G., Mostepanenko V. M. *Vakuumnye kvantovye efekty v sil'nykh polyakh* [Vacuum quantum effects in strong fields]. Moscow, Energoatomizdat, 1988. 288 p. (in Russian).
12. Bialynicky-Birula I., Gornicki P., Rafelski J. Phase space structure of the Dirac vacuum. *Phys. Rev. D*, 1991, vol. 44, pp. 1825–1835. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.44.1825>
13. Schmidt S. M., Blaschke D., Röpke G., Smolyansky S. A., Prozorkevich A. V., Toneev V. D. A Quantum kinetic equation for particle production in the Schwinger mechanism. *Int. J. Mod. Phys. E*, 1998, vol. 7, pp. 709–718. <https://doi.org/10.1142/S0218301398000403>



14. Blaschke D. B., Prozorkevich A. V., Röpke G., Roberts C. D., Schmidt S. M., Shkirmanov D. S., Smolyansky S. A. Dynamical Schwinger effect and high-intensity lasers. Realising nonperturbative QED. *Eur. Phys. J. D*, 2009, vol. 55, pp. 341–358. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2009-00156-y>
15. Panferov A., Smolyansky S., Blaschke D., Gevorgyan N. Comparing two different descriptions of the I–V characteristic of graphene: Theory and experiment. *EPJ Web Conf.*, 2019, vol. 204, article no. 06008. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201920406008>
16. Smolyansky S. A., Panferov A. D., Blaschke D. B., Gevorgyan N. T. Nonperturbative kinetic description of electron-hole excitations in graphene in a time dependent electric field of arbitrary polarization. *Particles*, 2019, vol. 2, pp. 208–230. <https://doi.org/10.3390/particles2020015>
17. Smolyansky S. A., Blaschke D. B., Dmitriev V. V., Panferov A. D., Gevorgyan N. T. Kinetic equation approach to graphene in strong external fields. *Particles*, 2020, vol. 3, pp. 456–476. <https://doi.org/10.3390/particles3020032>
18. Panferov A. D., Novikov N. A. Characteristics of induced radiation under the action of short high-frequency pulses on graphene. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2023, vol. 23, iss. 3, pp. 254–264. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2023-23-3-254-264>
19. Tseryupa V. A., Churochkin D. V., Dmitriev V. V., Smolyansky S. A. Emission in graphene: A kinetic approach. *Journal of Technical Physics*, 2024, vol. 94, iss. 3, pp. 351–357 (in Russian). <https://doi.org/10.61011/JTF.2024.03.57371.1-24>
20. Wallace P. R. The Band Theory of Graphite. *Phys. Rev.*, 1947, vol. 71, pp. 622–634. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>
21. Martin P. C., Schwinger J. Theory of many-particle systems. I. *Phys. Rev.*, 1959, vol. 115, pp. 1342–1373. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.115.1342>
22. Akhiezer A. I., Peletminskii S. V. *Metody statisticheskoi fiziki* [Methods of statistical physics]. Moscow, Nauka, 1977. 367 p. (in Russian).
23. Sipe J. E., Shkrebtii A. I. Second-order optical response in semiconductors. *Phys. Rev. B*, 2000, vol. 61, pp. 5337–5352. <https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.61.5337>
24. Ishikawa K. L. Nonlinear optical response of graphene in time domain. *Phys. Rev. B*, 2010, vol. 82, article no. 201402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.201402>
25. Yoshikawa N., Tamaya T., Tanaka K. High-harmonic generation in graphene enhanced by elliptically polarized light excitation. *Science*, 2017, vol. 356, pp. 736–738. <https://doi.org/10.1126/science.aam8861>
26. Sato Sh. A., Hirori H., Sanari Y., Kanemitsu Y., Rubio A. High-order harmonic generation in graphene: Nonlinear coupling of intraband and interband transitions. *Phys. Rev. B*, 2021, vol. 103, article no. L041408. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.L041408>
27. Reich S., Maultzsch J., Thomsen C. Tight-binding description of grapheme. *Phys. Rev. B*, 2002, vol. 66, article no. 035412. <https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.66.035412>
28. Panferov A. D., Posnova N. V., Ulyanova A. A. Simulation the behavior of a two-level quantum system using scalable regular grids. *Program Systems: Theory and Applications*, 2023, vol. 14, iss. 2, pp. 27–47 (in Russian). <https://doi.org/10.25209/2079-3316-2023-14-2-27-47>
29. Gil-Villalba A., Meyer R., Giust R., Rapp L., Billet C., Courvoisier F. Single shot femtosecond laser nano-ablation of CVD monolayer grapheme. *Scientific Reports*, 2018, vol. 8, article no. 14601. <https://dx.doi.org/10.1038/s41598-018-32957-3>
30. Weitz T., Heide Chr., Hommelhoff P. Strong-Field Bloch Electron interferometry for Band Structure Retrieval. *arXiv:2309.16313v1*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2309.16313>

Поступила в редакцию 09.04.2024; одобрена после рецензирования 21.05.2024; принята к публикации 03.06.2024
The article was submitted 09.04.2024; approved after reviewing 21.05.2024; accepted for publication 03.06.2024