

Поляризационные эффекты и резонансное поглощение при дифракции терагерцовых волн на графеновых метаповерхностях

© А.М. Лерер¹, Г.С. Макеева²

¹ Южный федеральный университет, физический факультет, 344090 Ростов-на-Дону, Россия

² Пензенский государственный университет, 440026 Пенза, Россия

e-mail: lerer@sfedu.ru

Поступила в редакцию 29.08.2018 г.

Тремя электродинамическими методами решена задача дифракции электромагнитных волн на графеновых метаповерхностях — 2D-периодических решетках прямоугольных графеновых нанолент, расположенных на подложках, содержащих диэлектрические и графеновые слои. Исследованы зависимости от частоты коэффициента прохождения через THz поляризаторы на основе графеновых метаповерхностей при изменении угла ориентации векторов падающей ТЕМ-волны к нанолентам графена для различных значений химического потенциала. Показано, что на частотах резонанса поверхностного плазмон-поляритона графеновые метаповерхности на многослойных подложках являются электрически управляемыми поглотителями почти 100% падающей на них энергии в THz диапазоне частот.

DOI: 10.21883/OS.2018.12.46948.257-18

Уникальные оптические и электронные свойства графена открыли новые горизонты для фундаментальной физики и технологических достижений в электронике, оптике и энергетике. Графен имеет существенные преимущества, такие как почти не зависящее от длины волны поглощение, управляемость посредством электростатического легирования, высокая концентрация носителей заряда, низкая скорость диссипации, экстраординарные электронные свойства и возможность ограничивать электромагнитную энергию в беспрецедентно малых объемах.

В последнее десятилетие прогресс в изготовлении графена и наноструктур на основе графена открывает большие возможности для создания перестраиваемых THz и ИК метаматериалов и управляемых интегральных плазмонных устройств и метаматериалов для потенциальных применений в устройствах THz и ИК диапазонов [1].

Использование фигурного графена представляется чрезвычайно интересным для преодоления ограничений существующих технологий с точки зрения рабочих частот, сложности электрического смещения благодаря известному эффекту управляемости графена электрическим полем, а также интеграции и миниатюризации [2,3]. В последние годы наблюдается значительный прогресс в развитии технологии получения графеновых нанолент [4]. Новые направления, новые перспективы и новые приложения появляются в области метаматериалов на основе графена и их 2D-версии, метаповерхностей, ультратонких структур.

Разработка и изготовление THz и ИК устройств на основе графена зависят от развития средств моделиро-

вания на основе точных и адекватных математических моделей, базирующихся на строгом решении уравнений Максвелла совместно с моделью проводимости графена.

В графеновом слое, расположенном на поверхности диэлектрического слоя в ТГц диапазоне, может распространяться поверхностный плазмон-поляритон (ППП). В ограниченном графеновом элементе наблюдается резонанс ППП, при котором резко возрастают плотность энергии вблизи слоя, плотность тока и потери. Из-за большого коэффициента замедления ППП резонансные размеры этого элемента много меньше длины волны в вакууме. Этот эффект используется в ряде THz устройств, в том числе поглощающих метаповерхностях [5–12]. Обычно они являются однопериодическими структурами, образованными графеновыми лентами, и содержат поглощающие слои, например металлические пленки. Аналогичные устройства, содержащие плазмонные материалы, используются и в оптическом диапазоне [13–16]. Роль поглощающих слоев очевидна. Периодические элементы и диэлектрические слои, на которые нанесены эти элементы, обеспечивают согласование, т. е. минимизацию отражения при резонансе, а в некоторых структурах и дополнительные потери. Выбор размеров и параметров элементов позволяет получить резонанс в заданном частотном диапазоне. Применение графеновых элементов позволяет добиться резонанса в THz диапазоне. Кроме того, в графеновых структурах положение резонанса поглощения можно изменять внешним электрическим полем.

Целью работы является исследование взаимодействия электромагнитных волн с графеновыми метаповерхностями с помощью математического моделирования, ба-

зирующегося на строгом решении краевых задач для уравнений Максвелла, и прогнозирование физических эффектов для разработки перспективных перестраиваемых устройств на основе графеновых метаповерхностей в THz диапазоне частот.

1. Математические модели

Рассмотрим 3D-задачу дифракции электромагнитной волны на графеновой метаповерхности, состоящей из прямоугольных графеновых полосок (нанолент графена конечной длины) (рис. 1, *a*), расположенных на многослойной подложке, содержащей графеновые и диэлектрические слои (рис. 1, *b*), в ТГц диапазоне частот. Полоски с размерами w, l , где w — ширина и l — длина наноленты, периодичность 2D решетки a, b по оси x и y соответственно (рис. 1, *b*).

Пусть на графеновую метаповерхность падает плоская однородная электромагнитная волна с волновым вектором \mathbf{k} и частотой ω . Волна распространяется вдоль оси z , вектор напряженности электрического поля \mathbf{E} ТЕМ-волны ориентирован под углом φ к нанолентам графена, вектор \mathbf{k} ориентирован под углом падения θ к нормали к плоскости нанолент графена (рис. 1, *b*).

Монослой графена характеризуется поверхностной проводимостью σ , определяемой формулой Кубо [17]. Проводимость графена, согласно модели Кубо, зависит, в частности, от химического потенциала, который можно изменять, например, приложенным внешним электрическим полем [17].

В электродинамической модели THz поляризаторов краевую 3D-задачу дифракции для уравнений Максвелла с соответствующими электродинамическими граничными условиями на периодической 2D-структуре решаем на основе декомпозиционного подхода [18]. Элементарную ячейку периодической 2D-структуры (рис. 1, *a*), содержащую отрезок канала Флоке с неоднородным заполнением в виде прямоугольной наноленты графена конечной длины и диэлектрического слоя (рис. 1, *b*), будем рассматривать как автономный блок с каналами Флоке (ФАБ) [19].

Вычислительный алгоритм определения дескрипторов (матриц проводимости) ФАБ, содержащего прямоугольную наноленту графена конечной длины (рис. 1, *b*), построен на основе решения краевой 3D-задачи дифракции проекционным методом Галеркина [20].

При расчете поглотителей используются два более специализированных метода. В первом методе графеновые слои, как обычно, заменяются бесконечно тонкими импедансными слоями, импеданс которых определяется формулой Кубо. В этом приближении задача сводится к решению парных сумматорных уравнений относительно плотности тока на полосках [21]. Эти уравнения решены методом Галеркина, в котором базисные функции — полиномы Гегенбауэра.

Второй метод основан на численно-аналитическом методе решения объемного интегродифференциального уравнения (ОИДУ) для диэлектрических тел [22]. Неизвестными в ОИДУ являются компоненты напряженности электрического поля внутри диэлектрических полосок. Для интеграции графеновых слоев в программы расчета дифракционных решеток [14–16], [22], [23], волноводов и фотонных кристаллов [24] введены эквивалентная „диэлектрическая проницаемость“ ε_e и эквивалентная „толщина“ t_e графена. При введении ε_e, t_e мы использовали аналогию с тонким диэлектрическим слоем с диэлектрической проницаемостью ε и толщиной t . При решении электродинамических задач этот слой можно заменить бесконечно тонким импедансным слоем, на котором выполняются приближенные граничные условия [25]

$$\mathbf{j} = i \frac{k(\varepsilon - 1)t}{Z_0} \mathbf{E}_{tg}, \quad (1)$$

где Z_0 — волновое сопротивление свободного пространства, \mathbf{E}_{tg} — напряженность тангенциального электрического поля, эквивалентный ток определяется через скачок напряженности магнитного поля при переходе через слой

$$\mathbf{j} = [\mathbf{u}, \Delta \mathbf{H}].$$

Сравнивая (1) с формулой Кубо

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}_{tg},$$

получим

$$\varepsilon_e = 1 - \frac{Z_0(i\sigma' + \sigma'')}{kt_e}.$$

Параметр t_e может быть любой при условии $t_e \ll \lambda$, где λ — длина волны в вакууме. Это не значит, что графен имеет такую введенную толщину и такую диэлектрическую проницаемость. Это говорит лишь о том, что свойства графена для указанного круга задач можно описать как свойства диэлектрического слоя с введенными параметрами.

Расчеты графеновых структур разными методами расширяют круг решаемых задач электродинамики графеновых структур, позволяет перейти к решению нелинейных задач. Кроме того, расчет устройств двумя независимыми методами подтверждает достоверность теоретических результатов.

2. Результаты моделирования поляризационных эффектов при дифракции THz волн на метаповерхности из прямоугольных нанолент графена

При помощи разработанного вычислительного алгоритма методом ФАБ проведено математическое моделирование дифракции THz волн на метаповерхности из

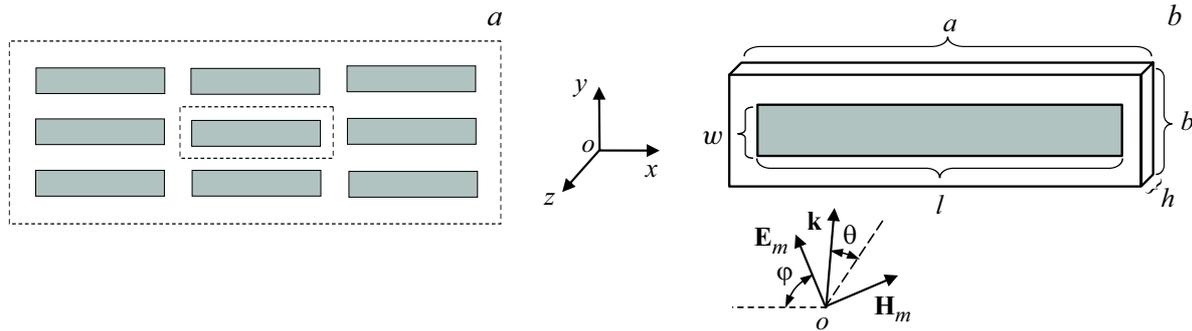


Рис. 1. Расчетная схема дифракции ТЕМ-волны на графеновой метаповерхности: (а) 2D-решетка из прямоугольных нанолент графена; (б) ячейка метаповерхности и ориентация падающей ТЕМ-волны с волновым вектором \mathbf{k} ; φ — угол ориентации вектора \mathbf{E} волны к нанолентам графена; θ — угол падения волны; a, b — периодичность 2D-решетки; w, l — размеры прямоугольной наноленты графена.

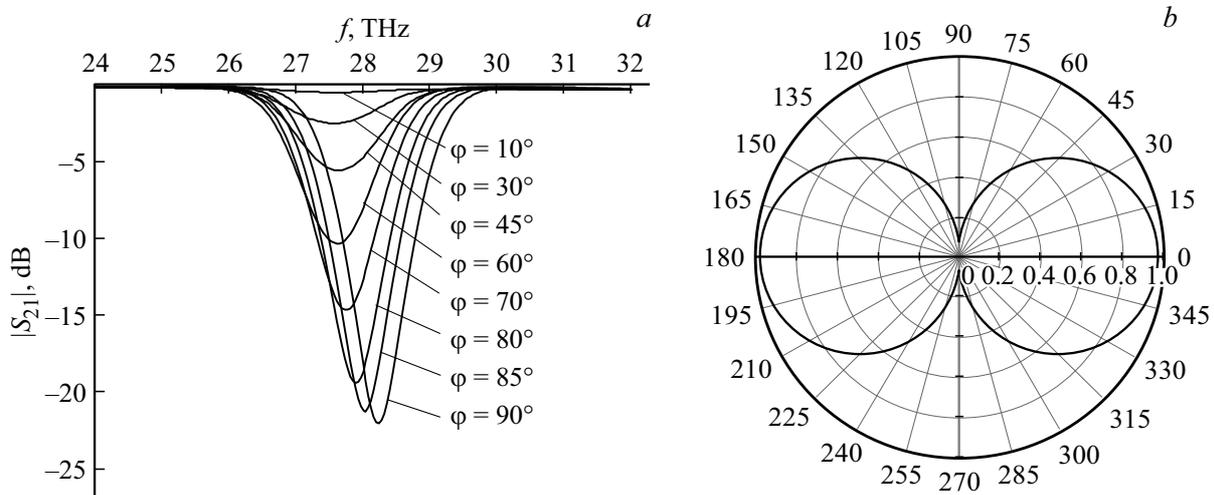


Рис. 2. Зависимость модуля коэффициента прохождения $|S_{21}|$ ТЕМ-волны через метаповерхность из прямоугольных нанолент графена: (а) от частоты при различных значениях угла φ ориентации вектора \mathbf{E} падающей ТЕМ-волны к нанолентам графена; (б) от угла φ ориентации вектора \mathbf{E} падающей ТЕМ-волны к нанолентам на частоте $f = 28.7$ THz.

прямоугольных нанолент графена на диэлектрической подложке в THz диапазоне частот.

Результаты расчета коэффициента прохождения $|S_{21}|$ ТЕМ-волны через метаповерхность из прямоугольных нанолент графена ($a = 2 \mu\text{m}$, $b = 0.2 \mu\text{m}$, $w = 0.1 \mu\text{m}$, $l/a = 0.9$) на подложке из двуоксида кремния SiO_2 ($h = 0.5 \mu\text{m}$, $\epsilon = 2.2$) (рис. 1) от частоты при различных значениях угла φ ориентации вектора \mathbf{E} падающей ТЕМ-волны к нанолентам графена для значения химического потенциала $\mu_c = 0.57$ eV в диапазоне частот 24–32 THz показаны на рис. 2, а.

При изменении угла от $\varphi = 0^\circ$ (вектор \mathbf{E} ТЕМ-волны параллелен нанолентам графена) до $\varphi = 90^\circ$ (вектор \mathbf{E} ТЕМ-волны перпендикулярен нанолентам графена) коэффициент прохождения $|S_{21}|$ существенно уменьшается. При $\varphi = 90^\circ$ значение коэффициента прохождения $|S_{21}|$ через структуру близко к единице (наблюдается практически полное прохождение волны через графено-

вую метаповерхность). При $\varphi = 0^\circ$ значение коэффициента прохождения $|S_{21}|$ минимальное (–22 дБ) на частоте 28.3 THz (при $\mu_c = 0.57$ eV).

Минимумы коэффициента прохождения $|S_{21}|$ расположены на характерных частотах, обусловленных плазмонным резонансом фундаментальной моды [26] в графеновых нанолентах конечной длины. При $\varphi = 90^\circ$ частота плазмонного резонанса (для данных геометрических размеров нанолент графена и периода структуры при значении химического потенциала $\mu_c = 0.57$ eV) равна $f = 28.7$ THz (рис. 2, а). При изменении угла φ от 0° до 90° наблюдается уменьшение значения минимума $|S_{21}|$ и некоторое смещение его положения в сторону более высоких частот (рис. 2, а).

Расчетные поляризационные характеристики — зависимости модуля коэффициента прохождения $|S_{21}|$ ТЕМ-волны через графеновую метаповерхность (рис. 1) от угла φ ориентации вектора \mathbf{E} падающей ТЕМ-волны

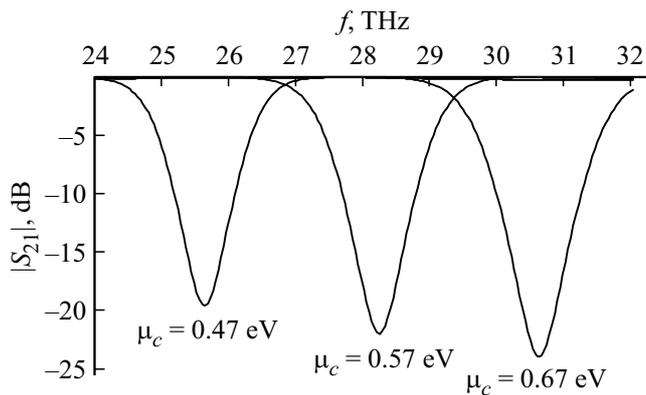


Рис. 3. Частотные зависимости модуля коэффициента прохождения $|S_{21}|$ ТЕМ-волны через метаповерхность из прямоугольных нанолент графена при изменении химического потенциала μ_c . $\varphi = 90^\circ$.

к нанолентам графена на частоте $f = 28.7$ THz для $\mu_c = 0.57$ eV показаны в полярной системе координат на рис. 2, *b*.

Результаты расчета — зависимости модуля коэффициента прохождения $|S_{21}|$ ТЕМ-волны через графеновую метаповерхность от частоты при $\varphi = 90^\circ$ для различных значений химического потенциала μ_c (0.47–0.67 eV) показаны на рис. 3. Параметры и геометрические размеры 2D-решетки и нанолент те же, что и на рис. 2, *b*. При увеличении значения химического потенциала μ_c положение минимума коэффициента прохождения смещается в сторону более высоких частот. Рабочая частота поляризатора, определяемая положением и значением минимума коэффициента прохождения, управляется изменением значения химического потенциала (величиной внешнего постоянного электрического поля) в широком

интервале THz частот и зависит от соотношения геометрических размеров нанолент и решетки.

3. Результаты моделирования THz поглотителей на основе 2D-решеток из графеновых полосок на многослойных подложках, содержащих графеновые и диэлектрические слои

Проведено моделирование дифракции двумя методами — методом приближенных граничных условий (ПГУ) и методом ОИУ. На основе проведенного моделирования построены частотные характеристики коэффициентов отражения $R = |S_{11}|^2$, прохождения $T = |S_{21}|^2$ и потерь $P = 1 - R - T$ при различных изменениях параметров. Результаты расчетов двумя методами совпали, что подтверждает справедливость введения эквивалентной „диэлектрической“ проницаемости графена.

Результаты электродинамического расчета частотных зависимостей параметров поглотителей на основе 2D-решеток из графеновых полосок представлены на рис. 4–8. Расчет проведен при нормальном падении волны ($\theta = 0$, рис. 1, *b*), кроме рис. 7.

Структура семислойного поглотителя (снизу вверх) приведена на рис. 4, *a*: 1 — подложка $n = 1.45$; 2 — графеновый слой; 3 — диэлектрический слой толщиной h_d и показателем преломления n_d ; 4 — графеновый слой; 5 — такой же диэлектрический слой h_d , n_d ; 6 — 2d-решетка из графеновых прямоугольных нанолент; 7 — воздух. Там же изображены его характеристики. При увеличении количества графеновых и диэлектрических слоев резонансная частота не меняется, коэффициент поглощения, естественно, растет (рис. 4, *b*).

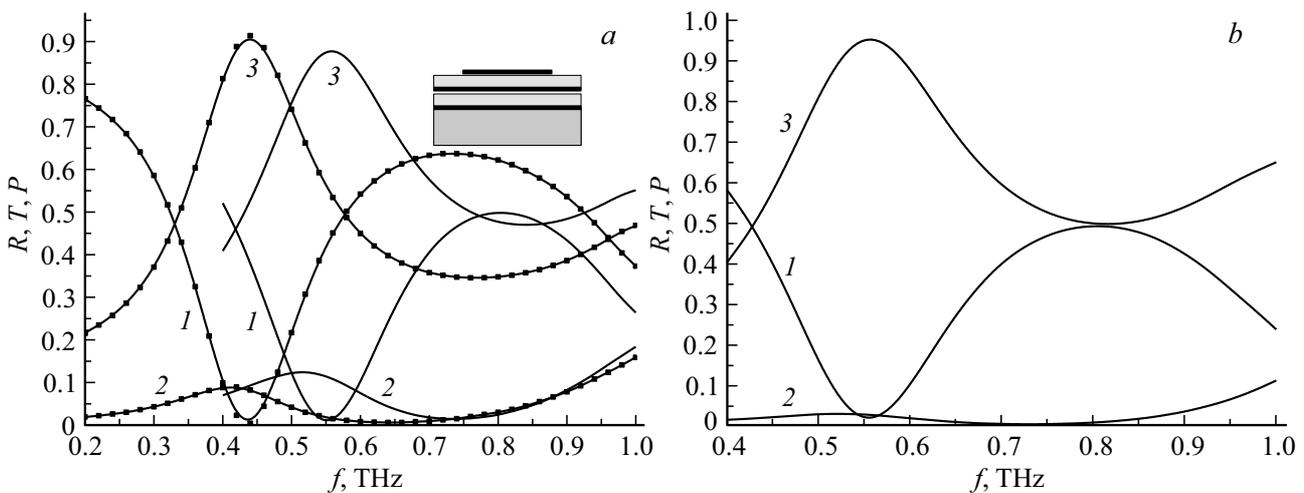


Рис. 4. Характеристики семислойного (*a*) и девятислойного (*b*) поглотителя на основе 2D-решетки из квадратных графеновых полосок при нормальном падении. Кривые 1 — R , 2 — T , 3 — P . $a = b = 70 \mu\text{m}$. $h_d = 25 \mu\text{m}$, $n_d = 1.77$. Параметры графена $T = 300$ K, $\mu_c = 0.25$ eV, $\tau = 1$ ps. Линии с символами — размеры полосок $w = l = 60 \mu\text{m}$, без символов $w = l = 50 \mu\text{m}$.

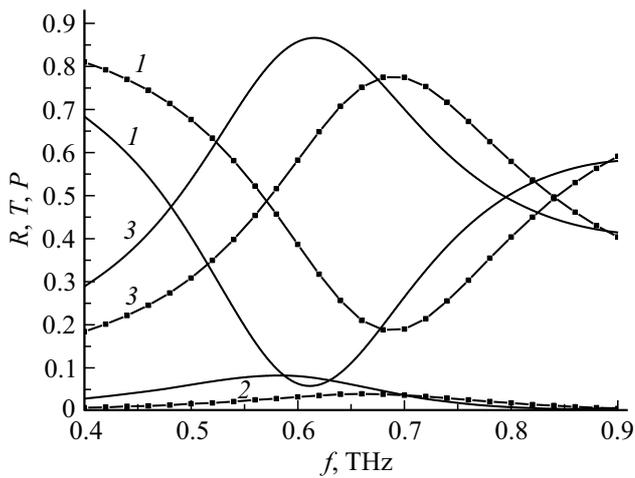


Рис. 5. Характеристики поглотителя на основе 2D-решетки при нормальном падении. $w = l = 50 \mu\text{m}$, остальные параметры как на рис. 4. Линии с символами — $\mu_c = 0.55 \text{ eV}$, без символов $\mu_c = 0.35 \text{ eV}$.

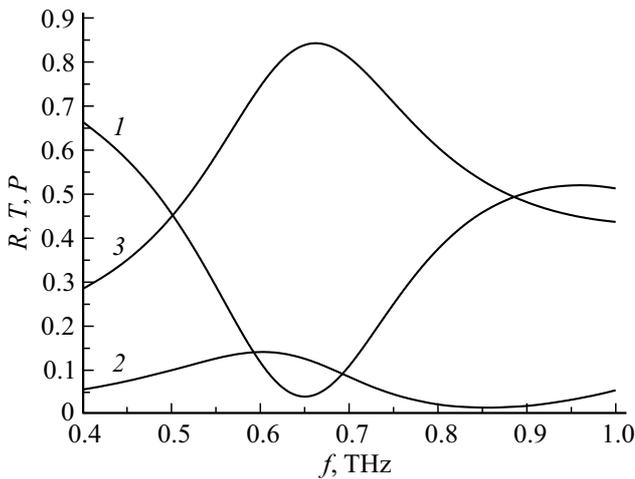


Рис. 6. Характеристики поглотителя на основе 2D-решетки при нормальном падении. $n_d = 1.45$, остальные параметры как на рис. 4.

Как показывает более детальное моделирование, толщины диэлектрических слоев h_d и их показатель преломления n_d влияют как на согласование, так и на положение резонанса. Они выбраны из условий минимума коэффициента отражения и максимума потерь. Небольшое изменение h_d на $\pm 5 \mu\text{m}$ приводит к изменению резонансной частоты на $\approx \pm 0.3 \text{ THz}$.

Максимум поглощения обусловлен резонансом фундаментальной моды поверхностного ППП, распространяющегося в нанолентах графена конечной длины на границе графеновых нанолент с диэлектриком. Поэтому резонансная частота зависит как от размера полосок (рис. 4), так и от параметров графена (рис. 4, 5) и диэлектрика, на котором лежат полоски (рис. 6). С уменьшением показателя преломления диэлектриче-

ского слоя n_d и увеличением μ_c уменьшается длина волны ППП, поэтому резонансная частота растет (рис. 5, 6). Существует оптимальный μ_c , при котором наблюдается максимум поглощения.

Длина волны ППП много меньше длины волны в вакууме λ . Поэтому резонансный размер графеновых полосок порядка 0.1λ . Толщина диэлектрических слоев приблизительно 0.05λ .

Эффект резонансного поглощения наблюдается в достаточно широком диапазоне углов падения θ . Для примера на рис. 7 приведены характеристики решетки из квадратных графеновых полосок при $\theta = 30^\circ$. Следует отметить, что эффект наблюдается для обеих поляризаций падающей волны — (p -поляризация — $H_\uparrow = 0$, s -поляризация — $E_\uparrow = 0$, символ „ \uparrow “ означает компоненту

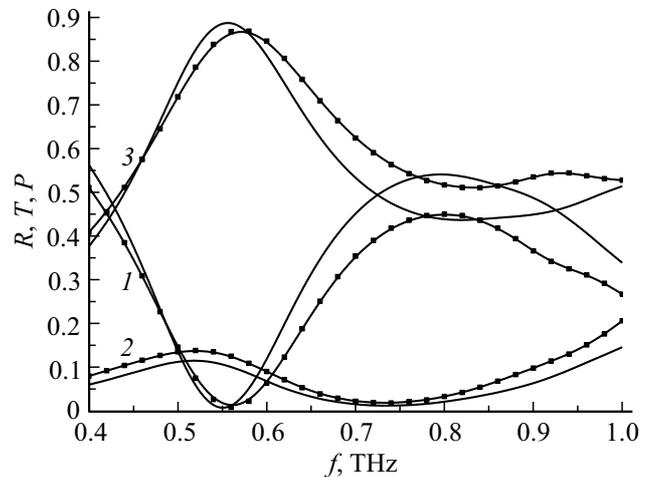


Рис. 7. Характеристики поглотителя на основе 2D-решетки при угле падения 30° , остальные параметры как на рис. 4. Линии с символами — p -поляризация, без символов — s -поляризация падающей волны.

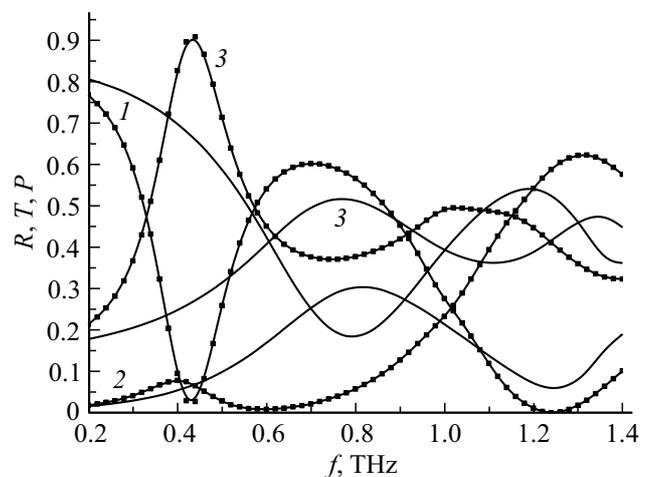


Рис. 8. Характеристики 2D-решетки из прямоугольных графеновых полосок при нормальном падении. $w = 60 \mu\text{m}$, $l = 20 \mu\text{m}$, $a = 70 \mu\text{m}$, $b = 30 \mu\text{m}$. Остальные параметры как на рис. 5. Обозначения кривых как на рис. 7.

поля, перпендикулярную плоскости падения). Причем резонансная частота слабо зависит от поляризации.

На рис. 8 представлены результаты расчетов поглотителя из прямоугольных полосок. В случае p -поляризации вектор электрического поля падающей волны параллелен широкой стороне нанолент графена ($\varphi = 0$ (см. рис. 1, b)). Резонансная частота фундаментальной моды ППП определяется в первую очередь длиной наноленты. Поэтому резонансная частота меньше, а потери больше, чем при падении s -поляризованной волны, у которой вектор электрического поля параллелен узкой стороне нанолент ($\varphi = 90^\circ$ (см. рис. 1, b)).

Заключение

Из результатов математического моделирования следует, что при изменении ориентации вектора электрического поля падающей ТЕМ-волны от параллельной до перпендикулярной нанолентам графена коэффициент прохождения существенно уменьшается, и в полосе непропускания на резонансной THz частоте метаповерхность из прямоугольных нанолент графена является поляризатором. Изменение значения химического потенциала (действием внешнего электрического поля) является способом эффективного управления характеристиками поляризаторов THz диапазона на основе нанолент графена конечной длины.

Как показывают результаты моделирования, метаповерхность из квадратных графеновых полосок на многослойной подложке, содержащей графеновые и диэлектрические слои, является эффективным поглотителем в THz диапазоне частот, который поглощает почти 100% падающей на нее энергии при резонансе ППП. Рабочая частота THz поглотителя — резонансная частота ППП — зависит как от размера полосок, так и от параметров графена и диэлектрика. В случае 2D-решетки из квадратных графеновых полосок эффект резонансного поглощения наблюдается в достаточно широком диапазоне углов падения ТЕМ-волны. Возможно управление характеристиками THz поглотителей как пассивное — изменением размеров решетки и диэлектрических слоев, так и активное — изменением значения химического потенциала μ_c (величиной внешнего постоянного электрического поля) в широком интервале THz частот.

Результаты электродинамического расчета могут быть использованы для создания устройств THz диапазона на основе метаповерхностей с элементами в виде микро- и нанолент графена конечной длины: быстро перестраиваемых высокоскоростных поляризаторов и поглотителей с управляемой электрическим полем частотой, которые в перспективе будут работать и в ближнем ИК диапазоне.

Работа выполнена в рамках реализации базовой части госзадания, проект 3.5398.2017/8.9.

Список литературы

- [1] Chen P.-Y., Soric J., Padooru Y.R., Bernety H.M., Yakovlev A. et al. // *New J. of Physics*. 2013. V. 15. P. 123029.
- [2] Fallahi J. Perruisseau-Carrier. // *Phys. Rev. B*. 2012. V. 86. P. 195408.
- [3] Zhang Y., Feng Y., Zhu B., Zhao J., Jiang T. // *Optics Express*. 2014. V. 22. P. 22743.
- [4] Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Артюх А.А. // *Усп. хим.* 2014. Т. 83. В. 3. С. 251–279.
- [5] Yao G., Ling F., Yue J., Luo C., Ji J., Ya J. // *Optics Express*. 2016. V. 24. P. 1518.
- [6] He X., Yao Y., Zhu Z., Chen M., Zhu L., Yang W., Yang Y., Wu F., Jiang J. // *Optical Materials Express*. 2018. V. 8. P. 1031.
- [7] Xu Z., Wu D., Liu Y., Liu C., Yu Z., Yu L., Ye H. // *Nanoscale Res. Lett.* 2018. V. 13. P. 143.
- [8] Chen D., Yang J., Zhang J., Huang J., Zhang Z. // *Scientific Reports*. 2017. V. 7. P. 15836.
- [9] Huidobro P.A., Maier S.A., Pendry J.B. // *EPJ Appl. Metamat.* 2017. V. 4. P. 6.
- [10] Mou N., Sun S., Dong H., Dong S., He Q., Zhou L., Zhang L. // *Optics Express*. 2018. V. 26. P. 11728–11736.
- [11] Cen C., Chen J., Lin H., Liang C., Huang J., Chen X., Tang Y., Yi Z., Xu X. arXiv preprint arXiv:1802.10285, 2018.
- [12] Chen J., Zeng Y., Xu X., Chen X., Zhou Z., Shi P., Yi Z., Ye X., Xiao S., Yi Y. // *Nanomaterials*. 2017. V. 8. P. 175.
- [13] Cui Y., He Y., Jin Y., Ding F., Yang L., Ye Y., Zhong S., Yin Yue Lin Y., He S. // *Laser Photonics Rev.* 2014. V. 8. N 4. P. 495.
- [14] Лерер А.М., Цветянский Е.А. // *Письма в ЖТФ*. 2012. Т. 38. В. 21. С. 77–81.
- [15] Лерер А.М., Иванова И.Н., Клеценков А.Б., Махно В.В., Махно П.В., Тимошенко П.Е. // *Физические основы приборостроения*. 2016. Т. 5. № 5(22). С. 90–98.
- [16] Кайдашев Е.М., Лерер А.М., Головачева Е.В., Кайдашев В.Е., Лянгузов Н.В., Цветянский Е.А. // *РЭ*. 2017. Т. 62. № 12. С. 1173–1181. doi 10.7868/S0033849417110055.
- [17] Hanson G.W. // *J. of Appl. Phys.* 2008. V. 103. P. 064302.
- [18] Никольский В.В. Декомпозиционный подход к задачам электродинамики. М: Наука, 1983. 297 с.
- [19] Голованов О.А. // *РЭ*. 2006. Т. 51. № 12. С. 1423–1430.
- [20] Голованов О.А., Макеева Г.С., Ринкевич А.Б. // *ЖТФ*. 2016. Т. 86. В. 2. С. 119–126.
- [21] Лерер А.М., Иванова И.Н. // *РЭ*. 2016. Т. 61. № 5. С. 435–441. doi 10.7868/S0033849416050089
- [22] Лерер А.М. // *РЭ*. 2012. Т. 57. № 11. С. 1160–1169.
- [23] Кайдашев Е.М., Лянгузов Н.В., Лерер А.М., Распопова Е.А. // *Письма в ЖТФ*. 2014. Т. 40. В. 7. С. 79–86.
- [24] Lerer A.M., Donets I.V., Kalinchenko G.A., Makhno P.V. // *Photon. Res.* 2014. V. 2. N 1. P. 31–37. doi org/10.1364/prj.2.000031
- [25] Вайнштейн Л.А. Теория дифракции и метод факторизации. М.: Сов. Радио, 1966. 431 с.
- [26] Gao W., Shu J., Qiu C., Xu Q. // *ACS Nano*. 2012. V. 6. N 9. P. 7806.