

ДВУХУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ГРАФЕНЕ В ГАРМОНИЧЕСКОЙ ЛОВУШКЕ

© 2026 г. А. М. Ульянов^{a, *}, О. В. Павловский^{a, b, **}

^aНациональный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, 123182 Россия

^bМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, 119991 Россия

*E-mail: artemulyanov20002@gmail.com

**E-mail: pavlovsky@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 04.11.2024 г.

После доработки 16.06.2025 г.

Принята к публикации 04.07.2025 г.

В работе была рассмотрена одномерная квантовая модель со сложной кинетической частью, воспроизводящей дисперсионное соотношение для электронов в графене. Система помещена в гармоническую ловушку. Для исследования задачи был разработан формализм континуального интеграла в пространстве волновых чисел и получен аналог формулы Фейнмана–Каца. На основе этого подхода было проведено моделирование методом гибридного Монте–Карло. Определена энергия основного состояния. В пространстве волновых чисел выявлено наличие инстантонов между конусами Дирака. Дополнительное исследование путем численного решения уравнения Шрёдингера в k -представлении позволило определить энергетический спектр и волновые функции в случае координатных ловушек разной силы. Выявлено, что благодаря нетривиальному дисперсионному соотношению наблюдается расщепление основного состояния и система является эффективно двухуровневой, несмотря на простоту координатного потенциала.

Ключевые слова: графен, метод Монте–Карло, электронные возбуждения

DOI: 10.56304/S2079562925060351

1. ВВЕДЕНИЕ

Развитие квантовой физики многих тел связано с построением моделей, гамильтонианы которых отражают различные физические особенности рассматриваемых систем, таких как симметрии, характер взаимодействия частиц, граничные условия и влияние внешних сил (см. [1–3]). Многие квантовые модели, широко применяемые в физике конденсированного состояния вещества, описывают сложный характер взаимодействия между квантовыми частицами и внешними полями. Это отражается в сложно устроенной части гамильтониана, отвечающей за взаимодействие частиц (координатная потенциальная часть). Кроме этого, гамильтонианы содержат и импульсную кинетическую часть, отвечающую за динамические свойства модели. Характерный гамильтониан таких моделей имеет следующий вид:

$$H(\hat{p}, \hat{x}) = T(\hat{p}) + V(\hat{x}). \quad (1)$$

Исследование свойств таких квантовых моделей удобно производить с помощью формализма континуального интеграла [4]. Построение континуального интеграла для таких моделей является особенно простым, если импульсная часть га-

мильтониана $T(p)$ квадратична по импульсу, как, например, в случае системы нерелятивистских частиц:

$$T(\hat{p}) = \sum_i^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m}, \quad (2)$$

где N — число частиц системы. Такая простая форма импульсной части гамильтониана позволяет в представлении континуального интеграла проинтегрировать по импульсам и получить выражение для континуального интеграла только в терминах координат. В результате можно получить знаменитое представление континуального интеграла как интеграла по траекториям в координатном пространстве (формула Фейнмана–Каца). В последствии эта же идея была обобщена и на релятивистскую форму импульсного действия в одномерном случае, а затем и в произвольном числе пространственных измерений. В релятивистском случае вид меры траектории изменился, но само построение континуального интеграла как суммы по траекториям в координатном представлении, взятых с определенным весом, осталось прежним.

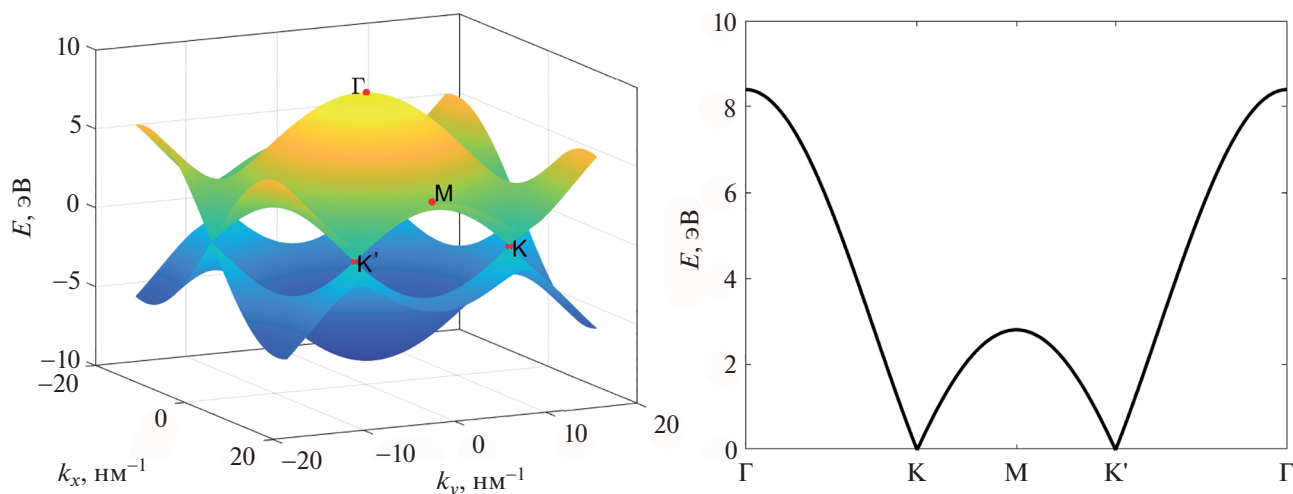


Рис. 1. (а) Дисперсионное соотношение $E(\mathbf{k})$. (б) Сечение графика $E(\mathbf{k})$ вертикальной плоскостью КМК'.

Развитие современной физики, однако, существенно расширило спектр интересных с физической точки зрения моделей, гамильтонианы которых в импульсной части должны иметь весьма нетривиальную форму. Например, физические модели, связанные с современными полуметаллами, должны иметь сложно устроенные кинетические части гамильтонианов, отвечающие нетривиальным дисперсионным соотношениям таких систем. Самым известным примером такой физической системы стал графен.

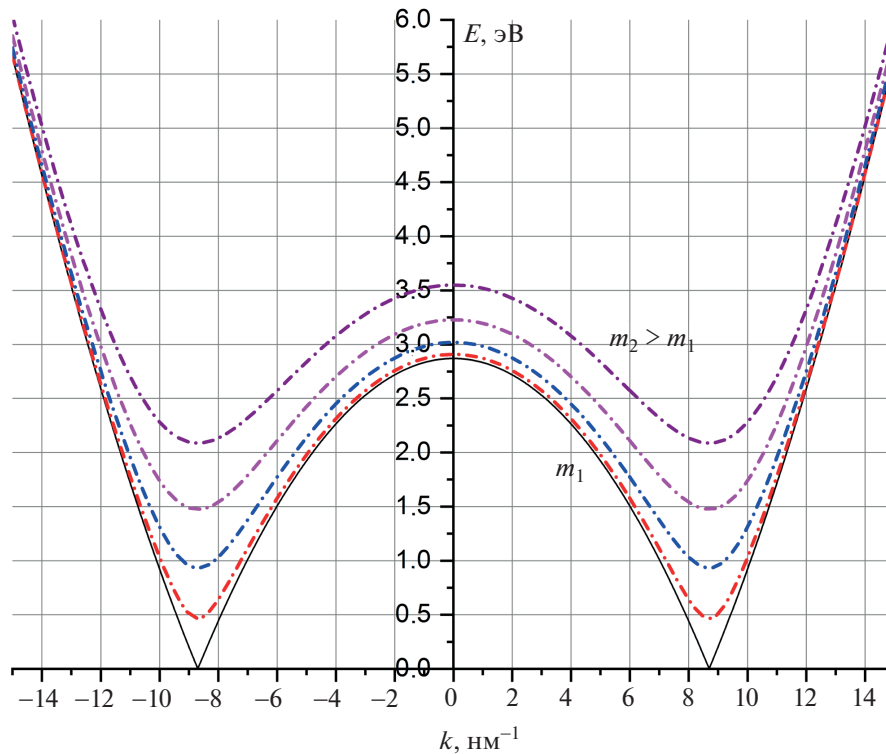
Еще из ранних работ по физике графена стало понятно, что у этой системы в дисперсионном соотношении есть две независимые точки Ферми. С каждой такой точкой связаны дираковские конусы и, соответственно, два типа безмассовых фермионов. В качестве эффективной модели для таких возбуждений можно выбрать модель для таких возбуждений можно выбрать модель $(2 + 1)$ -мерных безмассовых частиц Дирака (киральные фермионы). Такая модель широко использовалась для описания различных явлений в физике графена. Она относительно легко может быть исследована как в рамках одночастичного приближения, так и в многочастичном подходе численно с помощью метода Монте-Карло.

Несмотря на простоту данного подхода, следует отметить, что вышеупомянутая модель безмассовых частиц Дирака может описывать только физику в окрестности точек Ферми при весьма малых энергиях возбуждений. Действительно, из дисперсионного соотношения графена видно, что конусы Дирака не изолированы, а связаны друг с другом при энергиях порядка 3 эВ (рис. 1а). На рис. 1а видно, что в дисперсионном соотношении есть «перевальное» точки М и Г, связывающие минимумы соответствующие нетривиальным точкам Ферми. Такой вид дисперсионного соотношения наталкивает на мысль, что в физике

графена могут быть явления, связанные с такой нетривиальной связью фермионных возбуждений, возникающих в окрестности различных точек Ферми. В нашей работе мы построим простую квантово-механическую модель со схожим поведением в импульсном пространстве и покажем, что нетривиальный вид импульсной части гамильтониана приводит интересным наблюдаемым эффектам даже в рамках простого одночастичного приближения.

2. КВАЗИЧАСТИЦА В ГАРМОНИЧЕСКОЙ ЛОВУШКЕ

Квантово-механические многочастичные модели достаточно давно используются для описания различных явлений в двумерных полуметаллах [5, 6]. Данные модели позволяют учесть сильное кулоновское взаимодействие, возникающее в таких системах между квазичастицами. Однако кинетическая часть гамильтонианов таких моделей выбирается квадратичной по импульсам, что не позволяет учесть квази-релятивистскую природу квазичастиц полуметаллов. Более того, если предположить простую линейную связь импульса квазичастицы с волновым числом, то из структуры дисперсионного соотношения для графена следует, что независимые при низких энергиях квазичастицы, связанные с точками Ферми К и К', оказываются связанными из-за существования перевальной точки М. В нашей работе мы построим простую $(1 + 1)$ -мерную квантово-механическую модель, которая учитывает вышеприведенные особенности дисперсионного соотношения. Рассмотрим пример простой одномерной квантово-механической системы, гамильтониан которой имеет вид:


 Рис. 2. Вид модельного соотношения $T(k)$ при различных m .

$$H = v_F \sqrt{\frac{(p^2 - p_F^2)^2}{4p_F^2} + m^2 v_F^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (3)$$

График кинетического слагаемого представлен на (рис. 2). Зависимость $T(k)$ была подобрана из соображений обеспечения достаточного сходства с сечением дисперсионного соотношения в графене, проходящем через две ближайшие точки Ферми (плоскость КМК' на (рис. 1а)).

Обсудим теперь поведение системы в окрестности точек Ферми $p = \pm p_F$. Для этого перейдем к новому квазиимпульсу в окрестности точки (3)

$$p = \pm p_F - p. \quad (4)$$

Легко видеть, что для малых p гамильтониан (3) принимает вид гамильтониана релятивистского гармонического осциллятора:

$$H \approx v_F \sqrt{p^2 + m^2 v_F^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (5)$$

Таким образом, можно ожидать, что качественная динамика модели представляет собой квантовые флуктуации релятивистского гармонического осциллятора в окрестности точек $p = \pm p_F$ и туннельные процессы квантовых переходов между этими точками.

В литературе по физике графена принято использовать представление через квазиволновые вектора (числа) k , вместо квазиимпульсов $p = \hbar k$. Поэтому в данной работе использовалась следующая форма гамильтониана:

$$H = v_F \sqrt{\frac{(k^2 - k_F^2)^2}{4k_F^2} + \frac{m^2 v_F^2}{2}} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (6)$$

Далее мы покажем, что для данной системы можно получить аналог формулы Фейнмана–Каца, в которой амплитуда перехода выражена через континуальный интеграл по пространству волновых чисел. Чтобы сделать это, нам потребуется в континуальном интеграле проинтегрировать по координатам x . Поэтому для модели крайне важно, чтобы гамильтониан квадратично зависит от координат. Коротко обсудим, как такой потенциал может возникнуть в физической задаче.

На рис. 3 показан пример физической ловушки для квазичастиц графена на подложке. Предположим, что в точке O на высоте h_0 от плоскости графена G расположен заряд Ze . Тогда кулоновский потенциал взаимодействия этого заряда с отрицательно заряженными квазичастицами графена будет иметь вид для больших h_0

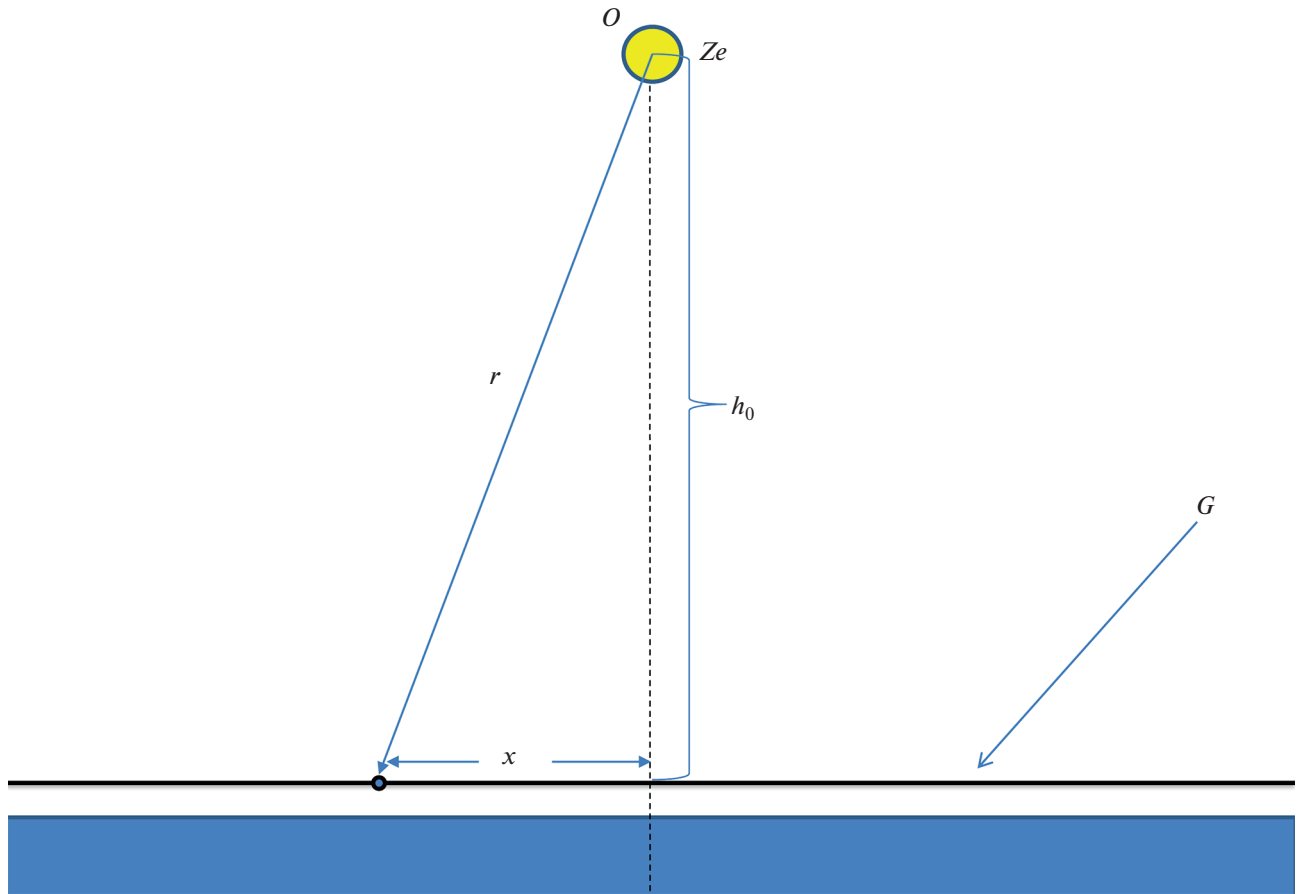


Рис. 3. Принципиальная схема ловушки.

$$V(x) = -\frac{Ze^2}{\sqrt{x^2 + h_0^2}} =$$

$$= -\frac{Ze^2}{h_0} \left(1 - x^2/(2h_0^2) + \dots\right) = \text{const} + m\omega^2 x^2 + \dots, \quad (7)$$

где $m\omega^2 = \frac{Ze^2}{h_0^3}$. из приведенного видно, что для больших h_0 потенциал имеет приближенно гармонический вид и поправки могут быть учтены с помощью теории возмущений

3. ФОРМАЛИЗМ КОНТИНУАЛЬНОГО ИНТЕГРАЛА В ПРОСТРАНСТВЕ ВОЛНОВЫХ ЧИСЕЛ (ВЕКТОРОВ)

Поставим перед собой задачу вычисления амплитуды перехода:

$$P(k_f, t_f | k_0, t_0) = \langle k_f | \hat{U}(t_f, t_0) | k_0 \rangle =$$

$$= |k_f\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(t_f - t_0)(T(\hat{k}) + V(\hat{x}))} |k_0\rangle. \quad (8)$$

Для того, чтобы вычислять результаты действия операторов, разобьем промежуток (t_b, t_a) на N промежутков длиной Δt . Эта длина играет роль малого параметра для формулы Бейкера–Кэмпбелла–Хаусдорфа, позволяющего разделить экспоненты $\hat{T}$ и $\hat{V}$. Мы используем набор соглашений о нормировке векторов, обеспечивающий выполнение равенств:

$$\frac{1}{2\pi} \int dk |k\rangle \langle k| = \int dx |x\rangle \langle x| = 1, \quad (9)$$

$$\langle x | k \rangle = e^{ikx}. \quad (10)$$

Вставляя соотношения вида (9), приходим к выражению:

$$P(k_f, t_f | k_0, t_0) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{N-1} \int dk_1 \dots dk_{N-1} \times$$

$$\times \int dx_1 \dots dx_N \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right), \quad (11)$$

где S – дискретизованное классическое действие вдоль траектории в фазовом пространстве:

$$S = -\Delta t \sum_{n=1}^N x_n \frac{(k_n - k_{n-1})}{\Delta t} + T(k_n) + V(x_n). \quad (12)$$

Если рассмотреть систему с гамильтонианом вида $H = \frac{k^2}{2m} + V(x)$, то интегралы по импульсам окажутся гауссовыми и их можно было бы вычислить явно, что привело бы к формуле Фейнмана–Каца. В данной работе, напротив, исследуется система со сложной кинетической частью в квадратичном гармоническом потенциале: $H = T(k) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Вычисляя интегралы по координатам, приходим к формуле:

$$P(k_f, t_f | k_0, t_0) = 2\pi \left(\frac{1}{2\pi i \Delta t m \omega^2} \right)^{\frac{N}{2}} \times \int dk_1 \dots dk_{N-1} \exp \frac{i}{\Delta t} S, \quad (13)$$

$$\text{где } S = \Delta t \sum_{n=1}^N \frac{(k_n - k_{n-1})^2}{2\Delta t^2 m \omega^2} - T(k_n). \quad (14)$$

Можно выполнить переход к мнимому времени τ , связанным с действительным временем соотношением $\Delta t = -i \Delta \tau$. Такое преобразование, называемое поворотом Вика, позволяет связать квантовую механику со статистической механикой. Выражения (13) принимают вид, в котором наглядно виден больцмановский фактор $e^{-S_{cl}}$:

$$P(k_f, t_f | k_0, t_0) = 2\pi \left(\frac{1}{2\pi \Delta \tau m \omega^2} \right)^{\frac{N}{2}} \times \int dk_1 \dots dk_{N-1} \exp(-S_{cl}), \quad (15)$$

$$\text{где } S_{cl} = \Delta \tau \sum_{n=1}^N \frac{(k_n - k_{n-1})^2}{2\Delta \tau^2 m \omega^2} + T(k_n). \quad (16)$$

Можно перейти к вычислению статистической суммы:

$$Z = \frac{1}{2\pi} \int dk_0 P(k_0, t_f | k_0, t_0). \quad (17)$$

Сохраняя дискретизованную форму выражений, можно получить:

$$Z = \left(\frac{1}{2\pi \Delta \tau m \omega^2} \right)^{\frac{N}{2}} \int dk_1 \dots dk_N \times \exp \left(-\Delta \tau \sum_{n=1}^N \frac{(k_n - k_{n-1})^2}{2\Delta \tau^2 m \omega^2} + T(k_n) \right) \Big|_{k_N=k_0}. \quad (18)$$

Теперь можно вычислить энергию системы $\bar{E} = -d \ln Z / d\beta$. С учетом $\beta = N \Delta \tau$:

$$\bar{E} = \left\langle \frac{1}{2\Delta \tau} + \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N T(k_n) - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{(k_n - k_{n-1})^2}{2\Delta \tau^2 m \omega^2} \right\rangle, \quad (19)$$

где скобки означают среднее на траекториях в пространстве волновых чисел, распределенных по $e^{-S_{cl}}$, как в (18). Вспоминая, что при повороте Вика потенциал, определяющий закон движения, должен поменять знак, можно понять смысл слагаемых в (19) — T играет роль потенциала, кинетическим слагаемым является член с дискретизованной производной импульса. Слагаемое $1/(2\Delta \tau)$ называется фрактальной сингулярностью и его следует относить к кинетической части.

Для исследуемой системы получено аналитическое выражение для статистической суммы.

Возникшая после поворота Вика мера $e^{-S_{cl}}$ (16) на пространстве волновых чисел указывает на возможность продуктивного применения методов Монте-Карло для численного моделирования. В данной работе для этого применяется гибридный алгоритм Монте-Карло, представляющий собой комбинацию алгоритмов Метрополиса и молекулярной динамики [7]. Такой подход обеспечивает генерацию траекторий с требуемой мерой, осуществляя нелокальные изменения траекторий в пространстве волновых чисел. Это особенно существенно для нашей работы, так как это пространство имеет сложную топологическую структуру, связанную с туннелированием частицы между областями точек $+k_F$ и $-k_F$. В квазиклассическом приближении такие туннельные процессы связаны с инстантонами в пространстве волновых чисел. Эти инстантоны аналогичны тем, которые возникают в известной задаче о поведении частицы в W -потенциале [11]. В связи с этим, пространство состояний данной модели также поделено на топологические классы, соответствующие различному количеству инстантонов на траектории. Алгоритм гибридного Монте-Карло за счет нелокальных изменений в траектории позволяет эффективно преодолевать границы между такими топологическими классами, которые называются доменными стенками.

4. ПАРАМЕТРЫ ИССЛЕДУЕМОЙ МОДЕЛИ

В данной работе мы используем следующую параметризацию исследуемой модели:

$$A = v_F, \quad B = \frac{m}{2}, \quad d = m\omega^2. \quad (20)$$

В этой параметризации гамильтониан (6), действие в евклидовом времени (16) и средняя энергия (19) имеют следующий вид:

$$H = A\sqrt{\frac{(k^2 - k_F^2)^2}{4k_F^2}} + B^2 A^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad (21)$$

$$S_{cl} = \Delta\tau \sum_{n=1}^N \frac{(k_n - k_{n-1})^2}{2\Delta\tau^2 d} + A\sqrt{\frac{(k_n^2 - k_F^2)^2}{4k_F^2}} + B^2 A^2, \quad (22)$$

$$\bar{E} = \left\langle \frac{1}{2\Delta\tau} + \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N A\sqrt{\frac{(k_n^2 - k_F^2)^2}{4k_F^2}} + B^2 A^2 - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{(k_n - k_{n-1})^2}{2\Delta\tau^2 d} \right\rangle. \quad (23)$$

Из соображений обеспечения соответствия с реальным видом зависимости $T(k)$, представленном на рис. 1, фиксируем значение A равным $0.66 \text{ эВ} \cdot \text{нм}$, при этом $k_F = 8.7 \text{ нм}^{-1}$. Значение параметра B определяется величиной регуляризующей массы m . Данный параметр определяет гладкость поведения $T(k)$ к окрестности точек Ферми $\pm k_F$. В работе он был выбран равным $B = 0.1 \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{нм}^{-2}$, что соответствует малому значению регуляризующей массы m .

Величина $d = m\omega^2 = Ze^2/h_0^3$ является главным регулируемым параметром модели, так как именно она определяет ω , то есть силу ловушки, в которую помещена система.

В данной работе, помимо описанного выше метода Монте-Карло, для исследования системы также применяется непосредственное решение стационарного уравнения Шрёдингера. Хотя этот подход существенно сложнее распространяется на двумерный случай, он позволяет за короткое время найти энергетический спектр системы, в том числе определить энергию основного состояния E_0 , а также энергию ΔE первого возбужденного состояния по сравнению с основным. Кроме того, решив уравнение Шрёдингера в k -представлении можно найти волновые функции $\Psi(k)$ и выполнить обратное преобразование Фурье, чтобы затем найти волновые функции $\Psi(x)$ в координатном представлении и оценить локализацию плотности вероятности $|\Psi(x)|^2$.

Выпишем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$\hat{H}\Psi = (T(\hat{k}) + V(\hat{x}))\Psi = E\Psi, \quad (24)$$

и воспользуемся k -представлением оператора координаты

$$\hat{x} = i \frac{d}{dp} = i \frac{d}{dk}. \quad (25)$$

Подставим выражение для $T(k)$ и перепишем все в введенной выше параметризации. В итоге

приходим к стационарному уравнению Шрёдингера в представлении волновых чисел.

$$\left(A\sqrt{\frac{(k^2 - k_F^2)^2}{4k_F^2}} + B^2 A^2 - \frac{1}{2} d \frac{\partial^2}{\partial k^2} \right) \Psi(k) = E\Psi(k). \quad (26)$$

Если теперь поставить граничные условия на $\Psi(k)$ (затухание на бесконечности), то получившаяся задача на собственные значения E может быть решена численно.

5. ИНСТАНТОНЫ МОДЕЛИ В k -ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Как мы уже отмечали, основной особенностью рассматриваемой модели является наличие двух точек Ферми при $\pm k_F$. Так как $T(k)$ в k -представлении играет роль потенциала для квазичастицы, то рассматриваемая задача становится крайне похожей на известную задачу о поведении квантовой частицы в W -потенциале. Основной особенностью моделей данного типа является существование туннелирования частицы между потенциальными ямами, которое приводит к ряду важных физических следствий. В данном разделе мы обсудим такие туннельные процессы в данной модели и покажем влияние инстантонов в k -представлении (k -инстантонов) на физическое поведение квазичастиц.

Рассмотрим характерные равновесные траектории в k -представлении, полученные методом гибридного Монте-Карло, и представленные на рис. 4.

Как известно [11], роль инстантонов в моделях данного типа растет с увеличением евклидова времени β , которое обратно пропорционально температуре рассматриваемой системы. Таким образом, при высокой температуре, или малых значениях β , инстантоны играют незначительную роль и встречаются редко, а при низких температурах, или при больших евклидовых временах траекторий β , инстантоны начинают доминировать в евклидовой динамике модели. Это явление хорошо видно на представленных траекториях. На рис. 4 представлены траектории при $\beta = 1.6$ и $\beta = 3.2$. Вторая из этих траекторий содержит два инстантона, идущих друг за другом. При более высоких β инстантоны возникают чаще, так как они образуют континуум (решения такого рода параметризованы своим временем возникновения на траектории) и их вклад в амплитуду перехода растет с увеличением длины отрезка времени β [11].

При помощи метода Монте-Карло была найдена зависимость энергии от обратной температуры $E(\beta)$ (рис. 5). Из нее была найдена энергия основного состояния E_0 при значении параметра $d = 44.616 \text{ эВ} \cdot \text{нм}^{-2}$.

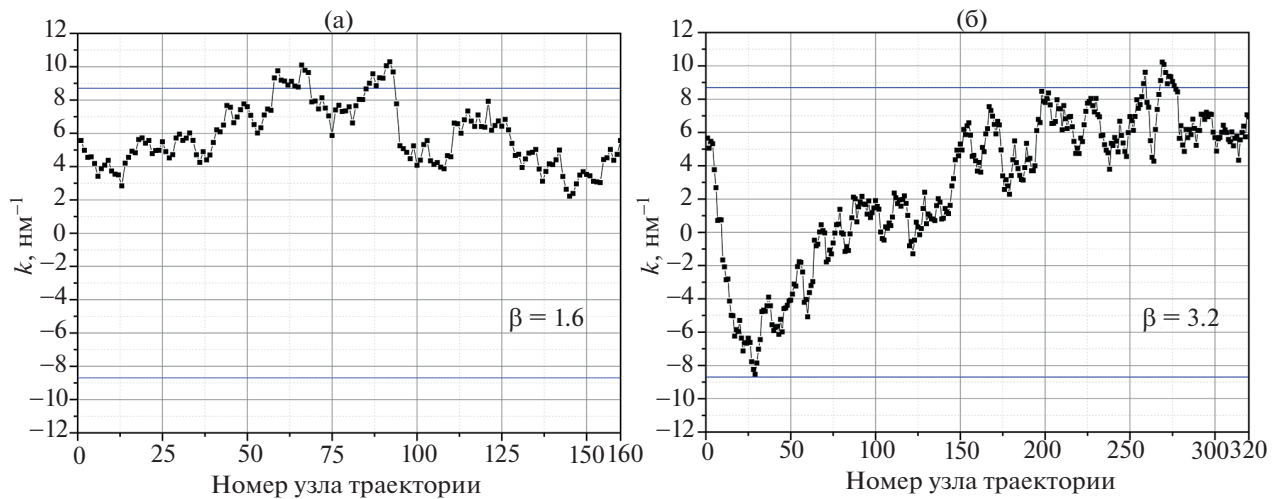


Рис. 4. (а) Траектория k -представлении при $\beta = 1.6$ и $d = 44.616$ эВ $\cdot$ нм $^{-2}$. (б) Траектория в k -представлении при $\beta = 3.2$ и $d = 44.616$ эВ $\cdot$ нм $^{-2}$.

$$E_0 = 2.01 \pm 0.01 \text{ эВ.} \quad (27)$$

Кроме того, в рамках данного подхода возможно оценить вклад отдельных слагаемых (23) в энергию. Зависимость средних значений кинетической (с учетом фрактальной сингулярности $1/2\Delta\tau$) и потенциальной частей от температуры представлена на рис. 6. Из графика видно, что при больших значениях температуры они приближаются к случаю гармонического осциллятора $E = T/2$.

6. КВАНТОВЫЕ СОСТОЯНИЯ КВАЗИЧАСТИЦЫ В ГАРМОНИЧЕСКОЙ ЛОВУШКЕ: ДВУХУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА

При помощи решения уравнения Шрёдингера был найден энергетический спектр:

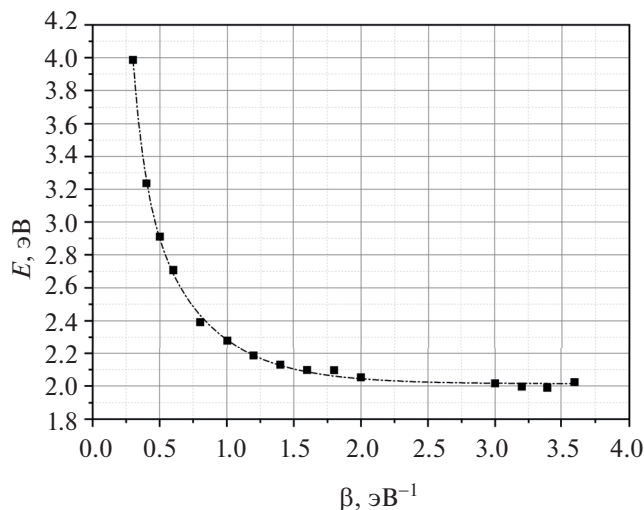


Рис. 5. Зависимость энергии от обратной температуры $E(\beta)$ при $d = 44.616$ эВ $\cdot$ нм $^{-2}$.

$$E_0 = 1.95 \text{ эВ, } E_1 = 2.18 \text{ эВ, } E_2 = 3.98 \text{ эВ} \quad (28)$$

и волновые функции в k -представлении. Значение параметра $d = 44.616$. Применением преобразования Фурье из них были найдены волновые функции $\Psi(x)$, а затем плотности вероятности $|\Psi_0(x)|^2$ и $|\Psi_1(x)|^2$. Возможно оценить радиус локализации по координате, он составляет около 0.5 нм, при расстоянии между атомами углерода в графене равном 0.142 нм [10]. При помощи уравнения Шрёдингера также было исследовано поведение системы при других значениях параметра силы ловушки d . Найдены энергетические спектры, в том числе величина расщепления основного состояния ΔE . В таблице представлены общие результаты — значения энергии первых трех состояний, величина разности $E_1 - E_0$ (расщепление основного состояния), а также отношение этой

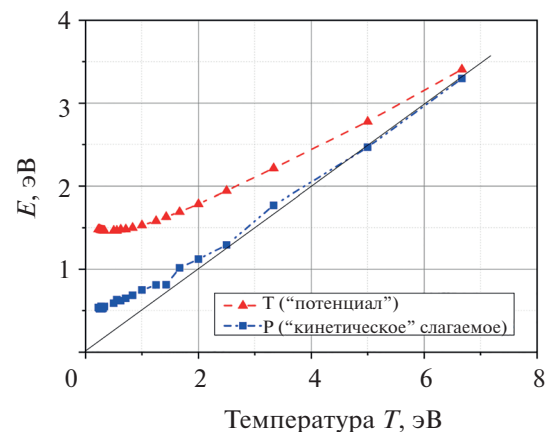


Рис. 6. Вклады кинетического и потенциального слагаемых в энергию при различных температурах.

Таблица 1. Общие результаты

d	E_0	E_1	E_2	ΔE	$\Delta E/(E_2 - E_1)$	L
10	1.29868	1.30095	2.67008	0.00227	0.00166	1.3
25	1.69932	1.76126	3.27067	0.06194	0.04104	1
50	1.99289	2.28339	4.17858	0.2905	0.15328	0.75
75	2.15666	2.71465	5.02053	0.55799	0.24199	0.6
100	2.27834	3.10088	5.79106	0.82254	0.30576	0.5
200	2.63542	4.40597	8.36283	1.77055	0.44746	0.4

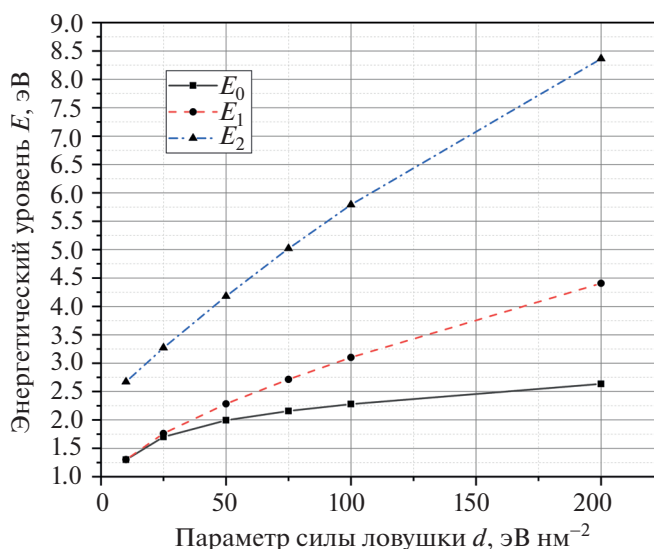
разности к расстоянию до следующего уровня $\Delta E/(E_2 - E_1)$. Также приведена оценка радиуса локализации $|\Psi_0(x)|^2$ по координате, обозначенная как L . Под L понимается такое расстояние от начала координат, при котором $|\Psi_0(x)|^2$ не превышает $1/10$ своего максимального значения. Все энергии указаны в эВ, L — в нм, d — в эВ · нм⁻².

Видно, что благодаря сложной топологии в пространстве волновых чисел наблюдается малое расщепление основного состояния. При этом с ростом силы ловушки падает локализация и спектр теряет свою эффективную “двухуровневость”, так как $\Delta E/(E_2 - E_1)$ растет. Это видно на рис. 7, на котором представлены значения E_0 , E_1 и E_2 при различных значениях параметра силы ловушки d .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование одномерной квантово-механической системы, кинетическая часть в которой аналогично дисперсионному соотноше-

нию электронных возбуждений в графене. Были совместно применены два подхода: численная генерация траекторий системы в пространстве волновых чисел при помощи метода Монте-Карло с последующим вычислением термодинамических средних и непосредственное численное решение уравнения Шрёдингера в импульсном пространстве. Построенный гибридный алгоритм позволяет находить зависимость энергии системы от температуры. С его помощью была найдена энергия основного состояния и оценено поведение теплоемкости. Также построен энергетический спектр. Исследована зависимость величины расщепления основного состояния и локализации частицы от силы координатной ловушки. Полученные результаты указывают, что при определенном наборе параметров система является эффективно двухуровневой при сохранении достаточно большой локализации. Разработанные в работе аналитические и численные методы могут быть применены для дальнейшего исследования графена и других двумерных систем. Важным результатом является то, что несмотря на гармонический вид координатной ловушки, бла-

Рис. 7. Положение первых трех энергетических уровней при различных значениях параметра d .

годаря топологическим эффектам наблюдается расщепление основного энергетического состояния. В данной эффективно двухуровневой системе энергетическую щель между уровнями возможно регулировать изменяя параметр ω гармонического потенциала. Это обстоятельство указывает на возможность применения системы такого рода в качестве относительно простого базового элемента для квантового компьютера.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при частичной поддержке государственного задания НИЦ "Курчатовский институт".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Thouless D.J.* The Quantum Mechanics of Many-Body Systems. 2013. New York: Courier Corporation.
2. *Fetter A.F., Walecka J.D.* Quantum Theory of Many-Particle Systems. 2012. New York: Courier Corporation.
3. *Lindgren I., Morrison J.* Atomic Many-Body Theory. 1982. Berlin: Springer.
4. *Kleinert H.* Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets. 2009. Singapore: World Scientific.
5. *Velizhanin K.A., Saxena A.* // Phys. Rev. B. 2015. V. 92 (19). P. 195305.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.195305>
6. *Gilbert M.J., Shumway J.* // J. Comput. Electron. 2009. V. 8. P. 51–59.
<https://doi.org/10.1007/s10825-009-0286-y>
7. *Rothe H.J.* Lattice Gauge Theories: An Introduction. 2012. Singapore: World Scientific.
8. *Dresselhaus G., Dresselhaus M.S., Saito R.* Physical Properties of Carbon Nanotubes. 1998. Singapore: World Scientific.
9. *Saito R., Kataura H.* Optical Properties and Raman Spectroscopy of Carbon Nanotubes. 2001. Berlin: Springer.
10. *Katsnelson M.I.* // Mater. Today. 2007. V. 10 (1–2). P. 20–27.
[https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(06\)71788-6](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(06)71788-6)
11. *Polyakov A.M.* Gauge Fields and Strings. 1987. New York: Taylor and Francis.

Two-Level Quantum System Based on Electronic Excitations in Graphene in a Harmonic Trap

A. M. Ulianov^{1, *} and O. V. Pavlovsky^{1, 2, **}

¹National Research Centre "Kurchatov Institute", Moscow, 123182 Russia

²Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

*e-mail: artemulyanov20002@gmail.com

**e-mail: pavlovsky@physics.msu.ru

Received November 4, 2024; revised June 16, 2025; accepted July 4, 2025

Abstract—In this work we investigate a one-dimensional quantum mechanical model of a single particle with non-trivial dispersion relation in a harmonic potential. The model is motivated by the study of the properties of graphene and accounts for the tunneling between two adjacent Dirac cones in wavenumber space. It is shown that such tunneling leads to the splitting of energy levels even in simple harmonic trap. Results were obtained using two different methods: Monte Carlo simulation and numerical solution of the Schrodinger equation. A potential application of this effect for the creation of two-level quantum systems is discussed.

Keywords: graphene, Monte Carlo method, electronic excitations