

## Способы и эффективность управления дисперсией электромагнитных волн в волноведущей структуре «углеродная нанотрубка – графен» в терагерцовом и инфракрасном диапазонах

Г.С. Макеева<sup>1</sup>, О.А. Голованов<sup>2</sup>, Р.А. Горелов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Пензенский государственный университет  
440026, Российская Федерация, г. Пенза  
ул. Красная, 40

<sup>2</sup> Пензенский артиллерийский инженерный институт  
440005, Российская Федерация, Пензенская обл., г. Пенза-5  
ПАИИ

Проведено математическое моделирование распространения электромагнитных волн в волноведущих структурах «углеродная нанотрубка – графен» в терагерцовом, ближнем инфракрасном диапазонах; оно базируется на решении уравнений Максвелла с электродинамическими граничными условиями совместно с материальным уравнением среды (графена, углеродной нанотрубки). Методом автономных блоков с каналами Флоке проведен электродинамический расчет коэффициента замедления и затухания на длине волны основного типа в волноведущих структурах «углеродная нанотрубка – графен» для углеродных нанотрубок с различными радиусами ( $r = 25\text{--}2$  нм) и расстоянием «углеродная нанотрубка – графен» в зависимости от частоты при изменении значений химического потенциала (величины внешнего постоянного электрического поля) в терагерцовом и ближнем инфракрасном диапазонах.

*Ключевые слова:* графен, углеродные нанотрубки, распространение электромагнитных волн, дисперсия, химический потенциал, терагерц, инфракрасный диапазон.

### Введение

В начале XXI века начался процесс перехода традиционной (кремниевой) микроэлектроники в наноэлектронику – бурно развивающуюся отрасль, которая будет играть важнейшую роль в развитии новых поколений информационных и телекоммуникационных систем.

Среди наноструктур особый интерес представляют различные аллотропные молекулярные формы углерода, наиболее распространенными из которых являются фуллерены (0D), нанотрубки (1D), графен (2D), графит (3D) и алмаз (3D).

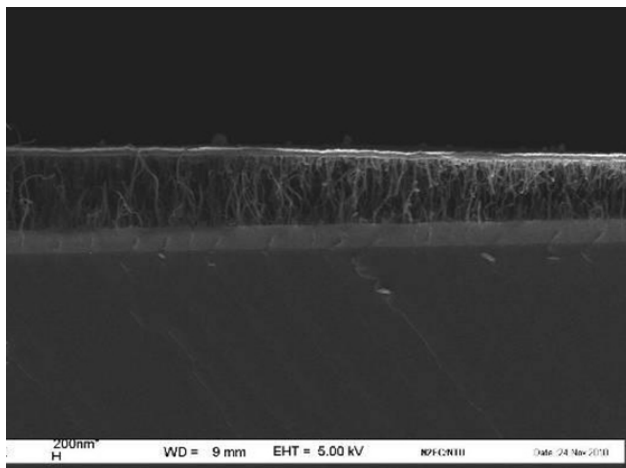
Из всех аллотропных форм углерода наибольший интерес представляют углеродные нанотрубки (УНТ) [1]. Необычные электрические свойства УНТ делают их одним из основных материалов наноэлектроники и микросистемной техники. На основе УНТ принципиально возможно создание электронных устройств нового поколения не только из-за нанометрового (молекулярного) размера, но и благодаря уникальным свойствам УНТ.

В последнее время мгновенно взошедшей звездой на горизонте наноэлектроники стал гра-

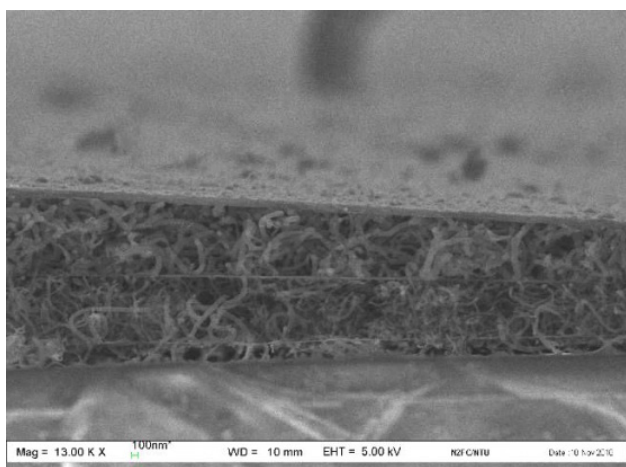
фен, представляющий собой плоский монослой атомов углерода, плотно упакованных в двухмерную (2D) гексагональную решетку и обладающий высокими механической прочностью, теплопроводностью и подвижностью носителей тока при комнатной температуре.

Различные аллотропные формы углерода рассматриваются как наиболее многообещающая альтернатива для замены ряда материалов, используемых в современной микроэлектронике, и, более того, для перехода к углеродной наноэлектронике.

Впервые композитные наноструктуры на основе решеток вертикально ориентированных УНТ и плоских слоев графена, расположенных на решетке УНТ [1], практически были реализованы в [2; 3]. Созданы однослойные наноструктуры (рис. 1) [3] и многослойные наноструктуры (рис. 2) [4], и затем разработаны наноструктуры в виде стейка (рис. 3) [5]. Сканирующий электронный микроскопический анализ позволил установить особенности наноструктурной морфологии «УНТ – графен» (рис. 1–3), в частности, строение внутреннего слоя структуры монослоев графена и его связи с основной решеткой УНТ.



а)



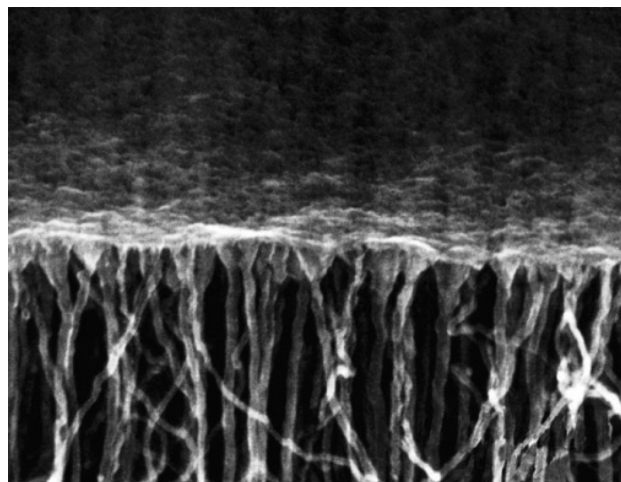
б)

**Рис. 1.** Изображение в сканирующем электронном микроскопе наноструктур «УНТ – плоские слои графена»: а) однослойная наноструктура «УНТ – монослой графена», сформированная на подложке Si / SiO<sub>2</sub> [4]; б) трехслойная наноструктура «УНТ – графен» [5]

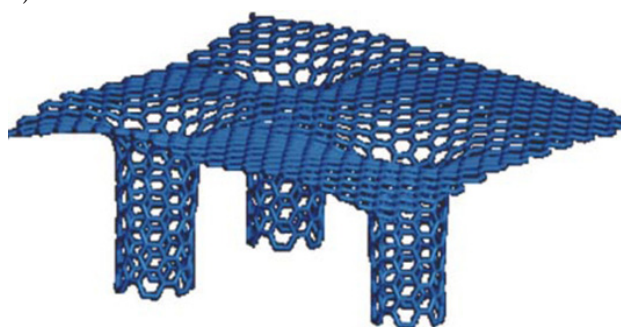
Наноконпозиты на основе углеродных наноструктур, состоящих из набора вертикально ориентированных УНТ и монослоев графена, расположенных в верхней части решетки (рис. 3), были получены методом химического осаждения газа с использованием высокотемпературного каталитического пиролиза смеси ксилол-ферроцен [6].

В синтезированной структуре (рис. 4) в 2D-плоскостях, перпендикулярных оси УНТ, практически полностью отсутствует тепло- и электропроводность. Вместе с тем графен обладает тепло- и электропроводностью в плоскости листа. В результате композитная структура имеет электрическую проводимость и тепловое рассеяние во всех направлениях [7].

Как следует из [1–7], наноструктуры на основе решеток вертикально ориентированных УНТ и плоских монослоев графена обладают уникальными электронными, оптическими и



а)



б)

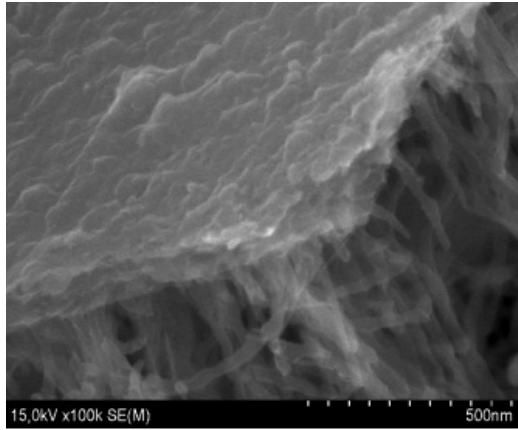
**Рис. 2.** Изображение в сканирующем электронном микроскопе наноконпозита из графеновых листов (вверху) и УНТ (внизу) (а) и модель прикрепления УНТ к графену (б) переход «УНТ – графен» [5]

механическими свойствами для создания линий передачи и устройств на графеновой платформе в терагерцовом (ТГц) и инфракрасном (ИК) диапазонах.

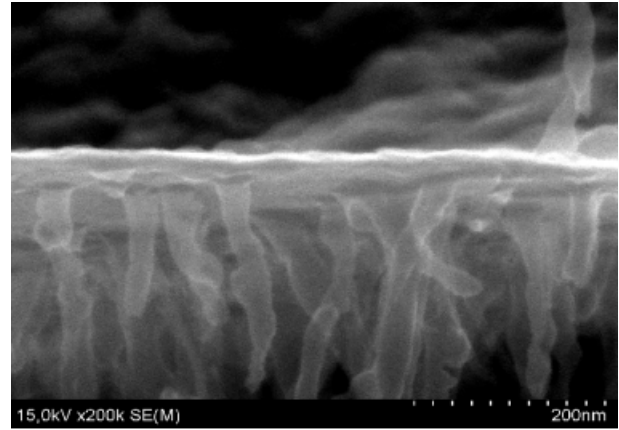
Целью данной работы является исследование способов эффективного управления характеристик электромагнитных волн в электродинамических структурах на основе композитных наноструктур «УНТ – графен» в ТГц и ближнем ИК диапазонах. Математическое моделирование базируется на решении уравнений Максвелла (материальные уравнения среды включают проводимость графена, УНТ) с электродинамическими граничными условиями без упрощения уравнений и граничных условий.

## 1. Математическая модель

Математическая модель распространения, дифракции электромагнитных волн и их взаимодействия с электродинамическими структурами на основе УНТ и графена базируется на решении краевой задачи для системы уравнений Максвелла

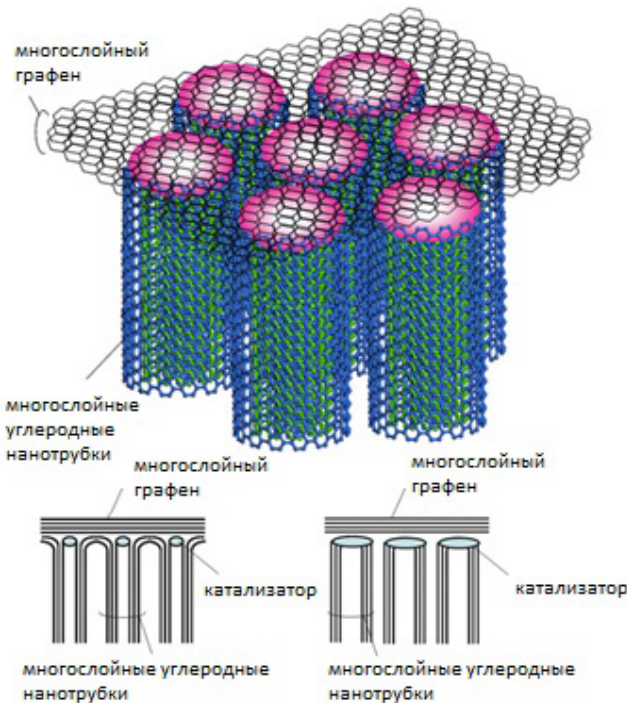


а)



б)

**Рис. 3.** Изображение в сканирующем электронном микроскопе нанокompозита на основе «УНТ – монослой графена»: а) плоский слой графена; б) переход «УНТ – графен» [4]



**Рис. 4.** Структура нанокompозита – УНТ, соединенные с монослоями графена [7]

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H}(t) &= \frac{\partial \vec{D}(t)}{\partial t} + \vec{J}(t), \\ \operatorname{rot} \vec{E}(t) &= -\frac{\partial \vec{B}(t)}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \vec{D}(t) &= \rho, \\ \operatorname{div} \vec{B}(t) &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

совместно с материальными уравнениями среды (графена):

$$\begin{aligned} \vec{D}(t) &= \epsilon_0 \epsilon \vec{E}(t), \\ \vec{B}(t) &= \mu_0 \mu \vec{H}(t), \\ \vec{J}(t) &= \sigma \vec{E}(t) \end{aligned}$$

и дополненной электродинамическими граничными условиями. Здесь  $\vec{E}(t)$ ,  $\vec{H}(t)$  – векторы на-

пряженностей электрического и магнитного полей;  $\vec{D}(t)$ ,  $\vec{B}(t)$  – векторы электрической и магнитной индукций;  $\vec{J}(t)$  – плотность тока;  $\epsilon$ ,  $\mu$  – относительные диэлектрическая и магнитная проницаемости среды;  $\sigma$  – объемная удельная проводимость (электропроводность) среды;  $\rho$  – объемная плотность электрического заряда;  $\epsilon_0$ ,  $\mu_0$  – электрическая и магнитная постоянные.

Монослой графена характеризуется поверхностной проводимостью  $\sigma_s$ , определяемой формулой Кубо [8]:

$$\begin{aligned} \sigma_s(\omega, \mu_c) &= \frac{-ie^2 k_b T}{\pi \hbar^2 (\omega - i2\Gamma)} \times \\ &\times \left( \frac{\mu_c}{k_b T} + 2 \ln \left( \exp \left( \frac{-\mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right) \right) - \\ &- \frac{ie^2 (\omega - i2\Gamma)}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty \left[ \left( \exp \left( \frac{-\xi - \mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right)^{-1} - \right. \\ &\left. - \left( \exp \left( \frac{\xi - \mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right)^{-1} \right] / \\ &/ \left[ (\omega - i2\Gamma)^2 - \left( \frac{2\xi}{\hbar} \right)^2 \right] d\xi, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  к – заряд электрона;  $k_b = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/к – постоянная Больцмана;  $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – постоянная Планка;  $T = 300$  К – температура;  $\Gamma = 10^{12}$  1/с – скорость релаксации;  $\mu_c = 0-1$  эВ – химический потенциал (1 эВ =  $1,602 \cdot 10^{-19}$  Дж);  $\omega = 2\pi f$  – частота.

Углеродные нанотрубки характеризуются поверхностной проводимостью, определяемой формулой [7]:

$$\sigma_{zz}(\omega) = \frac{-i4e^2 V_F}{\pi \hbar r (\omega - i\nu)}. \quad (3)$$

где  $V_F = 3\gamma_0 b \nu / h$ ;  $\gamma_0 = 2,7$  эВ;  $b = 0,142$ ;  $\nu = 6T / r$ ;  $r$  – радиус УНТ.

В уравнения Максвелла (1) входит объемная удельная проводимость  $\sigma$  углеродной наноструктуры (графена, УНТ), которую необходимо выразить через поверхностную проводимость.

Для монослоя графена вводится комплексная диэлектрическая проницаемость [8]:

$$\varepsilon(\omega, \mu_c) = 1 + \frac{i\sigma(\omega, \mu_c)}{\varepsilon_0 \omega d}, \quad (4)$$

где  $d$  – эффективная толщина монослоя графена.

Введем эффективную толщину графена  $d = 1 \cdot 10^{-9}$  м и установим связь между поверхностной  $\sigma_s$  и объемной  $\sigma$  проводимостями:  $\sigma = \sigma_s / d$ .

Установим связь между поверхностной проводимостью  $\sigma_{zz}$  УНТ и объемной удельной проводимостью  $\sigma$ :  $\sigma = \sigma_{zz} / d$ , где  $d$  – толщина стенки УНТ, и введем для УНТ комплексную диэлектрическую проницаемость:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{i\sigma_{zz}(\omega)}{\varepsilon_0 \omega d},$$

где  $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$  ф/м – диэлектрическая постоянная;  $d = 0,5$  нм – толщина стенки УНТ.

Тогда уравнения Максвелла (1) для электродинамических структур на основе графена, УНТ запишутся для гармонических колебаний в виде

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{H} &= i\omega \varepsilon_0 \varepsilon_b(\omega, \mu_c) \vec{E}, \\ \text{rot } \vec{E} &= -i\omega \mu_0 \mu_b \vec{H}. \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\varepsilon = \varepsilon_b$ ,  $\mu = \mu_b$  – диэлектрическая и магнитная проницаемости графена и УНТ, которые считаем скалярными величинами.

## 2. Проводимость углеродных нанотрубок в ТГц и ближнем ИК диапазонах

Для электродинамического расчета линии передачи «УНТ – графен» предварительно рассчитана поверхностная проводимость УНТ по формуле (4). Результаты расчета частотной зависимости действительной и мнимой частей поверхностной проводимости  $\sigma_{zz}$  УНТ при различных радиусах УНТ в СВЧ и ТГц диапазоне приведены на рис. 5.

Результаты расчета частотной зависимости действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости УНТ в ближнем ИК диапазоне приведены на рис. 6.

Результаты расчета частотной зависимости действительной и мнимой частей объем-

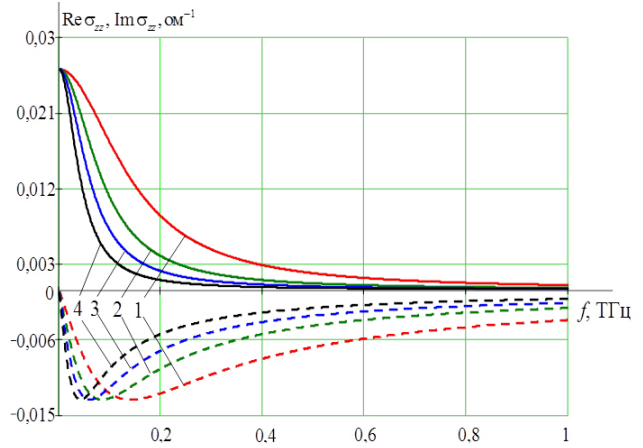


Рис. 5. Частотная зависимость действительной и мнимой частей поверхностной проводимости УНТ  $\sigma_{zz}$  в СВЧ и ТГц диапазоне при различных радиусах УНТ: кривая 1 –  $r = 2,03$  нм, 2 –  $r = 3,39$  нм, 3 –  $r = 4,74$  нм, 4 –  $r = 6,8$  нм; сплошные кривые –  $\text{Re } \sigma_{zz}$ , пунктирные –  $\text{Im } \sigma_{zz}$ .

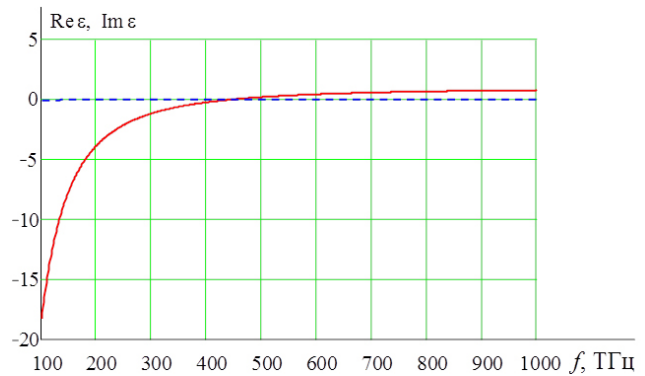
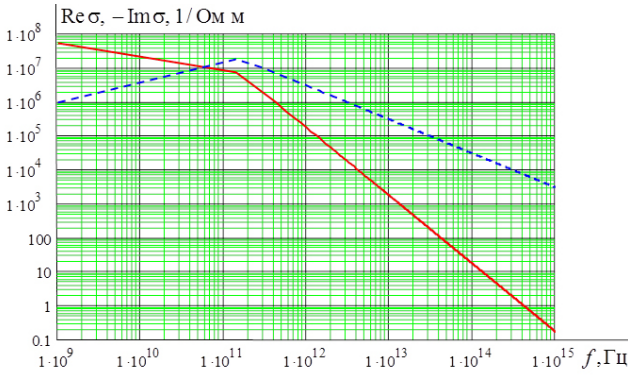


Рис. 6. Частотная зависимость действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости УНТ в ближнем ИК диапазоне:  $r = 1,4$  нм,  $d = 0,5$  нм; сплошная кривая –  $\text{Re } \varepsilon$ , пунктирная –  $\text{Im } \varepsilon$ .

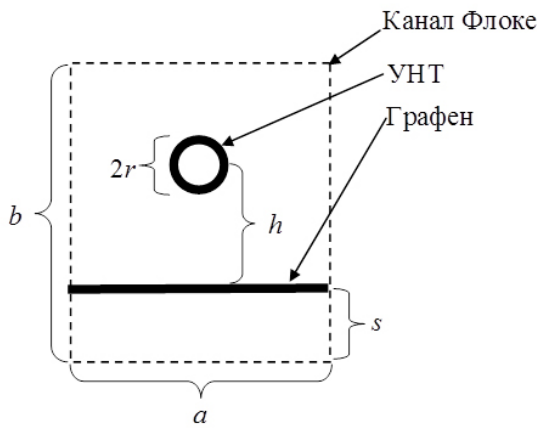
ной удельной проводимости УНТ в СВЧ, ТГц и ближнем ИК диапазонах приведены на рис. 7.

## 3. Результаты электродинамического расчета коэффициента замедления и затухания на длине волны в волноведущих структурах «УНТ – графен» в ТГц и ближнем ИК диапазонах

Вычислительный метод математического моделирования базируется на декомпозиции электродинамических структур на основе графена и УНТ на автономные блоки в виде прямоугольных параллелепипедов, содержащих УНТ, графен, и с виртуальными каналами Флоке на гранях (ФАБ) [9]. Расчетная модель на основе ФАБ линии передачи «УНТ – графен» представлена на рис. 8. В модели учитывается зависимость поверхностной проводимости УНТ от частоты при различных радиусах УНТ.



**Рис. 7.** Частотная зависимость действительной и мнимой частей объемной удельной проводимости УНТ в СВЧ, ТГц и ближнем ИК диапазонах:  $r = 5,0$  нм;  $d = 0,5$  нм; сплошная кривая –  $\text{Re}\sigma$ , пунктирная –  $\text{Im}\sigma$

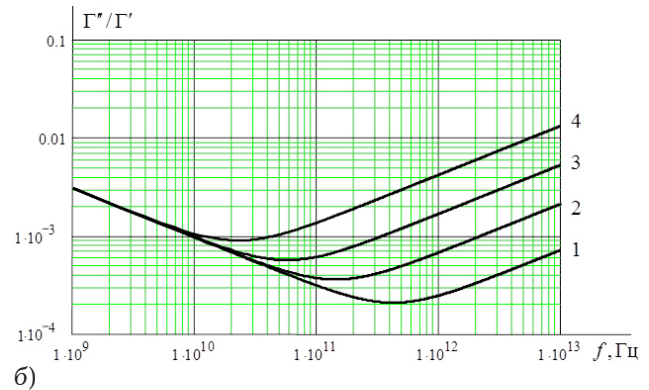
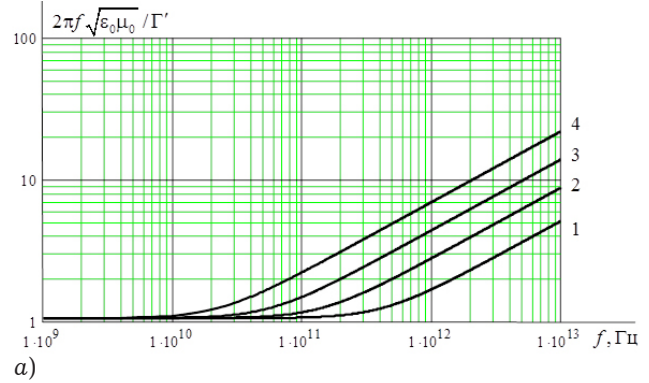


**Рис. 8.** Расчетная модель на основе ФАБ волноведущей структуры «УНТ – графен»:  $a = b$  – размеры канала Флоке;  $2r$  – диаметр УНТ;  $h$  – расстояние между УНТ и моно-слоем графена;  $s$  – толщина диэлектрической подложки

Для построения дескрипторов (матрицы проводимости  $\mathbf{Y}$ ) ФАБ, содержащих УНТ и графен, разработан вычислительный алгоритм решения краевой 3D-задачи дифракции проекционным методом Галеркина [10].

Математическая модель распространения электромагнитных волн в анизотропных наноструктурных материалах на основе графена и УНТ и волноведущих структурах «УНТ – графен» базируется на решении характеристического уравнения для определения постоянных распространения волн, включающего матрицу проводимости  $\mathbf{Y}$  (дескриптор) ФАБ [10].

Используя разработанный вычислительный алгоритм расчета матрицы проводимости  $\mathbf{Y}$  ФАБ, из характеристического уравнения [9] рассчитаны действительная и мнимая части комплексного коэффициента распространения фундаментальной моды в волноведущей структуре «УНТ – графен» в ТГц диапазоне в зависимости от значения химического потенциала (величины внешнего постоянного электрического поля), а также соотношения геометрических

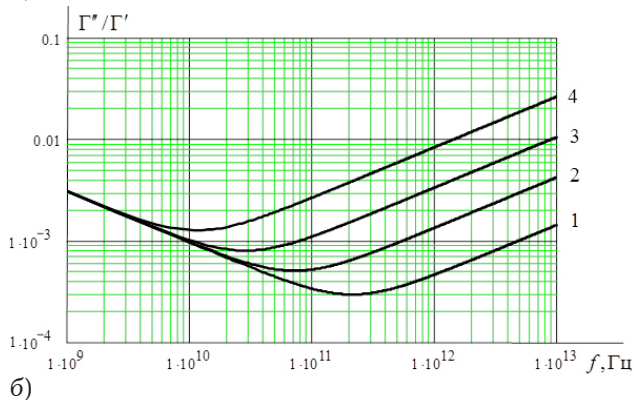
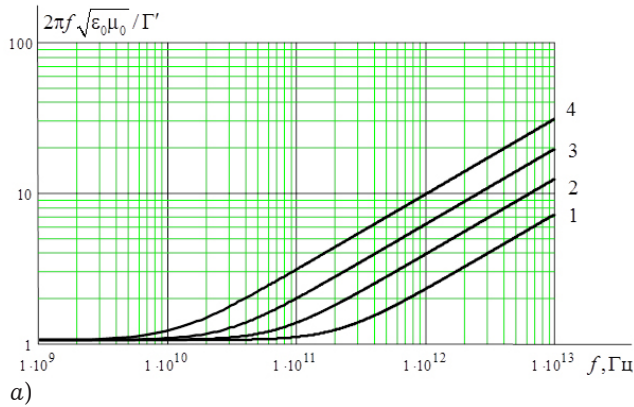


**Рис. 9.** Частотные зависимости коэффициента замедления (а) и затухания (б) на длине волны основного типа в линии передачи «УНТ – графен» при различных значениях химического потенциала  $\mu_c$ :  $r = 0,678$  нм;  $a = b = 1,5\lambda$ ;  $s = 0,3\lambda$ ;  $h = 0,1\lambda$ ; кривая 1 –  $\mu_c = 1$  эВ; 2 –  $\mu_c = 0,75$  эВ; 3 –  $\mu_c = 0,5$  эВ; 4 –  $\mu_c = 0$  эВ

размеров (при различных радиусах УНТ и расстояниях «УНТ – графен»).

Рассчитанные частотные зависимости коэффициента замедления  $2\pi f\sqrt{\epsilon_0\mu_0} / \Gamma'$  и коэффициента затухания  $\Gamma'' / \Gamma'$  на длине волны фундаментальной моды в волноведущей структуре «УНТ – графен» для различных радиусов УНТ при изменении значения химического потенциала (0–1 эВ) в ТГц диапазоне представлены на рис. 9–11.

Как следует из результатов математического моделирования (рис. 9–11, а), коэффициент замедления монотонно возрастает при увеличении значения химического потенциала  $\mu_c = 0$ –1 эВ. Дисперсионные зависимости коэффициента замедления  $2\pi f\sqrt{\epsilon_0\mu_0} / \Gamma'$  волны основного типа от частоты определяются геометрическими размерами структуры (радиус УНТ, расстояние «УНТ – графен»). Дисперсионные зависимости волны основного типа в волноведущей структуре «УНТ – графен» определяются геометрическими размерами структуры (радиус УНТ и расстояние «УНТ – графен») и при уменьшении радиуса УНТ ( $r = 2$  нм) смещаются в ближний ИК диапазон.

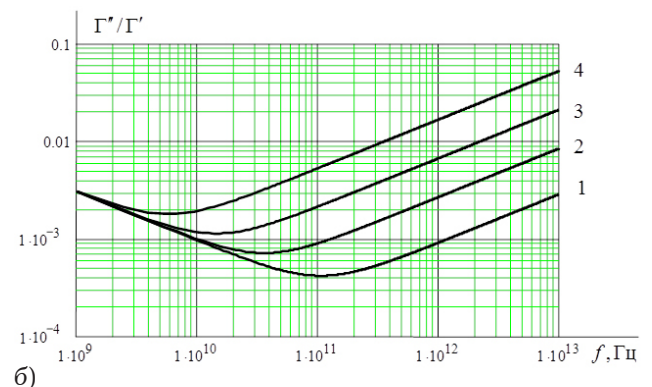
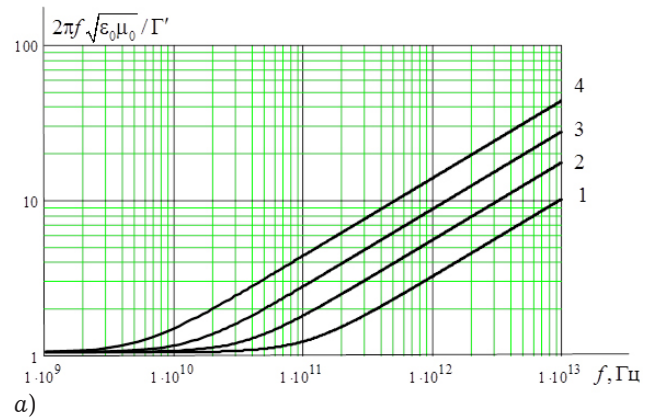


**Рис. 10.** Частотные зависимости коэффициента замедления (а) и затухания (б) на длине волны основного типа электромагнитной волны в линии передачи «УНТ – графен» при различных значениях химического потенциала  $\mu_c$ :  $r = 1,355$  нм;  $a = b = 1,5\lambda$ ;  $s = 0,3\lambda$ ;  $h = 0,1\lambda$ ; кривая 1 –  $\mu_c = 1$  эВ; 2 –  $\mu_c = 0,75$  эВ; 3 –  $\mu_c = 0,5$  эВ; 4 –  $\mu_c = 0$  эВ

Как видно из графиков (рис. 9–11, б), частотные зависимости коэффициента затухания  $\Gamma''/\Gamma'$  на длине волны основного типа в линии передачи «УНТ – графен» имеют минимум, положение которого зависит от радиуса УНТ и значения химического потенциала. С уменьшением радиуса УНТ ( $r = 2,71-0,678$  нм) минимум коэффициента затухания  $\Gamma''/\Gamma'$  на длине волны смещается в сторону более высоких частот ТГц диапазона и управляется химическим потенциалом.

#### 4. Результаты электродинамического расчета коэффициента прохождения ТЕМ-волны через 2D-решетки «УНТ – монослой графена»

Математические модели базируются на решении 3D-задач дифракции [11] электромагнитных волн на твердотельных наноструктурах, представляющих собой наноразмерные неоднородности (графен, УНТ) разнообразной конфигурации («УНТ – монослой графена», элементы решеток ориентированных «УНТ – графен», периодические наноструктуры «УНТ – монослой графена»).



**Рис. 11.** Частотные зависимости коэффициента замедления (а) и затухания (б) на длине волны основного типа в линии передачи «УНТ – графен» при различных значениях химического потенциала  $\mu_c$ :  $r = 2,71$  нм;  $a = b = 1,5\lambda$ ;  $s = 0,3\lambda$ ;  $h = 0,1\lambda$ ; кривая 1 –  $\mu_c = 1$  эВ; 2 –  $\mu_c = 0,75$  эВ; 3 –  $\mu_c = 0,5$  эВ; 4 –  $\mu_c = 0$  эВ

Методом ФАБ проведен электродинамический расчет частотных зависимостей коэффициента прохождения ТЕМ-волны через 2D-решетки ориентированных «УНТ – монослой графена» (при наличии и отсутствии внешнего постоянного электрического поля) в зависимости от химического потенциала (величины внешнего постоянного электрического поля), ориентации УНТ (по направлению и ортогонально вектору напряженности электрического поля), а также соотношения геометрических размеров (диаметра и длины УНТ, периода решетки, расстояния между УНТ и монослоем графена) в ТГц диапазоне.

Геометрия периодической 2D-решетки ориентированных «УНТ – монослой графена» (рис. 12) показана на рис. 12.

Расчетная модель на основе ФАБ дифракции ТЕМ-волны на периодической 2D-решетке «УНТ – монослой графена» представлена на рис. 13.

Результаты электродинамического расчета частотных зависимостей коэффициента прохождения ТЕМ-волны через периодическую

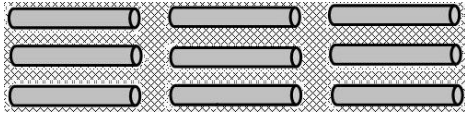


Рис. 12. Геометрия периодической 2D-решетки ориентированных УНТ – монослоя графена

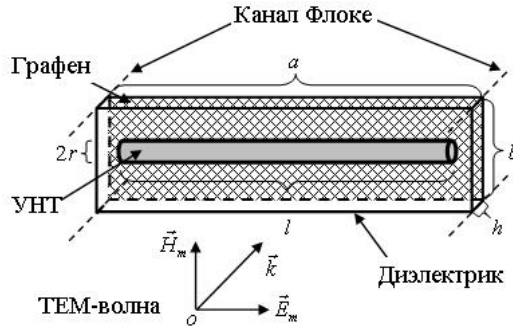


Рис. 13. Расчетная модель на основе ФАБ дифракции ТЕМ-волны на периодической 2D-решетке ориентированных «УНТ – монослоем графена»;  $2r$  – диаметр УНТ;  $l$  – длина УНТ;  $h$  – высота УНТ над графеном;  $a = b$  – размеры канала Флоке

2D-решетку ориентированных «УНТ – монослоем графена» для различных значений химического потенциала ( $\mu_c = 0-1$  эВ) при изменении расстояния между решеткой УНТ и монослоем графена (0–50 мкм) в ТГц диапазоне представлены на рис. 14.

Из результатов расчета (рис. 14) следует, что при изменении расстояния  $h$  между УНТ и монослоем графена (10–50 мкм) в нижней части ТГц диапазона имеются минимумы коэффициента прохождения (частотные полосы непропускания), обусловленные резонансами в резонаторе Фабри – Перро, образованного между плоскостью решетки ориентированных УНТ и монослоем графена. При увеличении расстояния  $h$  между решеткой УНТ и монослоем графена сначала при  $h = 10,0$  мкм появляется один ре-

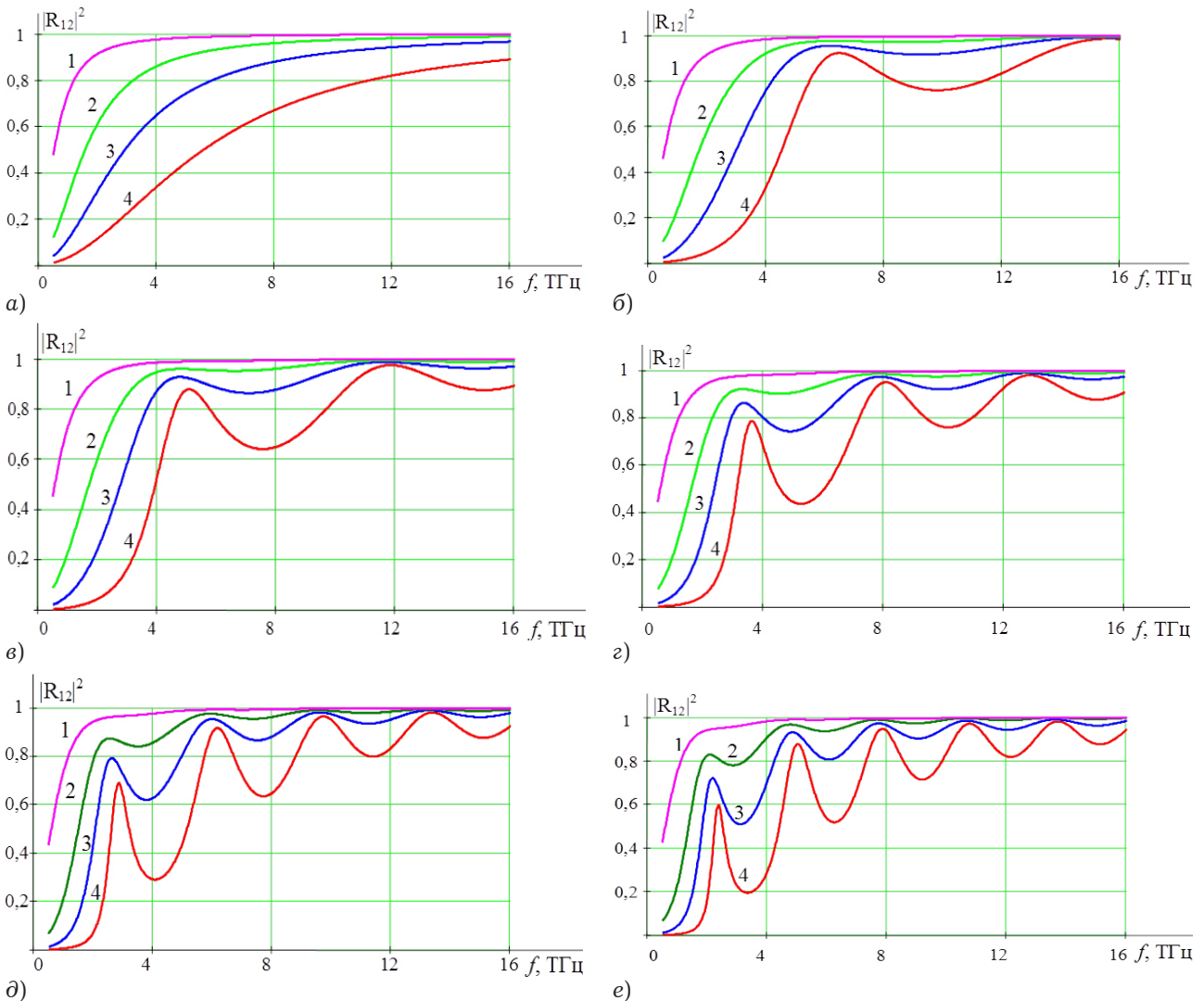
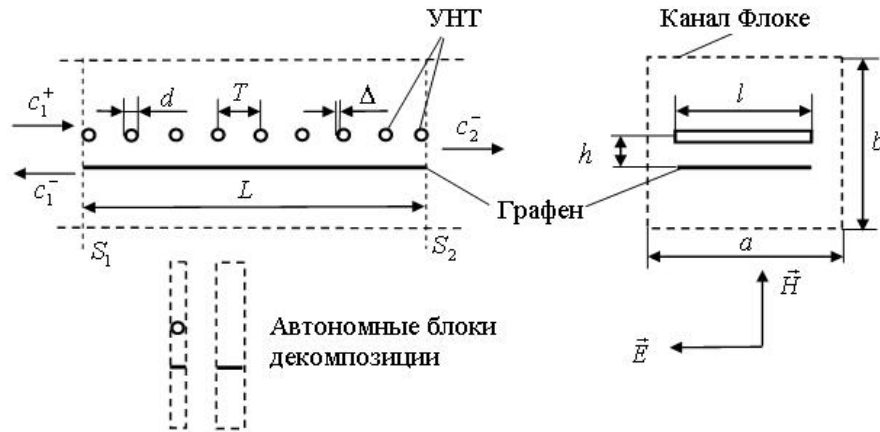
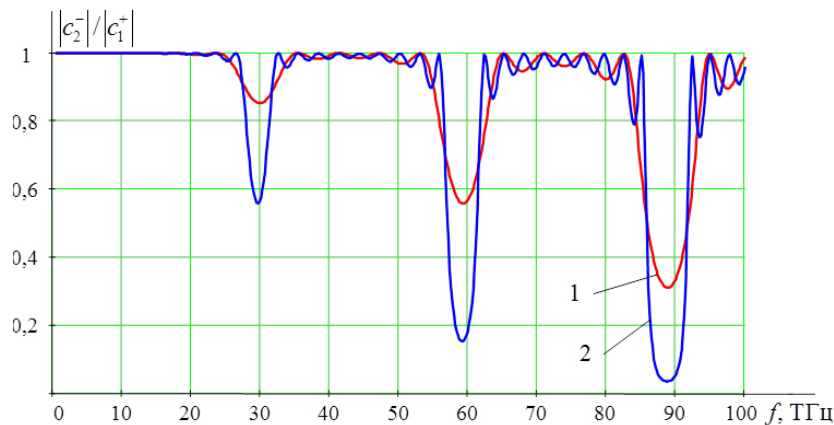


Рис. 14. Частотные зависимости коэффициента прохождения через периодическую 2D-решетку ориентированных «УНТ – монослоем графена» для различных значений химического потенциала при изменении расстояния между УНТ и монослоем графена:  $a = 5$  мкм;  $l/a = 0,75$ ;  $b = 50$  нм;  $2r = 50$  нм;  $\epsilon_d = 1$ ; кривая 1 –  $\mu_c = 0$  эВ; 2 –  $\mu_c = 0,25$  эВ; 3 –  $\mu_c = 0,5$  эВ; 4 –  $\mu_c = 1$  эВ; а)  $h = 0$  мкм; б)  $h = 10$  мкм; в)  $h = 20$  мкм; г)  $h = 30$  мкм; д)  $h = 40$  мкм; е)  $h = 50$  мкм



**Рис. 15.** Расчетная модель на основе ФАБ дифракции ТЕМ-волны на периодической наноструктуре «УНТ – монослой графена» в канале Флоке:  $S_1, S_2$  – входные сечения;  $c_1^+$  – амплитуда падающей волны;  $c_1^-$  – амплитуда отраженной волны;  $c_2^-$  – амплитуда прошедшей волны;  $d$  – диаметр УНТ;  $l$  – длина УНТ;  $T$  – период наноструктуры;  $h$  – расстояние между УНТ и монослоем графена;  $a = b$  – размеры канала Флоке;  $\Delta$  – толщина стенок УНТ и слоя графена



**Рис. 16.** Частотная зависимость коэффициента прохождения ТЕМ-волны через периодическую наноструктуру «УНТ – монослой графена» при различном числе  $N$  УНТ в структуре: кривая 1 –  $N = 5$ ; 2 –  $N = 10$ ;  $d = 50$  нм;  $l = 5000$  нм;  $T = 4900$  нм;  $h = 100$  нм;  $a = b = 10000$  нм;  $\Delta = 3$  нм;  $\sigma = 1 \cdot 10^7$  сим/м

зональный минимум коэффициента прохождения (рис. 14, а), при дальнейшем увеличении  $h$  ( $h = 20\text{--}50$  мкм) число минимумов возрастает (рис. 14, б–е).

Как следует из результатов математического моделирования (рис. 14), глубина минимумов коэффициента прохождения ТЕМ-волны и ширина полос непропускания определяются значениями химического потенциала (управляются внешним электрическим полем), а его положение изменяется при изменении расстояния  $h$  между решеткой УНТ и монослоем графена. Как видно из рис. 14, при изменении химического потенциала  $\mu_c = 0\text{--}1$  эВ (величины внешнего постоянного электрического поля) полосы непропускания существенно расширяются, а значения минимумов коэффициента прохождения уменьшаются.

Методом ФАБ проведен электродинамический расчет частотных зависимостей коэффициента прохождения ТЕМ-волны через периодические

наноструктуры «УНТ – монослой графена» с различным числом  $N$  УНТ в ТГц диапазоне.

Расчетная модель на основе ФАБ дифракции ТЕМ-волны на периодической наноструктуре «УНТ – монослой графена» представлена на рис. 15.

Результаты электродинамического расчета коэффициента прохождения ТЕМ-волны через периодическую наноструктуру «УНТ – монослой графена» при различном числе  $N$  УНТ в структуре представлены на рис. 16.

Из результатов расчета (рис. 16) следует, что имеются серии чередующихся полос пропускания и полос непропускания, обусловленных резонансом в ячейках (монослой графена и УНТ, ограничивающие резонатор) как в связанных резонаторах Фабри – Перро, в ТГц диапазоне. При увеличении числа  $N$  УНТ в структуре коэффициент прохождения в полосе непропускания значительно уменьшается.



## Заключение

Впервые построены математические модели процессов распространения, дифракции и взаимодействия электромагнитных волн со структурами сложной геометрии на основе графена, УНТ в ТГц, ИК диапазонах, отличающиеся от известных электродинамическим уровнем строгости и реализующие их вычислительные алгоритмы.

В отличие от феноменологического подхода модели позволяют учесть резонансные взаимодействия волн в композитных наноструктурах (графен, УНТ), которые оказываются более сложными ввиду большего разнообразия и сложной 3D-конфигурации наномасштабных неоднородностей. Соответственно, модели позволяют описывать электродинамические свойства гибридных анизотропных наноструктурных материалов, которые также оказываются более богатыми и разнообразными. В том числе модели позволяют исследовать особенности электродинамических характеристик таких наноматериалов, определяемые физическими свойствами и формой нановключений (графен, УНТ), в зависимости от частоты и постоянного электрического поля в ТГц, ближнем ИК диапазонах.

Показано, что при изменении значений химического потенциала 0–1 эВ относительная постоянная распространения волны основного типа в волноведущей структуре нового класса «УНТ – графен» существенно изменяется (возрастает) в ТГц диапазоне, при этом коэффициент затухания волны, возрастающий с ростом частоты, изменяется незначительно.

Из результатов математического моделирования следует, что способом эффективного управления дисперсионными характеристиками электромагнитных волн в волноведущих структурах «УНТ – графен» и коэффициентом прохождения через 2D-решетки ориентированных «УНТ – монослой графена» является изменение химического потенциала (действие внешнего электрического поля) вследствие изменения проводимости графена и УНТ в ТГц и ближнем ИК диапазонах.

*Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 12-02-97025-р\_поволжье\_а.*

## Список литературы

1. Лабунов В.А. Массивы углеродных нанотрубок и композитных структур на их основе, синтезированные инъекционным CVD методом; их магнитные, экранирующие и эмиссионные свойства // Тезисы докладов 13-й научной молодежной школы по твердотельной электронике «Физика и технология микро- и наносистем». СПб., 2010.
2. A three-dimensional carbon nanotube/graphene sandwich and its application as electrode in supercapacitors / Z. Fan [et al.] // *Advanced Materials*. 2010. № 33. P. 3723–3728.
3. Composite nanostructure of vertically aligned carbon nanotube array and planar graphite layer obtained by the injection CVD method / V.A. Labunov [et al.] // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics*. 2010. Vol. 13. № 2. P. 137–141.
4. Multi-level composite nanostructures based on the arrays of vertically aligned carbon nanotubes and planar graphite layers / V. Labunov [et al.] // *Physica Status Solidi (A)*. 2011. Vol. 208. № 2. P. 453–458.
5. Чернотатонский Л.А., Сорокин П.Б., Артюх А.А. Новые наноструктуры на основе графена: физико-химические свойства и приложения // *Усп. хим.* 2014. Т. 83 № 3. С. 251–279.
6. Composite nanostructure of vertically aligned carbon nanotube array and planar graphite layer obtained by the injection CVD method / V.A. Labunov [et al.] // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics*. 2010. Vol. 13. № 2. P. 137–141.
7. Gonzalez J., Guinea F., Herrero J. Propagating, evanescent, and localized states in carbon nanotube-graphene junctions // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. № 16. P. 165434.
8. Hanson G.W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene // *J. Appl. Phys.* 2008. Vol. 103. P. 064302.
9. Голованов О.А. Автономные блоки с виртуальными каналами Флоке и их применение для решения прикладных задач электродинамики // *Радиотехника и электроника*. 2006. Т. 51. № 12. С. 1423–1430.
10. Макеева Г.С., Голованов О.А. Математическое моделирование распространения электромагнитных волн в наноструктурированных гиромангнитных средах методом автономных блоков с магнитными нановключениями и каналами Флоке // *Радиотехника и электроника*. 2009. Т. 54. № 12. С. 1455–1459.
11. Макеева Г.С., Голованов О.А. Дифракция электромагнитных волн на решетках магнитных нанопроволок и геометрические, размерные эффекты в терагерцовом диапазоне // *Радиотехника и электроника*. 2010. Т. 55. № 2. С. 168–174.

## Methods and efficiency of control of dispersion of electromagnetic waves in the waveguiding structure based on carbon nanotube-graphene at terahertz and infrared frequency ranges

G.S. Makeyeva, O.A. Golovanov, R.A. Gorelov

The mathematical modeling of propagation of electromagnetic waves in waveguiding structures based on carbon nanotube – graphene at terahertz and infrared frequency ranges by solving the Maxwell's equations with electrodynamic boundary conditions, complemented by the constitutive laws for carbon nanotubes and the graphene, was done. Using method of autonomous blocks with Floquet channels the electrodynamic calculation of coefficients of delay and extinction of the fundamental mode in waveguiding structures based on carbon nanotube – graphene carbon nanotube with various radius ( $r = 25\text{--}2\text{ nm}$ ) and the distance between carbon nanotube and graphene) depending on the frequency were obtained for different values of chemical potential (the external electric field intensity) at terahertz and near infrared frequency ranges.

*Keywords:* graphene, carbon nanotubes, electromagnetic waves propagation, dispersion chemical potential, terahertz, infrared frequency range.

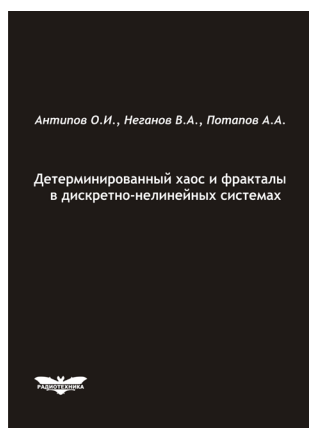
**Антипов, О.И.**

**Детерминированный хаос и фракталы в дискретно-нелинейных системах** / О.И. Антипов, В.А. Неганов, А.А. Потапов. – М.: Радиотехника, 2009. – 235 с., ил.

**ISBN 978-5-88070-237-4**

УДК 530.1:621.372+621.396

ББК 32.96



В монографии рассмотрены явления детерминированного хаоса и фрактальности в дискретно-нелинейных системах на примере устройств импульсной силовой электроники, приведены некоторые основные определения современной нелинейной динамики и некоторые математические методы целочисленных и дробных мер.

Представленные явления стохастической работы могут наблюдаться в широком классе систем с переменной структурой, действие которых может быть описано системами дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами, скачкообразно меняющими свои значения с течением времени в зависимости от состояния системы. Объектами исследования явились импульсные стабилизаторы напряжения различных типов и структур. Научной новизной является применение как фрактальных, так и мультифрактальных мер детерминированного хаоса к анализу стохастической работы импульсных стабилизаторов.

*Для специалистов, интересующихся проблемами детерминированного хаоса, численным моделированием дискретно-нелинейных систем.*