

Математическое моделирование дифракции ТЕМ-волны на периодических 2D-структурах из микролент графена конечной длины в терагерцовом диапазоне

Г.С. Макеева¹, О.А. Голованов², В.В. Вареница³

¹ Пензенский государственный университет
440026, Российская Федерация, г. Пенза
ул. Красная, 40

² Пензенский филиал Военной академии материально-технического обеспечения
440005, Российская Федерация, г. Пенза-5
ФВАМТО

³ ЗАО «НПО «Эшелон»
107023, Российская Федерация, г. Москва
ул. Электrozаводская, 24, стр. 1

С помощью разработанного проекционным методом вычислительного алгоритма проведено математическое моделирование дифракции ТЕМ-волны на периодических структурах из микролент графена конечной длины при нормальном падении ТЕМ-волны (с ориентацией вектора электрического поля ТЕМ-волны ортогонально лентам графена) в терагерцовом диапазоне. Получены результаты электродинамического расчета частотных зависимостей коэффициента прохождения ТЕМ-волны через 2D периодические 2D-структуры из микро- и нанолент графена конечной длины в зависимости от химического потенциала (внешнего постоянного электрического поля) при изменении геометрических размеров лент и периодичности структуры.

Ключевые слова: проекционный метод, периодическая структура, микролента графена, терагерцовый диапазон.

Введение

Графен (graphene) – слой атомов углерода, соединенных посредством sp^2 -связей в гексагональную 2D кристаллическую решетку с расстоянием между двумя соседними атомами углерода в 0,142 нм (рис. 1) [1].

Теоретическое исследование графена началось задолго до получения реальных образцов материала. В 2004 году совместными усилиями ученых Манчестерского университета (Великобритания) под руководством А. Гейма и Российского института проблем технологии микроэлектроники и особо чистых металлов в Черноголовке под руководством К. Новоселова удалось получить и воспроизвести структуру графена [2]. За открытие графена и опыты с 2D-материалом А.К. Гейму и К.С. Новоселову присуждена Нобелевская премия по физике за 2010 год [1].

Графен обладает уникальными электронно-оптическими свойствами в широкой полосе частот от СВЧ до оптического диапазона, такими как управляемость электрическим полем в зависимости от концентрации носителей заряда и возможность ограничивать электромагнитную

энергию в очень малых объемах, а также исключительными механическими свойствами: гибкость, прочность, стабильность к условиям окружающей среды [2; 3].

Наноматериалы на основе лент графена перспективны для применений в терагерцовом диапазоне для создания высокоскоростных электрически управляемых сверхмикроминиатюрных устройств и антенн [4], что и определяет актуальность задачи.

1. Уравнения электродинамики для структур на основе графена

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

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

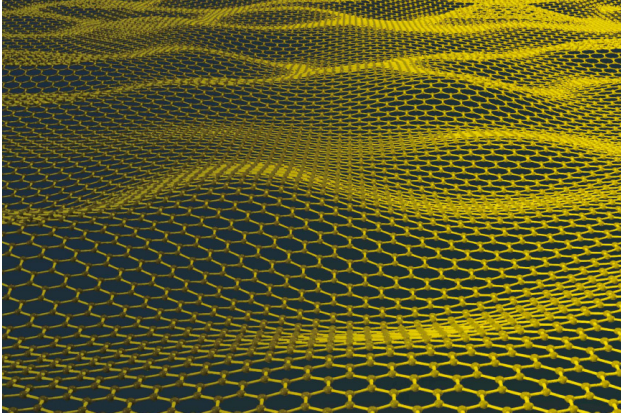


Рис. 1. Графен – слой атомов углерода, соединенных посредством *sp*-связей в гексагональную 2D кристаллическую решетку [1]

совместно с материальными уравнениями среды (графена):

$$\vec{D}(t) = \epsilon_0 \epsilon \vec{E}(t),$$

$$\vec{B}(t) = \mu_0 \mu \vec{H}(t),$$

$$\vec{J}(t) = \sigma \vec{E}(t)$$

и дополненной электродинамическими граничными условиями. Здесь $\vec{E}(t)$, $\vec{H}(t)$ – векторы напряженностей электрического и магнитного полей; $\vec{D}(t)$, $\vec{B}(t)$ – векторы электрической и магнитной индукций; $\vec{J}(t)$ – плотность тока; ϵ , μ – относительные диэлектрическая и магнитная проницаемости среды; σ – объемная удельная проводимость (электропроводность) среды; ρ – объемная плотность электрического заряда; ϵ_0 , μ_0 – электрическая и магнитная постоянные.

Монослой графена характеризуется поверхностной проводимостью σ_s , определяемой формулой Кубо [5]:

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

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.

Проводимость графена в ТГц-диапазоне определяется, согласно модели Кубо (2), химиче-

ским потенциалом, который можно изменять, например, приложенным внешним электрическим полем [5–8].

В уравнения Максвелла (1) входит объемная удельная проводимость σ , которую необходимо выразить через поверхностную проводимость σ_s .

Для монослоя графена вводится комплексная диэлектрическая проницаемость [5]:

$$\epsilon(\omega, \mu_c) = 1 + \frac{i\sigma(\omega, \mu_c)}{\epsilon_0 \omega d}. \quad (3)$$

где d – эффективная толщина монослоя графена.

Введем эффективную толщину графена $d = 1 \cdot 10^{-9}$ м и установим связь между поверхностной σ_s и объемной σ проводимостями: $\sigma = \sigma_s / d$. Тогда уравнения Максвелла (1) для электродинамических структур на основе графена запишутся в виде:

$$\begin{cases} \text{rot } \vec{H}(t) = \epsilon_0 \epsilon_b \frac{\partial \vec{E}(t)}{\partial t} + \frac{\sigma_s}{d} \vec{E}(t), \\ \text{rot } \vec{E}(t) = -\mu_0 \mu_b \frac{\partial \vec{H}(t)}{\partial t}. \end{cases} \quad (4)$$

где $\epsilon = \epsilon_b$, $\mu = \mu_b$ – диэлектрическая и магнитная проницаемости графена, которые считаем скалярными величинами; нескомпенсированный электрический заряд отсутствует [7].

С учетом (3) запишем уравнения Максвелла (4) для гармонических колебаний в виде:

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{H} &= i\omega \epsilon_0 \epsilon_b(\omega, \mu_c) \vec{E}, \\ \text{rot } \vec{E} &= -i\omega \mu_0 \mu_b \vec{H}. \end{aligned} \quad (5)$$

2. Проекционная модель в интегральной форме

Рассмотрим 3D-задачу дифракции электромагнитной волны на 2D периодической структуре из лент графена конечной длины, расположенных на диэлектрической слое (рис. 7, а) в ТГц-диапазоне.

Пусть на периодическую 2D-структуру из лент графена конечной длины падает плоская однородная электромагнитная волна (ТЕМ-волна) $\vec{E} = E \vec{x}_0$, $\vec{H} = H \vec{y}_0$ с волновым вектором \vec{k} , частотой ω и амплитудой $C_{1(1)}^+(\omega)$. Волна распространяется вдоль оси z , вектор напряженности электрического поля $\vec{E} = E \vec{x}_0$ ТЕМ-волны ориентирован поперечно по отношению к лентам графена (рис. 2).

Краевую 3D-задачу дифракции для уравнений (5) с соответствующими электродинамическими граничными условиями на периодической

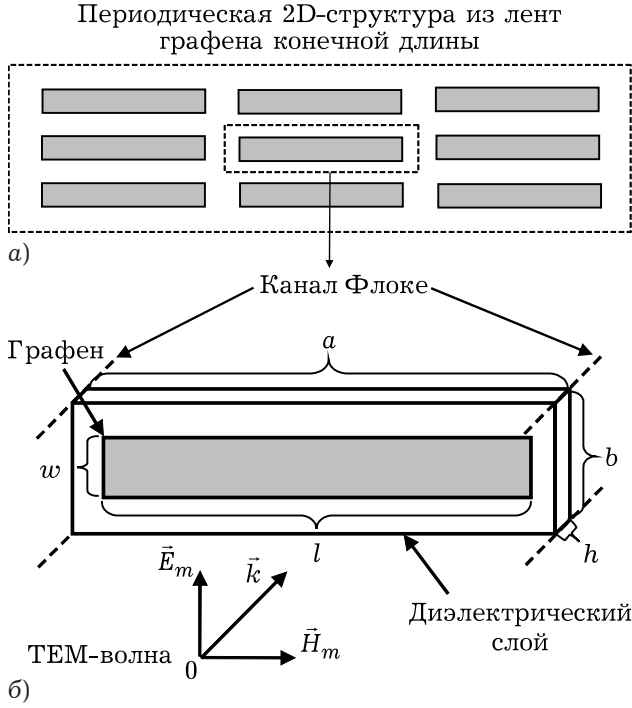


Рис. 2. Расчетная схема дифракции ТЕМ-волны на 2D периодической структуре из лент графена конечной длины (вектор электрического поля ТЕМ-волны ортогонален лентам графена): а) 2D периодическая структура из лент графена конечной длины на диэлектрическом слое; б) ячейка 2D периодической структуры в виде волноводного трансформатора

2D-структуре из лент графена конечной длины (рис. 2) решаем на основе декомпозиционного подхода [9].

Элементарную ячейку периодической 2D-структуры (рис. 2, а) с геометрическими размерами a , b , h , содержащую отрезок канала Флоке с неоднородным заполнением в виде ленты графена конечной длины и диэлектрического слоя (рис. 2, б), будем рассматривать как волноводный трансформатор [10]. Этот волноводный трансформатор представляет собой каскадное соединение двух волноводных трансформаторов – для канала Флоке с лентой графена конечной длины и канала Флоке с диэлектрическим слоем с входными сечениями S_1 , S_2 (рис. 3, б). На сечениях S_1 , S_2 введены локальные системы координат.

Вычислительный алгоритм определения дескрипторов (матриц проводимости) волноводных трансформаторов построен на основе решения краевых 3D-задач проекционным методом Галеркина [11].

Построим вычислительный алгоритм определения матрицы проводимости \mathbf{Y} для канала Флоке с лентой графена конечной длины. Для этого применим проекционный метод [11]. Сформулируем краевую 3D-задачу дифракции для

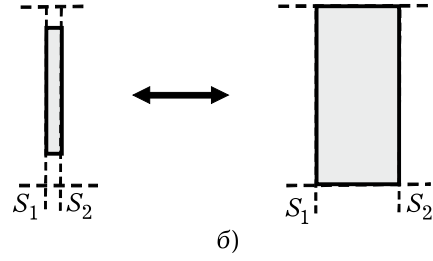


Рис. 3. Каскадное соединение двух волноводных трансформаторов: а) канал Флоке с лентой графена конечной длины; б) канал Флоке с диэлектрическим слоем

волноводного трансформатора с включением в виде ленты графена и виртуальными каналами Флоке на входных сечениях S_1 и S_2 (рис. 3, а). Электромагнитное поле в области ленты графена V (рис. 3, а) должно удовлетворять уравнениям Максвелла (5):

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H} &= i\omega \epsilon_0 \epsilon_b(\omega, \mu_c) \vec{E}, \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -i\omega \mu_0 \mu_b \vec{H}. \end{aligned} \quad (6)$$

В остальной области $V_0 - V$ волноводного трансформатора – уравнениям Максвелла:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H} &= i\omega \epsilon_0 \vec{E}, \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -i\omega \mu_0 \vec{H}; \end{aligned} \quad (7)$$

на входных сечениях S_1 и S_2 условию неасимптотического излучения [12]:

$$\begin{aligned} \int_{S_\alpha} (\vec{E}_\alpha \times h_{k(\alpha)}^*) \cdot d\vec{S}_\alpha - \int_{S_\alpha} (\vec{e}_{k(\alpha)} \times \vec{H}_{k(\alpha)}) \cdot d\vec{S}_\alpha &= \\ &= a_{k(\alpha)} - b_{k(\alpha)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Построим проекционную модель в интегральной форме [11] для системы дифференциальных уравнений (10), (11).

Запишем уравнения Максвелла (10), (11) в виде:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H} &= i\omega \epsilon_0 \epsilon_a \vec{E}, \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -i\omega \mu_0 \mu_a \vec{H}, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\epsilon_a = \epsilon_b$, $\mu_a = \mu_b$ в области V ; $\epsilon_a = \epsilon_0$, $\mu_a = \mu_0$ в области $V_0 - V$ (рис. 3, а),

В качестве проекционного базиса используются собственные функции краевой задачи для прямоугольного резонатора:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{H}_k = i\omega_k \epsilon_0 \epsilon_1 \vec{E}_k; \\ \operatorname{rot} \vec{E}_k = -i\omega_k \mu_0 \mu_1 \vec{H}_k \end{cases} \quad (10)$$

с однородно-периодическими граничными условиями на стенках [13].

Запишем уравнения (10) относительно комплексно-сопряженных функций:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H}_k^* &= -i\omega_k \epsilon_0 \epsilon_1 \vec{E}_k^*; \\ \operatorname{rot} \vec{E}_k^* &= i\omega_k \mu_0 \mu_1 \vec{H}_k^*. \end{aligned} \quad (11)$$

Из уравнений (9) и (10) составим линейную комбинацию уравнений следующего вида:

$$\begin{aligned} \vec{E}_k^* \cdot \text{rot} \vec{H} - \vec{H} \cdot \text{rot} \vec{E}_k^* &= \\ &= i\omega\varepsilon_0\varepsilon_a \vec{E} \cdot \vec{E}_k^* - i\omega_k \mu_0 \vec{H} \cdot \vec{H}_k^*, \\ \vec{E} \cdot \text{rot} \vec{H}_k^* - \vec{H}_k^* \cdot \text{rot} \vec{E} &= \\ &= -i\omega_k \varepsilon_0 \vec{E} \cdot \vec{E}_k^* + i\omega \mu_0 \mu_a \vec{H} \cdot \vec{H}_k^*. \end{aligned} \quad (12)$$

Применяя тождество $\vec{b} \text{rot} \vec{a} - \vec{a} \text{rot} \vec{b} = \text{div}(\vec{a} \times \vec{b})$ и формулу Остроградского – Гаусса, получаем из (16) проекционную модель в интегральной форме:

$$\begin{aligned} \oint_{S_\Sigma} (\vec{H} \times \vec{E}_k^*) \cdot d\vec{S} &= \\ &= i\omega\varepsilon_0 \int_{V_0} \varepsilon_a \vec{E} \cdot \vec{E}_k^* dV - i\omega_k \mu_0 \int_{V_0} \vec{H} \cdot \vec{H}_k^* dV, \\ \oint_{S_\Sigma} (\vec{E} \times \vec{H}_k^*) \cdot d\vec{S} &= \\ &= -i\omega \mu_0 \int_{V_0} \mu_a \vec{H} \cdot \vec{H}_k^* dV + i\omega_k \varepsilon_0 \int_{V_0} \vec{E} \cdot \vec{E}_k^* dV, \end{aligned} \quad (13)$$

$k = 1, 2, \dots,$

где $S_\Sigma = S_1 \cup S_2$; $\varepsilon_a = \varepsilon_b$, $\mu_a = \mu_b$ в области V ; $\varepsilon_a = \varepsilon_0$, $\mu_a = \mu_0$ в области $V_0 - V$.

Решение системы уравнений (13) ищем в виде рядов Фурье по системам функций $\{\vec{E}_n\}$, $\{\vec{H}_n\}$ (собственные функции прямоугольного резонатора), $\{\vec{e}_{l(\beta)}\}$, $\{\vec{h}_{l(\beta)}\}$ (собственные функции каналов Флоке) [13].

В области V_0 волноводного трансформатора (рис. 3, а):

$$\vec{E} = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{a}_n \vec{E}_n, \quad \vec{H} = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{b}_n \vec{H}_n. \quad (14)$$

На входных сечениях S_1 и S_2 волноводного трансформатора:

$$\vec{E}_\beta = \sum_{l=1}^{\infty} a_{l(\beta)} \vec{e}_{l(\beta)}, \quad \vec{H}_\beta = \sum_{l=1}^{\infty} b_{l(\beta)} \vec{h}_{l(\beta)}, \quad \beta = 1, 2. \quad (15)$$

Подставляя (14), (15) в (13) и (15) в (8), учитывая при этом нормировки [10], получаем следующую систему алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} \mathbf{N}\mathbf{a} - \mathbf{d}\tilde{\mathbf{a}} - \mathbf{B} \cdot \tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{0}, \\ \mathbf{M}\mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{a}} - \mathbf{d}\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{0}, \\ \mathbf{U}\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{b}, \end{cases} \quad (16)$$

где \mathbf{N} , \mathbf{d} , \mathbf{B} , \mathbf{M} , \mathbf{A} , \mathbf{U} – матрицы с элементами:

$$\begin{aligned} N_{kl(\beta)} &= \int_{S_\beta} (\vec{e}_{l(\beta)} \times \vec{H}_k^*) \cdot d\vec{S}_\beta; \\ d_{kn} &= i\omega_k \delta_{kn}; \end{aligned}$$

$$B_{kn} = i\omega \delta_{kn} + i\omega \mu_0 (\mu_b - 1) \int_V (\vec{H}_n \cdot \vec{H}_k^*) dV;$$

$$M_{kl(\beta)} = \int_{S_\beta} (\vec{h}_{l(\beta)} \times \vec{E}_k^*) \cdot d\vec{S}_\beta;$$

$$A_{kn} = i\omega \delta_{kn} + i\omega \varepsilon_0 (\varepsilon_2 - 1) \int_V (\vec{E}_n \cdot \vec{E}_k^*) dV;$$

$$U_{q(\alpha)n} = \int_{S_\alpha} (\vec{e}_{q(\alpha)} \times \vec{H}_n^*) \cdot d\vec{S}_\alpha;$$

$$\alpha, \beta = 1, 2; \quad k, n = 1, 2, \dots, N; \quad q, l = 1, 2, \dots, L.$$

Здесь N , L – число базисных функций, учтенных в объеме V_0 и на входных сечениях S_1 , S_2 волноводного трансформатора соответственно. Векторы $\tilde{\mathbf{a}}$, $\tilde{\mathbf{b}}$, \mathbf{a} , \mathbf{b} (16) составлены из коэффициентов $\{\tilde{a}_n\}$, $\{\tilde{b}_n\}$ и $\{a_{l(\beta)}\}$, $\{b_{l(\beta)}\}$ рядов Фурье (14) и (15) соответственно.

Исключая векторы $\tilde{\mathbf{a}}$, $\tilde{\mathbf{b}}$ из системы алгебраических уравнений (16), получаем следующее матричное уравнение:

$$\mathbf{b} = (\mathbf{U}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{M} - \mathbf{I})^{-1} \mathbf{U}\mathbf{Q}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{d}^{-1} \mathbf{N} \mathbf{a}, \quad (17)$$

где $\mathbf{Q} = \mathbf{d} - \mathbf{A} \mathbf{d}^{-1} \mathbf{B}$; \mathbf{I} – единичная матрица.

Из матричного уравнения (17) следует матрица проводимости \mathbf{Y} волноводного трансформатора с включением в виде ленты графена конечной длины и каналами Флоке на входных сечениях (рис. 3, а):

$$\mathbf{Y} = (\mathbf{U}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{M} - \mathbf{I})^{-1} \mathbf{U}\mathbf{Q}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{d}^{-1} \mathbf{N}, \quad (18)$$

где $\mathbf{Q} = \mathbf{d} - \mathbf{A} \mathbf{d}^{-1} \mathbf{B}$; \mathbf{I} – единичная матрица.

Матрицу рассеяния \mathbf{S} можно получить, используя выражение

$$\mathbf{S} = (\mathbf{I} + \mathbf{Y})^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{Y}).$$

3. Результаты математического моделирования

С помощью вычислительного алгоритма, разработанного на основе проекционной модели в интегральной форме, проведено математическое моделирование дифракции ТЕМ-волны на решетках микролент графена (бесконечной длины) и периодических структурах 2D из микро- и нанолент графена конечной длины при нормальном падении ТЕМ-волны с ориентацией вектора электрического поля ортогонально лентам графена (рис. 2) с учетом геометрических, размерных эффектов в ТГц-диапазоне.

Результаты электродинамического расчета частотных зависимостей коэффициента прохож-

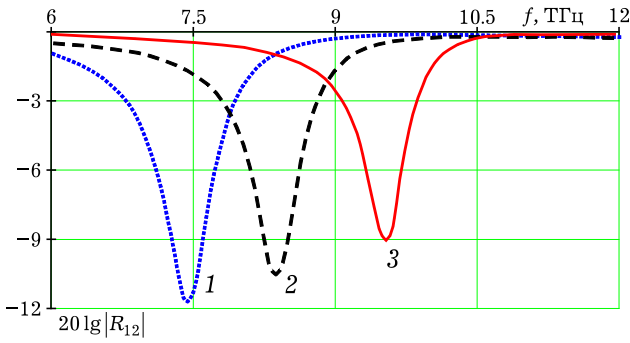


Рис. 4. Частотные зависимости коэффициента прохождения $|R_{12}|$ ТЕМ-волны через решетку микролент графена (для плазмонной моды 1-го порядка) при изменении соотношения ширины лент w и периода решетки p : $p = 2$ мкм, $t = 1$ мкм, $\varepsilon = 4$, $\mu_c = 0,5$ эВ; кривые 1 – $w/p = 0,6$, 2 – $w/p = 0,5$, 3 – $w/p = 0,4$

дения $|R_{12}|$ ТЕМ-волны через решетку микролент графена (для фундаментальной плазмонной моды) при изменении соотношения ширины лент w и периода решетки p ($p = \text{const}$) при постоянном значении химического потенциала μ_c приведены на рис. 4.

Из результатов моделирования (рис. 4) следует, что спектр прохождения ТЕМ-волны (вектор напряженности электрического поля ТЕМ-волны ортогонален лентам графена) в ТГц-диапазоне имеет минимум (полосу непропускания), обусловленный плазмонным резонансом фундаментальной моды (1-го порядка) в графене, в интервале частот 1–10 ТГц. При уменьшении ширины w лент графена по отношению к периоду решетки p минимумы коэффициента прохождения ТЕМ-волны через решетку микролент графена смещаются в сторону более высоких частот ТГц-диапазона.

Результаты расчета зависимостей коэффициента прохождения $|R_{12}|$ ТЕМ-волны через решетку микролент графена от частоты для различных значений химического потенциала μ_c (для плазмонных мод 1-, 2- и 3-го порядков) приведены на рис. 5, а, б, в соответственно.

Из результатов моделирования (рис. 5) следует, что спектр прохождения ТЕМ-волны через решетку микролент графена имеет пики поглощения и на более высоких частотах ТГц-диапазона, что определяется плазмонным резонансом мод высшего порядка в прямоугольниках графена (рис. 5, а–в). При увеличении значения химического потенциала ($\mu_c = 0 - 1$ эВ) частоты минимумов коэффициента прохождения ТЕМ-волны сдвигаются, то есть рабочие частоты управляются приложением внешнего постоянного электрического поля.

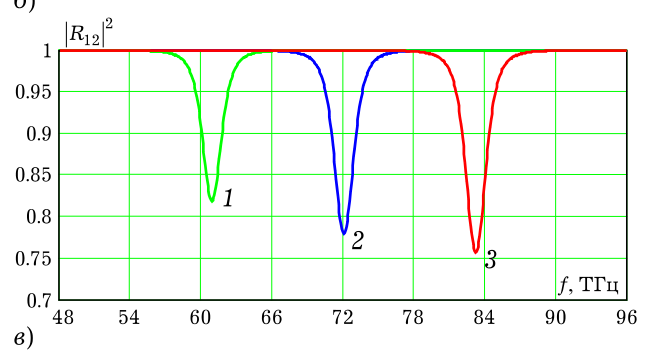
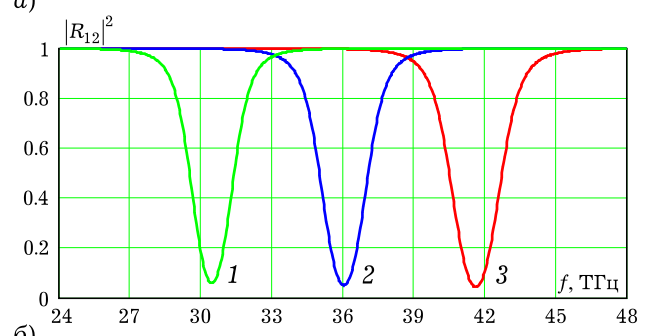
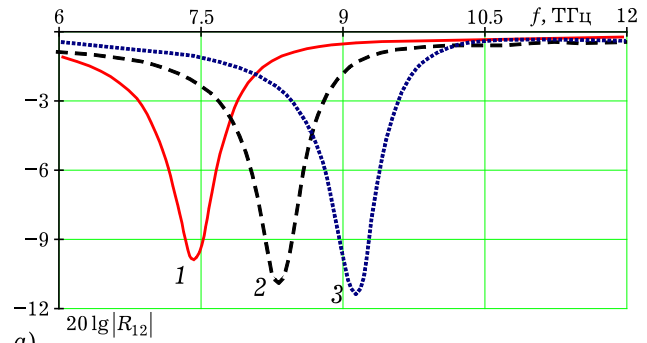


Рис. 5. Частотные зависимости коэффициента прохождения $|R_{12}|^2$ ТЕМ-волны через решетку микролент графена для плазмонных мод 1-го (а), 2-го (б) и 3-го (в) порядков при изменении химического потенциала μ_c (внешнего электрического поля): $w = 1$ мкм, $w/p = 0,5$, $t = 1$ мкм, $\varepsilon = 4$; кривые 1 – $\mu_c = 0,4$ эВ, 2 – $\mu_c = 0,5$ эВ, 3 – $\mu_c = 0,6$ эВ

Рассчитаны частотные зависимости коэффициента прохождения $|R_{12}|^2$ ТЕМ-волны через периодические 2D-структуры микро- и нанолент графена конечной длины при изменении соотношения геометрических размеров ячеек 2D-структуры в зависимости от химического потенциала в ТГц-диапазоне.

Результаты расчета частотных зависимостей коэффициента прохождения $|R_{12}|^2$ ТЕМ-волны через периодическую 2D-структуру из микролент графена конечной длины при изменении периода 2D-структуры b , т. е. плотности упаковки решетки (ширина микролент $w = \text{const}$), для постоянного значения химического потенциала μ_c приведены на рис. 6.

Результаты электродинамического расчета зависимостей коэффициента прохождения $|R_{12}|^2$ ТЕМ-волны через периодическую 2D-структуру

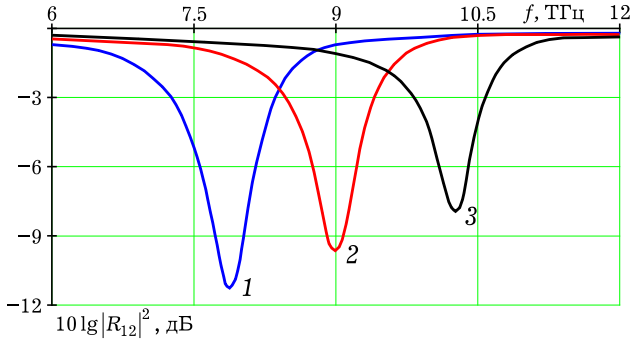


Рис. 6. Частотные зависимости коэффициента прохождения $|R_{12}|^2$ ТЕМ-волны через периодическую 2D-структуру из микролент графена конечной длины при изменении периода структуры b (плотности упаковки решетки): $a = 15$ мкм, $l/a = 0,75$, $w = h = 1$ мкм, $\mu_c = 0,5$ эВ, $\epsilon = 2,2$; кривые 1 – $b = 2,5$ мкм, 2 – $b = 2$ мкм, 3 – $b = 1,5$ мкм

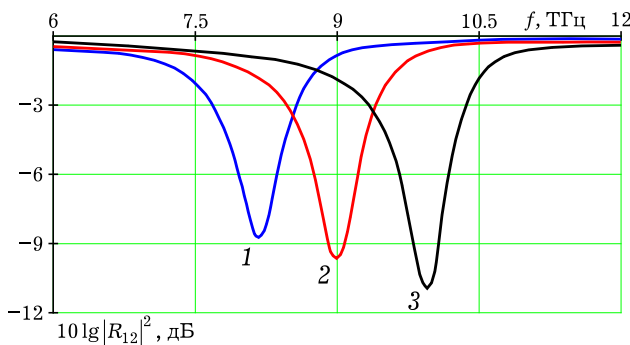


Рис. 7. Частотные зависимости коэффициента прохождения $|R_{12}|^2$ ТЕМ-волны через 2D-решетку микролент графена при изменении химического потенциала μ_c : $a = 2$ мкм, $l/a = 0,75$, $w = h = 1$ мкм, $b = 2$ мкм, $\epsilon = 2,2$; кривые 1 – $\mu_c = 0,4$ эВ, 2 – $\mu_c = 0,5$ эВ, 3 – $\mu_c = 0,6$ эВ

из микролент графена конечной длины (для основной плазмонной моды) от частоты при изменении химического потенциала μ_c (внешнего электрического поля) приведены на рис. 7.

Как следует из результатов математического моделирования (рис. 11, 12), при микронных размерах ширины лент графена и периода 2D-структуры минимум коэффициента прохождения лежит в интервале частот 1–10 ТГц, его положение и значение управляются изменением значения химического потенциала (величиной внешнего постоянного электрического поля) в широком интервале ТГц частот и зависит от соотношения геометрических размеров микролент и периода структуры.

Результаты электродинамического расчета частотных зависимостей коэффициента прохождения $|R_{12}|^2$ ТЕМ-волны через периодическую 2D-структуру из нанолент графена конечной длины при уменьшении ширины w нанолент графена и периода структуры b (при условии $w/b = \text{const}$) для постоянного значения химического потенциала μ_c приведены на рис. 8.

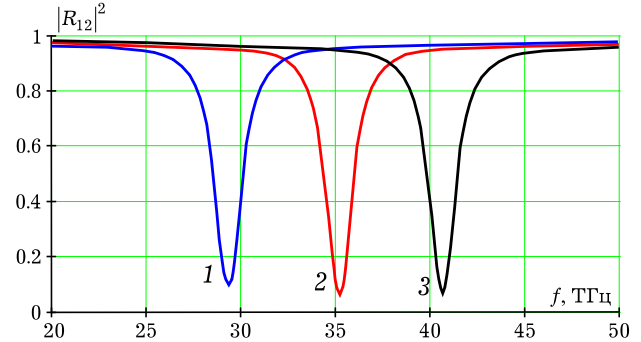


Рис. 8. Частотные зависимости коэффициента прохождения $|R_{12}|^2$ ТЕМ-волны через периодическую 2D-структуру из нанолент графена конечной длины при изменении ширины w нанолент графена ($w/b = \text{const}$): $\mu_c = 0,5$ эВ, $h = 0,5$ мкм, $a = 2$ мкм, $l/a = 0,75$, $\epsilon = 2,2$; кривые 1 – $b = 0,58$ мкм, $w = 0,26$ мкм; 2 – $b = 0,4$ мкм, $w = 0,2$ мкм; 3 – $b = 0,3$ мкм, $w = 0,15$ мкм

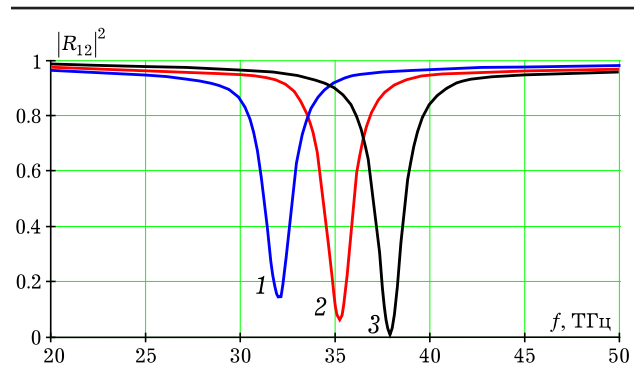


Рис. 9. Частотные зависимости коэффициента прохождения $|R_{12}|^2$ ТЕМ-волны через периодическую 2D-структуру из нанолент графена конечной длины при изменении химического потенциала: $h = 0,5$ мкм, $a = 2$ мкм, $l/a = 0,75$, $b = 0,4$ мкм, $w = 0,2$ мкм, $\epsilon = 2,2$; кривые 1 – $\mu_c = 0,4$ эВ; 2 – $\mu_c = 0,5$ эВ, 3 – $\mu_c = 0,6$ эВ

Как следует из результатов моделирования (рис. 6, 8), частоты минимумов коэффициента прохождения при уменьшении ширины w лент графена от микро- к наноразмерам сдвигаются в сторону более высоких частот (верхней границе ТГц-диапазона). Положение минимумов коэффициента прохождения ТЕМ-волны существенно зависит от соотношения геометрических размеров ячеек структуры (не только ширины, но и длины лент) к периоду решетки.

Результаты расчета зависимостей коэффициента прохождения $|R_{12}|^2$ ТЕМ-волны через периодическую 2D-структуру из нанолент графена конечной длины от частоты при изменении химического потенциала μ_c (внешнего электрического поля) приведены на рис. 9.

Из полученных результатов математического моделирования (рис. 5–8) следует, что спектры прохождения ТЕМ-волны имеют минимумы коэффициента прохождения, их положение и значение управляются изменением химического потенциала (внешнего электрического поля)

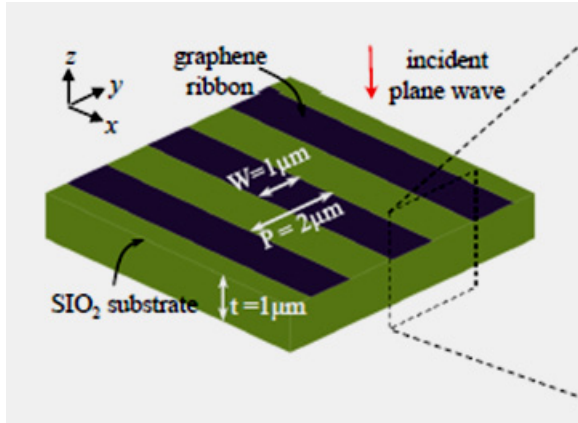


Рис. 10. Решетка микролент графена и расчетная схема в методе FDTD [14]: сетка ячейки решетки – $101\Delta y \times 300\Delta z$, $\Delta y = \Delta z = 20$ нм

в широком интервале частот ТГц-диапазона и с уменьшением геометрических размеров прямоугольников графена (от микро- к наноразмерам) и при увеличении плотности упаковки 2D-структуры сдвигаются в сторону вплоть до верхней границы ТГц-диапазона (ближнего ИК-диапазона).

4. Сравнение результатов моделирования с результатами, полученными методом конечных разностей во временной области (методом FDTD)

Проведем сравнение результатов электродинамического расчета коэффициента прохождения $|R_{12}|$ ТЕМ-волны через периодическую 2D-структуру из микролент графена конечной длины, полученных на основе проекционной модели в интегральной форме, с результатами, полученными методом конечных разностей во временной области (методом FDTD) [14].

На рис. 15 показана расчетная схема, примененная в методе FDTD для решения 2D краевой задачи дифракции ТЕМ-волны на решетке микролент графена (ленты графена по длине считаются бесконечными) [14]. Ориентация падающей ТЕМ-волны – вектор электрического поля волны \vec{E} перпендикулярен лентам графена (рис. 10). Сетка ячейки решетки имела следующие размеры: $101\Delta y \times 300\Delta z$ ($\Delta y = \Delta z = 20$ нм), $300\Delta z = 50\Delta z + 125\Delta z + 125\Delta z$ (подложка толщиной $t = 50\Delta z + 125\Delta z$) [14]. Такой выбор шага сетки обеспечивал точность вычислений 0,1 % [14].

На рис. 11 для сравнения показана расчетная схема в проекционной модели в интегральной форме для решения 3D-задачи дифракции ТЕМ-

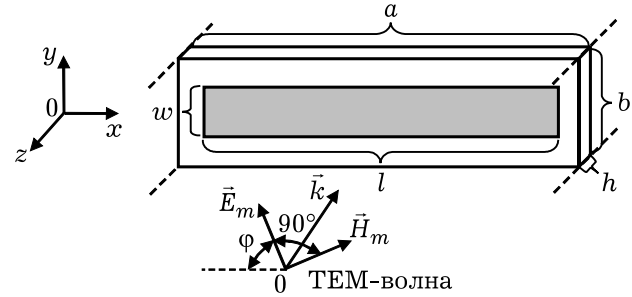


Рис. 11. Расчетная схема в проекционной модели в интегральной форме: $w = 1$ мкм, $b = 2$ мкм, $a = 10$ мкм, $h = 1$ мкм, $\varepsilon = 2,2$; $l/a = \text{var}$, $\phi = 90^\circ$

волны на периодической 2D-структуре из лент графена конечной длины. Число базисных функций в объеме V_0 волноводного трансформатора (рис. 11), содержащего ленту графена конечной длины, выбиралось равным $N_x = 10$, $N_y = 7$, $N_z = 3$, где N_x , N_y , N_z – число пространственных гармоник вдоль координатных осей ox , oy , oz соответственно (рис. 11). Число базисных функций на входных сечениях волноводного трансформатора (рис. 3) выбиралось равным $L_x = 5$, $L_y = 5$, где L_x , L_y – число пространственных гармоник вдоль координатных осей ox , oy , соответственно (рис. 11). При расширении базиса ($N_x = 20$, $N_y = 14$, $N_z = 6$, $L_x = 10$, $L_y = 10$) результат моделирования – значения коэффициента прохождения – изменялся на 0,05 %. Следовательно, можно считать, что точность результатов математического моделирования, полученных при помощи проекционной модели в интегральной форме, не хуже 0,1 % и, значит, сравнима с точностью вычислений методом FDTD.

Однако в данной работе решена более сложная 3D-задача дифракции на периодической 2D-структуре из микролент графена конечной длины, и непосредственно сравнивать результаты расчетов, полученных на основе проекционной модели в интегральной форме и методом FDTD, нельзя, так как во втором случае задача дифракции на 2D-решетке микролент графена (бесконечных по длине) является не трехмерной, а двумерной [14]. Однако при стремлении отношения $l/a \rightarrow 1$ (приближении длины лент графена l к периоду структуры a (рис. 16) 3D-задача дифракции асимптотически переходит в 2D-задачу. Это и будем использовать для сравнения результатов моделирования, полученных этими двумя вычислительными методами.

На рис. 12 показана зависимость коэффициента прохождения через 2D периодическую структуру из микролент графена конечной длины от

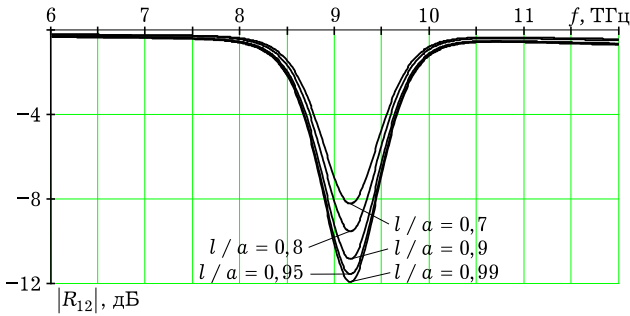


Рис. 12. Зависимости коэффициента прохождения через периодическую 2D-структуру из микролент графена конечной длины от частоты при $l/a \rightarrow 1$: $w = 1$ мкм, $b = 2$ мкм, $a = 10$ мкм, $h = 1$ мкм, $\varepsilon = 2,2$, $l/a = \text{var}$, $\varphi = 90^\circ$, $\mu_c = 0,6$ эВ

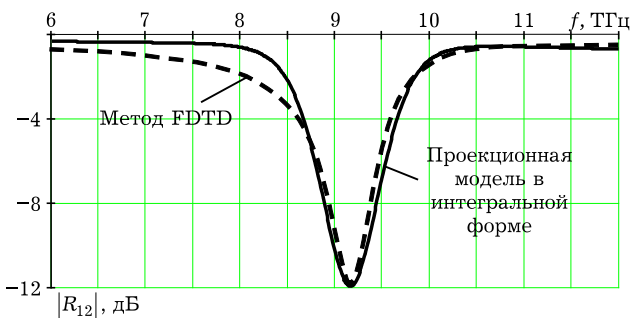


Рис. 13. Сравнение результатов моделирования, полученных различными вычислительными методами: $l/a = 0,99$, $w = 1$ мкм, $b = 2$ мкм, $a = 10$ мкм, $h = 1$ мкм, $\varepsilon = 2,2$, $\varphi = 90^\circ$, $\mu_c = 0,6$ эВ

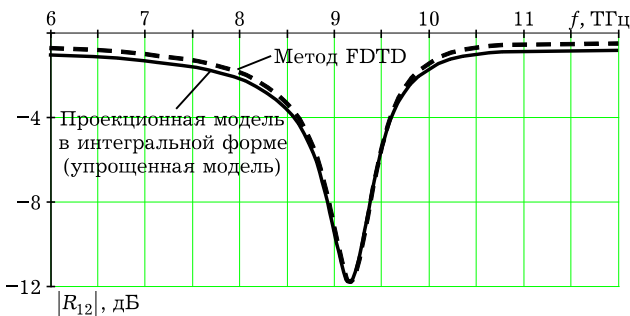


Рис. 14. Сравнение результатов моделирования при учете в проекционной модели в интегральной форме в спектре только ТЕМ-волны (упрощенная модель): $l/a = 0,99$, $\mu_c = 0,6$ эВ

частоты при различных значениях отношения l/a , рассчитанная на основе проекционной модели в интегральной форме (предложенный метод).

Из сравнения графиков (рис. 12 и рис. 6) следует, что при $l/a \geq 0,95$ результаты решения краевой 3D-задачи дифракции на 2D периодической структуре из микролент графена переходят в результаты решения 2D-задачи дифракции на решетке микролент графена (с соответствующими геометрическими размерами и параметрами).

На рис. 18 показаны результаты коэффициента прохождения через решетку микролент графена, полученные различными вычислительными методами: методом FDTD и на осно-

ве проекционной модели в интегральной форме. Совпадение результатов расчетов наблюдается только в области пика поглощения (полосы непропускания) и по уровню затухания (-12 дБ), и частоте ($f = 9,2$ ТГц), обусловленной плазмонным резонансом в прямоугольниках графена [14]; в остальной области – результаты расчетов несколько различаются (рис. 18).

Проекционная модель в интегральной форме (17) получена на основе строгой электродинамической постановки краевой задачи дифракции (5). При этом в спектре волн канала Флоке учитываются ТЕМ-волна и высшие типы волн (электромагнитное поле удовлетворяет условию неасимптотического излучения (12) на входных сечениях волноводного трансформатора).

В методе FDTD в спектре волнового процесса учитывается только ТЕМ-волна.

При расчетах, чтобы пренебречь влиянием запредельных высших типов волн, входные сечения S_1 и S_2 волноводного трансформатора (рис. 8, а) были вынесены в квазирегулярную область на расстояние $2,5$ мкм ($0,075\lambda$) от основного объекта дифракции. Однако этого расстояния недостаточно для затухания запредельных волн, согласно электродинамической теории оно должно быть не менее $0,3\lambda$.

Результаты расчетов (рис. 19) методом FDTD и разработанным вычислительным методом совпадают только при использовании упрощенной модели (в проекционной модели в спектре учитывается только ТЕМ-волна).

Для решения задачи дифракции в строгой электродинамической постановке методом FDTD требуется расширение квазирегулярной области до $0,3\lambda$, что приводит к увеличению времени вычислений почти на два порядка. Это является узким местом метода FDTD.

Заключение

Результаты электродинамического расчета могут быть использованы для создания устройств ТГц-диапазона на основе периодических 2D-структур с элементами в виде микро- и нанолент графена конечной длины: поляризаторов, быстро перестраиваемых оптических фильтров и сверхбыстрых пространственных модуляторов с управляемой электрическим полем широкой полосой частот, которые в перспективе будут работать и в ближнем ИК-диапазоне.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований грант № 12-02-97025-р_поволжье_a.

Список литературы

1. Graphene. Scientific Background on the Nobel Prize in Physics. Royal Swedish Academy of Sciences. Revised Nov. 29, 2010.
2. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in grapheme / K.S. Novoselov [et al.] // Nature. 2005. № 438. P. 197.
3. Морозов С.В., Новоселов К.С., Гейм А.К. Электронный транспорт в графене // Успехи физических наук. 2008. Т. 178. № 7. С. 776–780.
4. Excitation of plasmonic waves in graphene by guided-mode resonances / W. Gao [et al.] // ACS Nano. 2012. № 6 (9). P. 7806–7813.
5. Hanson G.W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of grapheme // J. of Appl. Phys. 2008. V. 103. P. 064302.
6. Ultrahigh electron mobility in suspended grapheme / K.I. Bolotin [et al.] // Solid State Commun. 2008. Vol. 146. P. 351–355.
7. Ryzhii V., Satou A., Otsuji T. Plasma waves in two-dimensional electron-hole system in gated graphene heterostructures // J. Appl. Phys. 2007. Vol. 101. P. 024509.
8. Falkovsky L.A. Unusual field and temperature dependence of the Hall effect in grapheme // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75. P. 033409.
9. Никольский В.В. Декомпозиционный подход к задачам электродинамики. М.: Наука, 1983. 297 с.
10. Никольский В.В. Электродинамика и распространение радиоволн. М.: Наука, 1973. 608 с.
11. Никольский В.В. Проекционные методы в электродинамике // Сборник научно-методических статей по прикладной электродинамике. М.: Высшая школа, 1977. С. 4–23.
12. Голованов О.А. Численный алгоритм решения задач дифракции для волноведущих устройств СВЧ с нелинейными средами // Радиотехника и электроника. 1990. Т. 35. № 9. С. 1853–1863.
13. 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.
14. Nayyeri V., Soleimani M., Ramahi O.M. Modeling graphene in the finite-difference time-domain method using a surface boundary condition // IEEE-PES General Meeting. Vancouver, BC, Canada, 21–25 July, 2013.

Mathematical modeling of diffraction of tem-wave on the periodic 2D structures of graphene micro-ribbons with finite length at terahertz frequency range

G.S. Makeeva, O.A. Golovanov, V.V. Varenitca

The mathematical simulation of diffraction of TEM-wave on the periodic 2D structures of graphene micro-ribbons with finite length is performed using the computational algorithm developed by projection method for the normal incident TEM-wave at terahertz frequency range. The results of electrodynamic calculation of the transmission coefficient for the TEM mode through the graphene micro- and nanoribbons with finite length depending on the frequency were obtained for different values of chemical potential (the external electric field) for different sizes of ribbons and the periodicity of the array.

Keywords: projection method, periodic structure, micro-ribbon graphene, terahertz range.
