

## Расчет электродинамических характеристик графеновых решеток

*Е.В. Головачева<sup>1</sup>, Е.И. Грибникова<sup>1</sup>, А.М. Лерер<sup>1</sup>, Г.И. Приходько<sup>1</sup>,*

*А.А. Ячменов<sup>2</sup>*

*<sup>1</sup>Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону*

*<sup>2</sup>Ростовский государственный университет путей сообщения, Ростов-на-Дону*

**Аннотация:** Дифракционные характеристики решеток рассчитаны двумя методами – методом приближенных граничных условий и строгим методом, основанным на численно-аналитическом решении двумерного интегродифференциального уравнения. Представлены результаты расчетов графеновых дифракционных решеток.

**Ключевые слова:** графен, графеновые решетки, объемные интегральные уравнения, плазмоны, коэффициент отражения.

С момента своего открытия в 2004 году графен привлек огромное внимание благодаря его устойчивым тепловым и механическим свойствам и определенным электронным свойствам, таким как высокая подвижность носителей заряда, квантовый эффект Холла, большая оптическая прозрачность и др. [1]. Уникальные особенности оптической проводимости однослойного графена широко изучались в последние несколько лет как теоретически [2], так и экспериментально [3], в том числе в терагерцовом (ТГц) диапазоне [4] частот. На сегодняшний день графен считается одним из наиболее перспективных материалов для следующего поколения микро- и нанoeлектронных устройств [1], [3], [5], а также для солнечных элементов и гибких плоских дисплеев [6]. В графене возможно существование плазмонного резонанса безмассовых фермионов Дирака. В настоящее время графеновые плазмоны стали предметом интенсивных исследований с применения их в ТГц и ИК перестраиваемых и переключаемых метаматериалов [7], фильтров и широкополосных поляризаторов [8], наноантенн [9] и оптоэлектронных устройств [10], дифракционных решеток [11].

При расчете радиофизических характеристик используются приближенные граничные условия (ПГУ) [12], которые в большинстве

случаев являются аппроксимацией формулы Кубо [13]. В работе [14] предложен метод и разработан алгоритм расчета многоэлементных и многослойных дифракционных решеток, содержащих как диэлектрические, так и плазмонные слои. Плазмонные слои описываются комплексной диэлектрической проницаемостью. В основе предложенного метода расчета – метод объемных интегральных уравнений (ОИУ) для диэлектрических структур. Этот метод и программу можно модифицировать для расчета графеновых слоев. Для этого вводится эффективная диэлектрическая проницаемость графена, представленная в данной работе.

**Цель работы** – расчет электродинамических характеристик графеновых дифракционных решеток методом объемного интегрального уравнения и методом приближенных граничных условий, сопоставление двух методов расчета, теоретическое исследование плазмонных резонансов, сопоставление теоретических результатов расчета с приведенными в литературе результатами.

В работе бесконечно тонкий слой графена, на котором выполняются импедансные граничные условия [15], заменяется тонким слоем диэлектрика, диэлектрическая проницаемость которого определяется следующим образом.

Используем ПГУ  $\vec{E}_{tg} = \frac{1}{\sigma} \vec{j} = -i \frac{Z_0}{k(\varepsilon - 1)t} \vec{j}$ , где  $\sigma$ ,  $t$  - проводимость и

толщина слоя графена соответственно. Первая часть ПГУ для графена, вторая для тонкого слоя диэлектрика. Отсюда находим диэлектрическую проницаемость графена  $\varepsilon = 1 - i \frac{Z_0 \sigma}{k t} = 1 - \frac{Z_0 (i \sigma' + \sigma'')}{k t}$ . В приведенных формулах фигурирует параметр  $t$  - толщина графена, при этом  $t \ll \lambda$ . Для графена в диапазоне 1 - 100 ТГц,  $\sigma'' > 0$   $\sigma' \ll \sigma''$ , поэтому  $\text{Re } \varepsilon < 0$ . Таким образом, условие существования поверхностного плазмона выполняется.

Подробное описание метода ОИУ представлено в [16].

Рассмотрим основные положения метода ПГУ. Пусть на многослойную подложку (подложка может содержать как диэлектрические, так и плазмонные слои) нанесена периодическая система (период  $d$ ) графеновых лент шириной  $2l$ , которые параллельные оси  $z$ , лежат в плоскости  $y = 0$ . Рассмотрим дифракцию  $H$  - поляризованной волны единичной амплитуды. На полосках выполняются граничные условия  $E_x(x, +0) = E_x(x, -0)$ ,  $E_x(x, 0) + E_x^{ext}(x, 0) = \rho j_x(x)$ , где  $j_x(x)$  - поверхностная плотность тока. С помощью разложения полей в ряд Флоке, использования граничных условий на границах диэлектрических слоев и на графеновых полосках, можно получить парные суммарные уравнения (ПСУ). Для решения ПСУ предложено использовать метод Галеркина с базисом в виде полиномов Гегенбауэра  $j_x(x) = \sum_{m=0}^{\infty} X_m b_m C_m^{3/2}(x/l)(l^2 - x^2)$ , где  $b_m = i^m / [l^3 \sqrt{2\pi}(m+2)(m+1)]$ ,  $X_m$  - неизвестные коэффициенты. В результате получим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Для нахождения этих интегралов используем равенство Парсевалея. Решение СЛАУ позволяет определить коэффициенты отражения  $R_p$  и прохождения  $T_p$  распространяющихся пространственных гармоник.

Решетка была представлена в виде периодической системы графеновых полосок в вакууме (воздухе) и системы периодических вырезов в графеновом слое. Результаты совпали для всех методов расчета: методом ОДУ и методом граничных условий. Кроме того, полученные результаты сравнивались с ранее полученными результатами [17]. В [17] резонансная частота коэффициентов отражения и поглощения 1,7 ТГц для одних и тех же условий расчета и наблюдения при  $\mu = 0.39$  эВ и  $T = 300$  К и ширине полосок 40 мкм совпала с резонансной частотой рассчитанной представленным методом.

На рис. 1 изображены амплитудно-частотные характеристики графеновой решетки, расположенной на полубесконечной подложке с

показателем преломления  $n_s$ . Видно, что уменьшение времени релаксации  $\tau$  приводит к увеличению значения коэффициента отражения  $R$  (соответственно, уменьшению  $T$ ) в частотном диапазоне вблизи резонанса. Частоты резонанса не меняются.

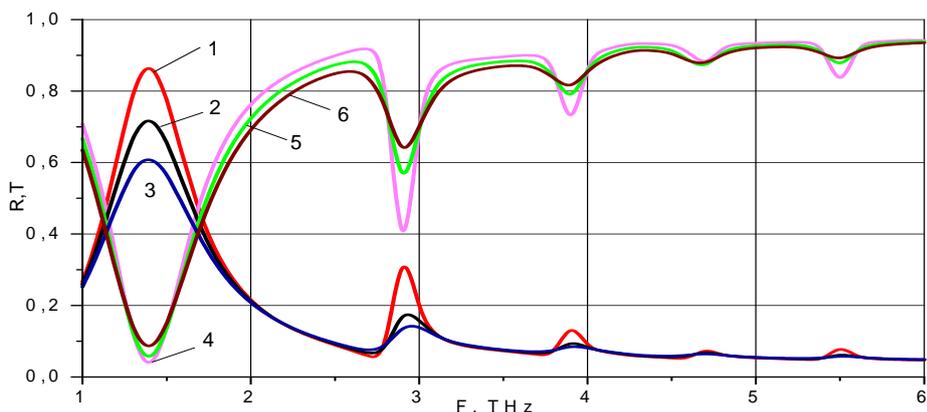


Рис.1. - Зависимость коэффициентов отражения  $R$  и прохождения  $T$  от частоты: ширина полоски 40 мкм, период 70 мкм,  $n_s = 1,45$ . Параметры графена:  $\mu = 0,39$  эВ,  $T = 300$  К. 1 –  $R$  при  $\tau = 0,25$  пс; 2 –  $R$  при  $\tau = 0,75$  пс; 3 –  $R$  при  $\tau = 1,25$  пс; 4 –  $T$  при  $\tau = 0,25$  пс; 5 –  $T$  при  $\tau = 0,75$  пс, 6 –  $T$  при  $\tau = 1,25$  пс.

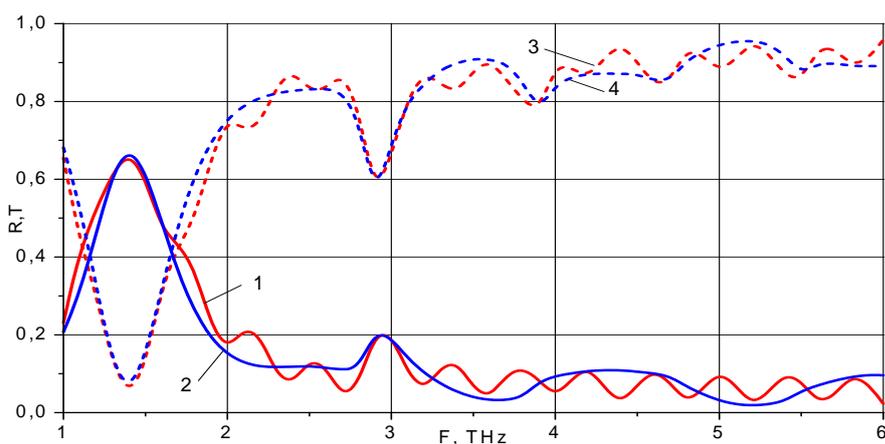


Рис.2. - Зависимость коэффициентов отражения  $R$  и прохождения  $T$  от частоты: ширина полоски 40 мкм, период 70 мкм,  $n_3 = 1,45$ ,  $n_s = 1,77$ .

Параметры графена:  $\tau=1$  пс,  $\mu=0,39$  эВ,  $T=300$  К. 1 –  $R$  при  $h(n_3) = 250$  мкм; 2 –  $R$  при  $h(n_3) = 2000$  мкм; 3 –  $T$  при  $h(n_3) = 250$  мкм; 4 –  $T$  при  $h(n_3) = 2000$  мкм.

На рис. 2 изображены АЧХ графеновой решетки, расположенной на двухслойной подложке. Верхний слой подложки толщиной  $h$  и показателем преломления  $n_3$ , нижний слой – полубесконечная подложка с показателем преломления  $n_s$ . Видно, что увеличение  $h$  приводит к «сглаживанию» графиков зависимостей  $R$  и  $T$ .

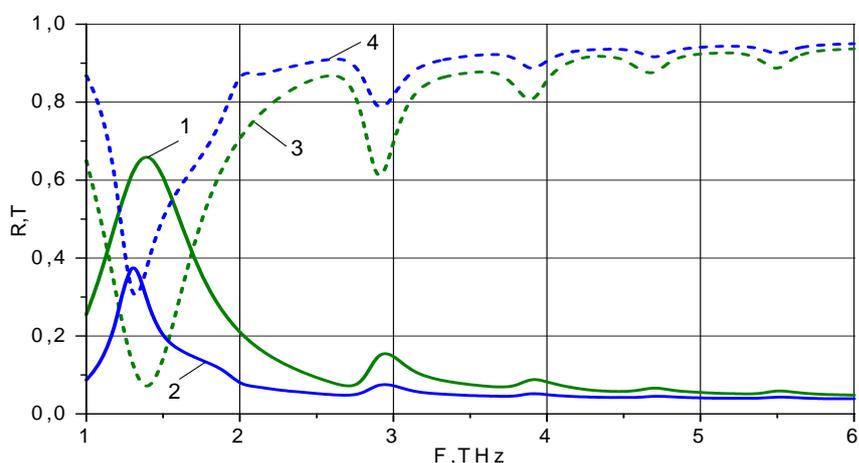


Рис. 3. - Зависимость коэффициентов отражения  $R$  и прохождения  $T$  от частоты: ширина полосы 40 мкм,  $n_s = 1,45$ . Параметры графена:  $\tau=1$  пс,  $\mu=0,39$  эВ,  $T=300$  К. 1 –  $R$  при периоде = 70 мкм; 2 –  $R$  при периоде = 150 мкм; 3 –  $T$  периоде = 70 мкм; 4 –  $T$  при периоде = 150 мкм.

На рис. 3 изображены АЧХ графеновой решетки, расположенной на полубесконечной подложке с показателем преломления  $n_s$ . Видно, что увеличение периода решетки приводит к уменьшению значения коэффициента отражения  $R$  без смещения резонансов по частоте.

### Выводы:

Результаты расчетов на основе метода объемных интегральных

уравнений дифракционных решеток с использованием графена различных тестовых задач показали успешность проведенных вычислений. Проведение расчетов параметров структур, ранее полученные с использованием других методов, подтверждает справедливость введения эффективной диэлектрической проницаемости графена. Показано, что увеличение периода решетки приводит к уменьшению значения коэффициента отражения  $R$  без смещения резонансов по частоте. Увеличение показателя преломления подложки, на которой расположена графеновая решетка, приводит к смещению резонансов в более низкочастотную область. А увеличение химического потенциала  $\mu$  приводит к смещению резонансов в более высокочастотную область.

### Литература

1. Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S. and Geim A. K. 2009 Rev. Mod. Phys. 81, pp. 109-162.
2. Falkovsky L. A. and Pershoguba S. S. 2007 Phys. Rev. B 76, 153410 (4p).
3. Stauber T., Peres N. M. R. and Castro Neto A. H. 2008 Phys. Rev. B 78, 085432 (8p).
4. Gusynin V. P., Sharapov S. G. and Carbotte J. P. 2009 New J. Phys. 11, 095013 (17p).
5. Лерер А.М., Головачева Е.В., Грибникова Е.И., Иванова И.Н., Клещенков А.Б. Неотражающие оптические решетки на новых плазмонных материалах // Инженерный вестник Дона, 2016, №2 URL: [ivdon.ru/magazine/archive/n2y2016/3608](http://ivdon.ru/magazine/archive/n2y2016/3608).
6. Wang X., Zhi L. and Mullen K. 2008 Nano Lett. 8, pp. 323–327.
7. Фиговский О. Л., Нанотехнологии для новых материалов // Инженерный вестник Дона, 2012, №3 URL: [ivdon.ru/magazine/archive/n3y2012/1048](http://ivdon.ru/magazine/archive/n3y2012/1048).

8. Bao Q., Zhang H., Wang B., Ni Z., Haley C., Lim Y. X., Wang Y., Tang D. Y. and Loh K. P. 2011 Nature Photon. 5, pp. 411–415.

9. Carrasco E. and Perruisseau-Carrier J. 2013 IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett. 12, pp. 253–256.

10. Liu M., Yin X. B., Ulin-Avila E., Geng B. S., Zentgraf T., Ju L., Wang F. and Zhang X. 2011 Nature 474, pp. 64-67.

11. T.M. Slipchenko, M.L. Nesterov, L. Martin-Moreno and A.Yu. Nikitin. Journal of Optics 15 (11), July 2013. 114008 (20p).

12. Головачева Е.В., Лерер А.М., Иванова И.Н. Применение метода приближенных граничных условий для расчета дифракции двумерной решетки в оптическом диапазоне / Научный альманах. – 2015. – N 11-4(13). – С. 257–260.

13. R.J. Kubo. Phys. Soc. Jap. 12, 6, 1957, pp. 570-586.

14. И.Н. Иванова, Электродинамический анализ периодических наноплазмонных структур: дис. канд. физ.-мат. наук. Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, 2016. – 150 с.

15. X. Luo, T. Qiu, W. Lu, Z. Ni, “Plasmons in graphene: Recent progress and applications”, Materials Science and Engineering: R: Reports. 2013, vol. 74, no 11, pp. 351–376.

16. A. M. Lerer, “Theoretical Investigation of 2D Periodic Nanoplasmon Structures”, Journal of Communications Technology and Electronics, 2012, vol. 57, no. 11, pp. 1151–1159.

17. T. L. Zinenko J. Opt. 17 (2015), 055604 (8p).

### References

1. Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R., Novoselov K. S. and Geim A. K. 2009 Rev. Mod. Phys. 81, pp. 109-162.

2. Falkovsky L. A. and Pershoguba S. S. 2007 Phys. Rev. B 76, 153410 (4p).



3. Stauber T., Peres N. M. R. and Castro Neto A. H. 2008 Phys. Rev. B 78, 085418 (8p).
  4. Gusynin V. P., Sharapov S. G. and Carbotte J. P. 2009 New J. Phys. 11, 095013 (17p).
  5. A. M. Lerer, E.V. Golovacheva, E.I. Gribnikova, I.N. Ivanova, A.B. Kleshchenkov. Inzhenernyj vestnik Dona (Rus), 2016, №2. URL: [ivdon.ru/magazine/archive/n2y2016/3608](http://ivdon.ru/magazine/archive/n2y2016/3608).
  6. Wang X., Zhi L. and Mullen K. 2008 Nano Lett. 8, pp. 323-327.
  7. O.L. Figovskij. Inzhenernyj vestnik Dona (Rus), 2012, №3. URL: [ivdon.ru/magazine/archive/n3y2012/1048](http://ivdon.ru/magazine/archive/n3y2012/1048).
  8. Bao Q., Zhang H., Wang B., Ni Z., Haley C., Lim Y. X., Wang Y., Tang D. Y. and Loh K. P. 2011 Nature Photon. 5, pp. 411-415.
  9. Carrasco E. and Perruisseau-Carrier J. 2013 IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett. 12, pp. 253-256.
  10. Liu M., Yin X. B., Ulin-Avila E., Geng B. S., Zentgraf T., Ju L., Wang F. and Zhang X. 2011 Nature 474, pp. 64-67.
  11. T.M. Slipchenko, M.L. Nesterov, L. Martin-Moreno and A.Yu. Nikitin. Journal of Optics 15 (11), July 2013. 114008 (20p).
  12. Golovacheva E.V., Lerer A.M., Ivanova I.N. Nauchnyj al'manah. 2015. N 11-4(13). Pp. 257-260.
  13. R.J. Kubo. Phys. Soc. Jap. 12, 6, 1957, pp. 570-586.
  14. I.N. Ivanova, Dis. kand. fiz.-mat. nauk. Juzhnyj federal'nyj universitet, Rostov-na-Donu, 2016. 150 p.
  15. X. Luo, T. Qiu, W. Lu, Z. Ni, Materials Science and Engineering: R: Reports. 2013, vol. 74, no 11, pp. 351–376.
  16. A. M. Lerer, Journal of Communications Technology and Electronics, 2012, vol. 57, no. 11, pp. 1151–1159.
  17. T. L. Zinenko J. Opt. 17 (2015), 055604 (8p).
-