УДК 621.371.334+537.874.6

ДИФРАКЦИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН НА МНОГОСЛОЙНЫХ ГРАФЕНОВЫХ МЕТАПОВЕРХНОСТЯХ В ТЕРАГЕРЦОВОМ ДИАПАЗОНЕ ЧАСТОТ

А. М. Лерер ¹*, Г. С. Макеева ², О. А. Голованов ²

¹ Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону; ² Пензенский госуниверситет, г. Пенза, Россия

Проведено математическое моделирование дифракции плоских электромагнитных волн на многослойных метаповерхностях из элементов нанолент графена на основе решения краевой трёхмерной задачи дифракции тремя методами: автономных блоков с каналами Флоке, объёмного интегродифференциального уравнения и приближённых граничных условий. Рассчитаны коэффициенты отражения, прохождения и поглощения волн *s*-, *p*-поляризации метаповерхностями из элементов прямоугольных нанолент графена в зависимости от частоты, а также угла падения для различных значений химического потенциала с учётом геометрических, размерных эффектов в терагерцовом диапазоне частот. Показано, что на частотах резонанса поверхностного плазмон-поляритона многослойные метаповерхности из двух графеновых полосок в элементарной ячейке на подложках, содержащих слои диэлектрика и графена, являются электрически управляемыми эффективными широкополосными терагерцовыми поглотителями и поляризаторами в режиме отражения, нечувствительными к углам падения.

ВВЕДЕНИЕ

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 концентрировать электромагнитную энергию в беспрецедентно малых объёмах.

Материалы на основе графена демонстрируют интересные свойства в широком диапазоне разнообразных приложений и рабочих частот, охватывающем спектр от микроволн до оптической области: наноэлектроника, применения в радиоэлектронике, включая терагерцовый диапазон частот, магнетизм и спинтроника, электромеханические устройства, оптоэлектроника, нанофотоника.

Недавний прогресс в производстве и формировании структурированного графена, в том числе технологии получения графеновых нанолент [1], ставит задачи и представляет большие возможности для создания метаматериалов терагерцового и инфракрасного диапазонов и перестраиваемых интегральных плазмонных устройств с потенциальными применениями в терагерцовых фильтрах, поляризаторах [2] и поглотителях [3–7]. Использование структурированного графена представляется чрезвычайно интересным для преодоления ограничений существующих технологий с точки зрения рабочих частот, сложности электрического смещения благодаря эффекту управляемости графена электрическим полем, а также интеграции и миниатюризации [8].

Новые направления, новые перспективы и новые приложения появляются в области метаматериалов на основе графена и их двумерной версии—метаповерхностей и ультратонких структур. Метаматериалы на основе графена с искусственной структурой резонансной элементарной ячейки

^{*} lerer@sfedu.ru

делают возможным объединение функций, например управление частотой поглощения, модуляция поляризации и отражения/поглощения при переключении в терагерцовых устройствах [9].

К настоящему времени разработаны достаточно эффективные химические методы получения графеновых лент нанометровой ширины [1], которая порядка длины плазмонной волны (но меньше длины электромагнитной волны) на терагерцовых частотах. Поэтому на основе ультратонких метаповерхностей из элементов нанолент графена могут быть созданы сверхмикроминиатюрные плазмонные устройства терагерцового диапазона.

Комбинация графена и метаповерхностей предоставляет возможности эффективного управления экзотическими электромагнитными свойствами, где метаповерхности с сильно локализованными полями позволяют улучшить взаимодействие между падающим излучением и графеном и способствовать достижению глубокой модуляции [3].

Предложен новый подход к проектированию сверхширокополосных нечувствительных к поляризации терагерцовых поглотителей на основе многослойных графеновых метаповерхностей [4], а также гибридных металлических и графеновых метаповерхностей для достижения нечувствительности не только к поляризации, но и к углу падения [5]. Узкополосные терагерцовые поглотители, состоящие из периодических одно- и двухслойных решёток из графеновых лент, пересекающихся под прямым углом, обеспечивают сверхширокую перестройку частоты и угловую стабильность [6]. Ультратонкие метаповерхности на основе матриц прямоугольных и L-образных периодических элементов графена демонстрируют широкополосное преобразование кросс-поляризации при отражении и прохождении электромагнитного излучения [7].

Разработка и изготовление устройств на основе графена зависит от развития средств расчёта на основе точных и адекватных математических моделей, базирующихся на строгом решении уравнений Максвелла совместно с моделью проводимости графена.

Целью данной работы является исследование дифракции электромагнитных волн на графеновых наноструктурах различной конфигурации, направленное на изучение дифракционных явлений, геометрических и размерных эффектов для создания новых плазмонных устройств фотоники и оптоэлектроники на основе графена в терагерцовом диапазоне с использованием строгих математических моделей, базирующихся на решении краевых задач дифракции для уравнений Максвелла совместно с моделью проводимости графена.

В наших работах [10, 11] исследованы двумерные периодические решётки из одиночных квадратных или прямоугольных графеновых полосок в элементарной ячейке на подложках, содержащих диэлектрические и графеновые слои, в терагерцовом диапазоне. Показано, что на частотах резонанса поверхностного плазмон-поляритона эти решётки являются электрически управляемыми поглотителями почти 100% падающей на них энергии. В данной работе исследуются характеристики метаповерхностей, содержащих элементы из нескольких различных графеновых полосок в элементарной ячейке, на многослойных подложках графен—диэлектрик.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ

Объект исследования представляет собой метаповерхность, образованную двухпериодической решёткой из прямоугольных графеновых нанолент конечной длины (см. рис. 1). В элементарной ячейке может быть произвольное число лент (на рис. 1*a* изображены две). Подложка содержит произвольное число диэлектрических и графеновых слоёв (на рис. 1*б* изображены два).

На метаповерхность падает плоская электромагнитная волна. Плоскость падения повёрнута на угол ψ относительно оси x, угол падения θ отсчитывается- от нормали к метаповерхности. Обозначения поляризаций аналогичны принятым в оптике: в случае s-поляризации перпендикулярен



Рис. 1. Схема дифракции ТЕМ-волны на многослойной метаповерхности 1 из элементов нанолент графена 2: (a) топология решётки; (б) элементарная ячейка структуры как автономный блок с каналами Флоке 3 и ориентация падающей ТЕМ-волны 4 с волновым вектором \mathbf{k} ; φ — угол ориентации вектора \mathbf{E} к нанолентам графена; a, b — периоды структуры; w — ширина, l — длина наноленты графена; h — толщина многослойной подложки диэлектрик—графен 5; S_1, S_2 — входные сечения автономного блока с каналами Флоке

плоскости падения вектор напряжённости электрического поля **E**, а в случае *p*-поляризация — вектор напряжённости магнитного поля **H**.

Методы исследования следующие.

1) Монослой графена характеризуется поверхностной проводимостью σ_s , определяемой формулой Кубо [12]. Для графена вводится комплексная диэлектрическая проницаемость, связь между поверхностной (σ_s) и объёмной (σ) проводимостями имеет вид $\sigma = \sigma_s/d$, где d — эффективная толщина графена, $d = 1 \cdot 10^{-9}$ м [12]. Краевую трёхмерную задачу дифракции для уравнений Максвелла с электродинамическими граничными условиями на метаповерхности из элементов нанолент графена (см. рис. 1*a*) решаем на основе декомпозиционного подхода [13]. Элементарную ячейку метаповерхности с неоднородным заполнением в виде элемента из нанолент графена и графен-диэлектрической подложки (см. рис. 1*б*) рассматриваем как автономный блок с каналами Флоке (АБФ) [14]. Дескриптор (в виде матрицы рассеяния **R** или проводимости **Y**) АБФ определяем из решения краевой трёхмерной задачи дифракции проекционным методом Галёркина [15].

2) Вводятся эквивалентные диэлектрическая проницаемость и толщина графена. Краевая задача сводится к решению векторных объёмных интегро-дифференциальных уравнений относи-

тельно напряжённости электрического поля в лентах. Эти уравнения решены методом Галёркина.

3) Графеновые ленты и слои полагаются бесконечно тонкими. На них выполняются импедансные граничные условия в соответствии с моделью Кубо [12]. Краевая задача сводится к решению векторных парных сумматорных уравнений относительно токов на графеновых лентах. Эти уравнения решены методом Галёркина, в котором базисные функции являются полиномами Гегенбауэра.

2. МЕТОД АВТОНОМНЫХ БЛОКОВ С КАНАЛАМИ ФЛОКЕ

Автономные блоки с виртуальными каналами в виде прямоугольных каналов Флоке [14] отличаются от многомодовых [16] и минимальных [17] автономных блоков тем, что в каналах Флоке существуют как ТЕМ-волны, так и высшие волноводные моды, включая и запредельные. Вычислительный алгоритм определения дескриптора (матрицы проводимости **Y**) АБФ построен на основе решения краевой трёхмерной задачи дифракции проекционным методом Галёркина [15].

Сформулируем краевую трёхмерную задачу дифракции для АБФ с включением прямоугольной наноленты графена и виртуальными каналами Флоке на входных сечениях S_1 и S_2 (см. рис. 1). Электромагнитное поле в области графена V должно удовлетворять уравнениям Максвелла, в области вне графена $V_0 - V$ — однородным уравнениям Максвелла, на входных сечениях S_1 и S_2 — условию неасимптотического излучения [18].

Сведём краевую трёхмерную задачу дифракции для $AB\Phi$ с включением прямоугольной наноленты графена и виртуальными каналами Флоке на входных сечениях S_1 и S_2 (см. рис. 1) к проекционной модели в интегральной форме [15]. Используем в качестве проекционного базиса собственные функции (поля $\{E_n\}, \{H_n\}$) прямоугольного резонатора с однородно-периодическими граничными условиями на гранях параллелепипеда (см. рис. 1), полученные из решения краевой трёхмерной задачи на собственные значения.

Из уравнений Максвелла составляем линейную комбинацию уравнений следующего вида:

$$\mathbf{E}_{k}^{*} \operatorname{rot} \mathbf{H} - \mathbf{H} \operatorname{rot} \mathbf{E}_{k}^{*} = i\omega\varepsilon_{0}\varepsilon_{a}\mathbf{E} \mathbf{E}_{k}^{*} - i\omega_{k}\mu_{0}\mathbf{H} \mathbf{H}_{k}^{*},$$

$$\mathbf{E} \operatorname{rot} \mathbf{H}_{k}^{*} - \mathbf{H}_{k}^{*} \operatorname{rot} \mathbf{E} = i\omega_{k}\varepsilon_{0}\mathbf{E} \mathbf{E}_{k}^{*} + i\omega\mu_{0}\mu_{a}\mathbf{H} \mathbf{H}_{k}^{*},$$
(1)

где звёздочка означает комплексное сопряжение; $k = 1, 2, ...; \omega$ и ω_k — круговые частоты, соответствующие полям **E** и **E**_k. Применяя к (1) тождество **b** rot**a** – **a** rot**b** = div(**a** × **b**) и формулу Остроградского—Гаусса, получаем проекционную модель в интегральной форме [15]:

$$\oint_{S_{\Sigma}} (\mathbf{H} \times \mathbf{E}_{k}^{*}) \,\mathrm{d}\mathbf{S} = i\omega\varepsilon_{0} \int_{V_{0}} \varepsilon_{a}\mathbf{E} \,\mathbf{E}_{k}^{*} \,\mathrm{d}V - i\omega_{k}\mu_{0} \int_{V_{0}} \mathbf{H} \,\mathbf{H}_{k}^{*} \,\mathrm{d}V,$$

$$\oint_{S_{\Sigma}} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}_{k}^{*}) \,\mathrm{d}\mathbf{S} = -i\omega\mu_{0} \int_{V_{0}} \mu_{a}\mathbf{H} \,\mathbf{H}_{k}^{*} \,\mathrm{d}V + i\omega_{k}\varepsilon_{0} \int_{V_{0}} \mathbf{E} \,\mathbf{E}_{k}^{*} \,\mathrm{d}V,$$
(2)

где $S_{\Sigma} = S_1 \cup S_2$; $\varepsilon_a = \varepsilon_b$, $\mu_a = \mu_b -$ диэлектрическая и магнитная проницаемости графена в области графена V соответственно; $\varepsilon_a = \varepsilon_0$, $\mu_a = \mu_0$ в области АБФ вне графена $V_0 - V$.

Решение (2) ищем в виде рядов Фурье по системам функций $\{\mathbf{E}_n\}, \{\mathbf{H}_n\}$ (собственные функции прямоугольного резонатора) и $\{\mathbf{e}_{l(\beta)}\}, \{\mathbf{h}_{l(\beta)}\}$ (собственные функции каналов Флоке).

В основной области V_0 АБФ (см. рис. 1*a*)

$$\mathbf{E} = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{a}_n \mathbf{E}_n, \qquad \mathbf{H} = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{b}_n \mathbf{H}_n.$$
(3)

А. М. Лерер, Г. С. Макеева, О. А. Голованов

На входных сечениях S_1 и S_2 АБФ:

$$\mathbf{E}_{\beta} = \sum_{l=1}^{\infty} \tilde{a}_{l(\beta)} \mathbf{e}_{l(\beta)}, \qquad \mathbf{H}_{\beta} = \sum_{l=1}^{\infty} b_{l(\beta)} \mathbf{h}_{l(\beta)}, \qquad \beta = 1, 2.$$
(4)

Подставляя (3), (4) в (2) и учитывая при этом нормировки, получаем следующую систему матричных уравнений:

$$N \mathbf{a} - \mathbf{d} \,\tilde{\mathbf{a}} - \mathbf{B} \,\tilde{\mathbf{b}} = 0;$$

$$M \mathbf{b} - \mathbf{A} \,\tilde{\mathbf{a}} - \mathbf{d} \,\tilde{\mathbf{b}} = 0;$$

$$\mathbf{U} \,\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{b},$$
(5)

где $\mathbf{N}, \mathbf{d}, \mathbf{B}, \mathbf{M}, \mathbf{A}, \mathbf{U}$ — матрицы с элементами

$$N_{kl(\beta)} = \int_{S_{\beta}} (\mathbf{e}_{l(\beta)} \times \mathbf{H}_{k}^{*}) \,\mathrm{d}\mathbf{S}_{\beta};$$

$$d_{kn} = i\omega_{k}\delta_{kn}; \qquad B_{kn} = i\omega\delta_{kn} + i\omega\mu_{0}(\mu_{b} - 1)\int_{V} (\mathbf{H}_{n} \mathbf{H}_{k}^{*}) \,\mathrm{d}V;$$

$$M_{kl(\beta)} = \int_{S_{\beta}} (\mathbf{h}_{l(\beta)} \times \mathbf{E}_{k}^{*}) \,\mathrm{d}\mathbf{S}_{\beta}; \qquad A_{kn} = i\omega\delta_{kn} + i\omega\varepsilon_{0}(\varepsilon_{b} - 1)\int_{V} (\mathbf{E}_{n} \mathbf{E}_{k}^{*}) \,\mathrm{d}V;$$

$$U_{q(\alpha)n} = \int_{S_{\alpha}} (\mathbf{e}_{q(\alpha)} \times H_{n}^{*}) \,\mathrm{d}\mathbf{S}_{\alpha}; \qquad \{\alpha, \beta\} = 1, 2; \qquad \{k, n\} = 1, 2, \dots, N; \qquad \{q, l\} = 1, 2, \dots, L.$$

Здесь N — число базисных функций, учитываемых в объёме V_0 ; L — число базисных функций, учитываемых на входных сечениях АБФ.

Вектор-столбцы $\tilde{\mathbf{a}}$, $\tilde{\mathbf{b}}$, \mathbf{a} , \mathbf{b} (5) составлены из коэффициентов { \tilde{a}_n }, { \tilde{b}_n } и { $a_{l(\beta)}$ }, { $b_{l(\beta)}$ } рядов Фурье (3) и (4).

Исключая вектор-столбцы $\tilde{\mathbf{a}}$, $\tilde{\mathbf{b}}$ из системы алгебраических уравнений, получаем следующее матричное уравнение:

$$\mathbf{b} = [(\mathbf{U} \, \mathbf{Q}^{-1} \, \mathbf{M} - \mathbf{I})^{-1} \, \mathbf{U} \, \mathbf{Q}^{-1} \, \mathbf{A} \, \mathbf{d}^{-1} \, \mathbf{N}] \mathbf{a}, \tag{6}$$

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

Из уравнения (6) получается матрица проводимости **Y** $AB\Phi$ с включением в виде прямоугольной наноленты графена каналов Флоке на входных сечениях (см. рис. 1a):

$$\mathbf{Y} = (\mathbf{U} \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{M} - \mathbf{I})^{-1} \mathbf{U} \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{d}^{-1} \mathbf{N},$$
(7)

где $\mathbf{Q} = \mathbf{d} - \mathbf{A} \mathbf{d}^{-1} \mathbf{B}.$

Матрицу рассеяния S $A E \Phi$ можно получить, используя выражение

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

3. МЕТОД ОБЪЁМНОГО ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим дифракционные планарные решётки, образованные плоскопараллельными диэлектрическими слоями, в некоторых из которых расположены двухмерно-периодические диэлектрические неоднородности. Диэлектрические слои параллельны плоскости z = 0. Периоды

А. М. Лерер, Г. С. Макеева, О. А. Голованов

решётки равны a и b. Решётка гексагональная: одна ось симметрии направлена по оси x, другая образует с осью y угол ζ . В данной работе рассмотрены неоднородности, сечения которых представляют собой прямоугольники, размеры которых могут зависеть от z. Задача сводится к решению векторных интегро-дифференциальных уравнений [14]

$$\mathbf{E}(x,y,z) = \mathbf{E}^{\text{ext}}(x,y,z) + \frac{1}{ab} \int_{V} d\nu' \bar{\tau} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \mathbf{G}_{p,q}(z,z') \mathbf{E}(x',y',z') \exp[i(\alpha_{p}\bar{x} + \beta_{p,q}\bar{y})], \quad (8)$$

где $x, y, z \in V$; $\bar{x} = x - x', \bar{y} = y - y', \alpha_p = (2p\pi/a) + k_x, \beta_{p,q} = (2q\pi/b) + k_y + (2p\pi/a) \operatorname{tg} \zeta, k_x$ и k_y проекции волнового вектора, V - объём неоднородностей (в одной элементарной ячейке может быть несколько неоднородностей); $\bar{\tau} = (\varepsilon - \varepsilon^{\operatorname{ext}})/\varepsilon^{\operatorname{ext}}$; ε и $\varepsilon^{\operatorname{ext}} -$ диэлектрические проницаемости тела и слоя с координатой z' соответственно. Если неоднородности представляют собой этографеновые полоски, то они заменяются диэлектрическими с эквивалентными ε и толщиной [11]. Элементы дифференциального тензорного ядра $\mathbf{G}_{p,q}(z, z')$ получены способом, описанным в работе [19].

Величина **E**^{ext} есть напряжённость внешнего электрического поля, под которым подразумеваем поле, полученное в результате решения задачи об отражении плоской волны от исследуемой структуры, в которой нет неоднородностей.

Неизвестные в (8) — это компоненты вектора напряжённости электрического поля внутри неоднородностей. Базисные функции в методе Галёркина следующие: по вертикальной координате z (так же, как и в работе [19]) это сплайны 1-го порядка; по поперечным координатам x, y — полиномы Лежандра:

$$P_m\left[\frac{2x'}{l_x(z)}\right]P_n\left[\frac{2y'}{l_y(z)}\right],$$

где $m = 0, 1, ...; n = 0, 1, ...; l_x(z), l_y(z)$ — поперечные размеры прямоугольного сечения неоднородности, зависящие от вертикальной координаты z; x', y' — поперечные координаты, связанные с осями неоднородности.

4. МЕТОД ПРИБЛИЖЁННЫХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

Структура решётки описана выше, но неоднородности — это графеновые полоски, на которых выполняются граничные условия

$$H_{\rm tg}^+ - H_{\rm tg}^- = (\sigma/2) \left[{\bf n}, ({\bf E}_{\rm tg}^+ + {\bf E}_{\rm tg}^-) \right], \qquad {\bf E}_{\rm tg}^+ = {\bf E}_{\rm tg}^-$$

где
п-нормаль к плёнке, символами «+»
и «-» обозначены компоненты поля сверху и снизу плёнки соответственно.

Эти приближённые граничные условия введены для неограниченных по длине и ширине графеновых слоёв, они широко используются для решения задач рассеяния на ограниченных полосках.

Известными методами (см., например, [20]) нетрудно получить парные суммарные уравнения относительно неизвестной плотности тока на полосках $\mathbf{j}(x, y)$:

$$\frac{1}{ab}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\mathbf{g}_{p,q}\mathbf{J}_{p,q}\exp[i(\alpha_p x + \beta_{p,q} y)] + i\frac{k}{Z_0\sigma}\mathbf{j}(x,y) = i\frac{k}{Z_0}\mathbf{E}^{\text{ext}}(x,y,0), \qquad x,y \in S;$$
(9)

$$\frac{1}{ab}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\mathbf{J}_{pq}\exp[i(\alpha_p x + \beta_{p,q} y)] = 0, \qquad x, y \in S,$$
(10)

А. М. Лерер, Г. С. Макеева, О. А. Голованов

где z_0 и k — волновое сопротивление и волновое число в вакууме соответственно, S — поверхность, занимаемая полосками, расположенными в одной элементарной ячейке решётки, σ — поверхностная проводимость графена, определяемая формулой Кубо;

$$\mathbf{J}_{p,q} = \int_{S} \mathbf{j}(x,y) \exp[-i(\alpha_p x + \beta_{p,q} y)] \,\mathrm{d}s.$$

Тензор $\mathbf{g}_{p,q}$ определяется так же, как $\mathbf{G}_{p,q}(z,z')$ в случае, когда точки наблюдения (z) и истока (z') расположены в одной плоскости. Компоненты тензора $\mathbf{g}_{p,q}$ для четырёхслойной структуры приведены в работе [21].

Решение парных суммарных уравнений (8) и (9) ищем методом Галёркина. Токи на полосках запишем в виде

$$j_x(x,y) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} X_{mn} C_m^{3/2} \left(\frac{2x'}{l_x}\right) \left[1 - \left(\frac{2x'}{l_x}\right)^2\right] P_n\left(\frac{2y'}{l_y}\right),$$
(11)

$$j_y(x,y) = \sum_{m=1=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} Y_{mn} P_m\left(\frac{2x'}{l_x}\right) C_n^{3/2}\left(\frac{2y'}{l_y}\right) \left[1 - \left(\frac{2y'}{l_y}\right)^2\right],$$
(12)

где x', y' — поперечные, координаты, связанные с осями полоски, X_{mn}, Y_{mn} — неизвестные коэффициенты, $C_n^{3/2}$ — полиномы Гегенбауэра. Токи вне полосок равны нулю. Поэтому уравнение (10) выполняется тождественно. Подставляем (11), (12) в (9) и проецируем на базисные функции. В результате получим систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов X_{mn}, Y_{mn} . Все интегралы в матричных элементах этой системы находятся аналитически.

5. ДИФРАКЦИЯ ТЕМ-ВОЛНЫ НА МЕТАПОВЕРХНОСТИ ИЗ ПРЯМОУГОЛЬНЫХ НАНОЛЕНТ ГРАФЕНА НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ СЛОЕ

С помощью вычислительного алгоритма, разработанного методом АБФ [14], проведено математическое моделирование дифракции ТЕМ-волны на метаповерхности из прямоугольных нанолент графена на диэлектрическом слое (см. рис. 1) в зависимости от химического потенциала с учётом геометрических и размерных эффектов в терагерцовом диапазоне частот.

Результаты расчёта частотных зависимостей коэффициента прохождения $|S_{21}|^2$ ТЕМ-волны через метаповерхность из прямоугольных нанолент графена (для плазмонных мод 1, 2 и 3-го порядков) при различных значениях химического потенциала μ_c приведены на рис. 2*a*.

На рис. 26 показаны частотные зависимости коэффициента прохождения $|S_{21}|$ через метаповерхность из прямоугольных нанолент графена конечной длины при различных значениях отношения l/a длины нанолент l к периоду решётки.

Из результатов моделирования (см. рис. 2*a*) следует, что спектр прохождения TEM-волны имеет минимумы поглощения в интервале частот 6÷11 ТГц и на более высоких частотах терагерцового диапазона.

Минимумы коэффициента прохождения $|S_{21}|$ расположены на характерных частотах, обусловленных резонансами фундаментальной моды и мод высшего порядка поверхностных плазмонполяритонов, образующих стоячую волну в ограниченном графеновом элементе (нанолентах графена конечной длины). Из-за большого коэффициента замедления поверхностного плазмонполяритона резонансные размеры графенового элемента много меньше длины волны в вакууме. При



Рис. 2. Частотные зависимости коэффициента прохождения $|S_{21}|^2$ ТЕМ-волны через метаповерхность из прямоугольных нанолент графена на диэлектрическом слое: (a, δ, ϵ) для плазмонных мод 1, 2 и 3-го порядков соответственно при различных значениях химического потенциала: $\mu_c = 0.4$ эВ (кривые 1), 0,5 эВ (2), 0,6 эВ (3); $\varepsilon = 4$; (ϵ) — зависимость $|S_{21}|$ от частоты при $l/a \rightarrow 1$, $\varepsilon = 2.2$; $\mu_c = 0.6$ эВ; w = 1 мкм, b = 2 мкм, a = 10 мкм, h = 1 мкм, $\varphi = 90^\circ$

увеличении значения химического потенциала ($\mu_c = 0 \div 1$ эВ) частоты минимумов коэффициента прохождения $|S_{21}|$ ТЕМ-волны сдвигаются (см. рис. 2a-6), т. е. рабочие частоты управляются изменением химического потенциала μ_c .

Из графиков (см. рис. 2*г*) следует, что значение минимума коэффициента прохождения $|S_{21}|$ через метаповерхность зависит также и от длины прямоугольных нанолент графена и только при $l/a \ge 0.95$ результаты решения трёхмерной задачи дифракции и двумерной задачи дифракции на одномерной решётке нанолент графена (с соответствующими геометрическими размерами и параметрами) совпадают.

Из полученных результатов математического моделирования следует, что спектр коэффициента прохождения TEM-волны через метаповерхность имеет минимумы, их положение и значение управляются изменением химического потенциала (приложением внешнего электрического поля) в широком интервале частот терагерцового диапазона, а с уменьшением геометрических размеров прямоугольников графена (от микро- к наноразмерам) и при увеличении плотности упаковки двумерной структуры эти минимумы сдвигаются к верхней границе терагерцового диапазона (т. е. к началу ближнего инфракрасного диапазона).

Результаты расчёта коэффициента прохождения $|S_{21}|$ TEM-волны через метаповерхность из прямоугольных нанолент графена на диэлектрическом слое (двуокись кремния SiO₂) в зависимости от частоты при различных значениях угла φ ориентации вектора **E** падающей TEM-волны к нанолентам графена в диапазоне частот 24÷32 ТГц показаны на рис. За и б соответственно.

При изменении угла ориентации вектора электрического поля **E** падающей TEM-волны от $\varphi = 0$ (вектор **E** параллелен нанолентам графена) до $\varphi = 90^{\circ}$ (вектор **E** перпендикулярен нанолентам графена) коэффициент прохождения $|S_{21}|$ через метаповерхность из прямоугольных нанолент графена существенно уменьшается (см. рис. 3*a*). При $\varphi = 0^{\circ}$ значение $|S_{21}|$ близко к единице (т. е. наблюдается практически полное прохождение волны через структуру). При $\varphi = 90^{\circ}$

А. М. Лерер, Г. С. Макеева, О. А. Голованов



Рис. 3. Зависимости коэффициента прохождения $|S_{21}|$ ТЕМ-волны через метаповерхность из прямоугольных нанолент графена на диэлектрическом слое SiO₂: (*a*) от частоты (при различных значениях угла φ); (*б*) от угла φ ориентации падающей ТЕМ-волны к нанолентам графена на частоте f = 28,3 ГГц: $\mu_c = 0.57$ эВ, a = 2 мкм, l/a = 0.9, b = 0.2 мкм; w = 0.1 мкм, h = 0.5 мкм, $\varepsilon = 2.2$

значение $|S_{21}|$ минимальное (-22 дБ) на частоте f = 28,3 ГГц при $\mu_c = 0,57$ эВ.

При нормальном падении ТЕМ-волны частота резонанса фундаментальной моды поверхностного плазмон-поляритона равна f = 28,3 ТГц (см. рис. 3a; при данных геометрических размерах нанолент графена и периода структуры для значения химического потенциала $\mu_c = 0,57$ эВ). При изменении угла φ от 0° до 90° наблюдается уменьшение значения минимума $|S_{21}|$ и смещение его положения в сторону более высоких частот (см. рис. 3a).

Расчётные зависимости модуля коэффициента прохождения $|S_{21}|$ TEM-волны через метаповерхность из прямоугольных нанолент графена на диэлектрическом слое SiO₂ от угла φ ориентации вектора **E** падающей TEM-волны к нанолентам графена на частоте f = 28,3 TГц показаны на рис. 36. Из них следует, что при изменении ориентации вектора электрического поля падающей TEM-волны от параллельной до перпендикулярной нанолентам графена коэффициент прохождения существенно уменьшается и в полосе непропускания на резонансной частоте метаповерхность из прямоугольных нанолент графена может рассматриваться как поляризатор в терагерцовом диапазоне частот.

6. ДИФРАКЦИЯ НА ОДНОСЛОЙНЫХ И МНОГОСЛОЙНЫХ МЕТАПОВЕРХНОСТЯХ ИЗ СВЯЗАННЫХ ГРАФЕНОВЫХ ПОЛОСОК

На рис. 4–5 приведены результаты исследования частотных характеристик элементов матрицы рассеяния $R = |S_{11}|^2$, $T = |S_{21}|^2$, потерь P = 1 - R - T и токов на простой метаповерхности, содержащей в подложке только один диэлектрический слой с толщиной h = 25 мкм. В одной элементарной ячейке имеются две графеновые полоски, связанные по широкой стороне. Расстояние между полосками равно d. Плоскость падения перпендикулярна широким сторонам полосок. При *s*-поляризации падающей волны электрическое поле перпендикулярно плоскости падения, магнитное поле лежит в плоскости падения. При *p*-поляризации — наоборот.

При *s*-поляризации падающей волны токи направлены вдоль широких стенок полосок. Плотность тока резко уменьшается к краям. Поэтому для *s*-поляризации резонансная частота близка к резонансной частоте решётки из одиночных графеновых полосок и слабо зависит от величины зазора (см. рис. 4). Следует отметить, что резонансная длина волны равна $\lambda_r \approx 300$ мкм, $\lambda_r/2 \approx 3l_1 (l_1 - длина 1-й полоски)$. Это свидетельствует о большом коэффициенте замедления поверхностного плазмон-поляритона, распространяющегося в графеновой полоске. Коэффициент

А. М. Лерер, Г. С. Макеева, О. А. Голованов



Рис. 4. Частотные зависимости коэффициентов отражения (по мощности) R (кривые 1), прохождения T (2) и поглощения P (3) при дифракции на метаповерхности из двух идентичных прямоугольных нанолент графена в ячейке на диэлектрическом слое; $\psi = 90^{\circ}$, $\theta = 0$. Периоды решётки a = b = 70 мкм; w = 20 мкм, l = 50 мкм, $\mu_c = 0.25$ эВ, h = 25 мкм, $n_d = 1.77$. Параметры графена: T = 300 К, $\tau = 1$ пс; d = 1 мкм (a) и 10 мкм (b). Здесь и далее линии без символов соответствуют *s*-поляризации, с символами — *p*-поляризации

замедления зависит от проводимости графена и параметров окружающих его слоёв диэлектрика. Поэтому при заданной геометрии можно регулировать резонансную частоту и потери.

Для *p*-поляризации имеет место резонанс тока вдоль узкой стороны полосок. Максимум плотности тока достигается на краю полосок вблизи зазоров. Резонансная частота при этом, естественно, больше, чем резонансная частота при *s*-поляризации. Эта частота зависит от зазора и увеличивается при его уменьшении. При малых расстояниях между графеновыми полосками (см. рис. 4*a*) появляется низкочастотный резонанс, близкий по частоте к резонансу для *s*-поляризации.

Таким образом, резонансные частоты при дифракции плоской электромагнитной волны на метаповерхности из связанных графеновых полосок существенно зависят от поляризации падающей волны, геометрии элементов в ячейке и размеров графеновых нанолент, а также расстояния между ними.

На рис. 5 изображены величины плотности поверхностных токов в графеновых полосках, текущих вдоль направления поля \mathbf{E} падающей волны. Амплитуда тока в перпендикулярном направлении на несколько порядков меньше. Для оценки средней плотности токов нужно разделить ток на ширину полоски в направлении, перпендикулярном току. Кривые нормированы на максимум кривой 5. При резонансе поверхностного плазмон-поляритона в ограниченном графеновом элементе резко возрастают плотность энергии вблизи слоя, плотность тока и потери. Плотность тока и напряжённость поля в графеновых полосках при резонансе волны с p-поляризацией почти в 2 раза выше плотности тока в решётке из одиночных полосок. При уменьшении зазора плотность тока, а значит и напряжённость ближнего поля растут. Ещё большее увеличение тока достигается при связи полосок по узкой стороне.

Увеличение поглощения в графеновых полосках при резонансе позволяет создать компактные поглотители в терагерцовом диапазоне частот из двупериодической системы из прямоугольных графеновых лент. У прямоугольной полоски продольный и поперечный резонансы разнесены по частоте. Поэтому при низкочастотном продольном резонансе коэффициент R отражения по мощности волны с *s*-поляризацией вдоль длинной стороны полоски близок к нулю, а у ортогональной поляризации R больше 0,7. Таким образом, графеновая поверхность является также поляризатором с развязкой между волнами с различными поляризациями по коэффициенту отражения более 20 дБ. Указанные свойства сохраняются в достаточно широком интервале углов падения ±45°. Для повышения широкополосности устройства предлагается в одной элементарной ячейки периодической структуры располагать 2÷3 параллельные графеновые полоски с



Рис. 5. Нормированная величина поверхностных токов на графеновых нанолентах при l = 50 мкм и $\mu_c = 0.25$ эВ. Кривая 1 соответствует одиночной полоске (w = 50 мкм), кривые 2–5 — связанным полоскам (w = 25 мкм). Кривая 2 отвечает *s*-поляризации (d = 10 мкм), 3 - p-поляризации (d = 10 мкм), 4 - s-поляризации (d = 1 мкм), 5 - p-поляризации (d = 1 мкм). Периоды решётки a = b = 70 мкм

различными, но близкими длинами. Тогда несколько близких по частоте плазмонных резонансов поглощения сливаются в один с относительной шириной около 20% по уровню поглощения 90%. На резонансную частоту прежде всего влияют параметры графена, периоды решётки и длина полосок. На локализацию поля вблизи полосок, а значит, и на величину потерь влияют толщины диэлектрических слоёв. Эти слои можно назвать согласующими слоями. Выбор параметров этих слоёв — одна из задач синтеза метаповерхностей.

Некоторые полученные результаты приведены на рис. 6–8. Структура метаповерхностей представляет собой двупериодическую решётку из графеновых полосок, восемь слоёв из чередующихся слоёв диэлектрика (с толщиной $h_d = 25$ мкм и показателем преломления $n_d = 1,77$) и графена. Подложка (с показателем преломления n = 1,45) конечной толщины или полубесконечная. Как показали расчёты, толщина последнего слоя подложки не сильно влияет на приведённые ниже характеристики. При резонансе влияние толщины подложки этого слоя практически нулевое. Параметры графена $\mu_c = 0,35$ эВ, T - 300 K, время релаксации $\tau = 1$ пс. Периоды решётки составляют 70 мкм.

На многослойной метаповерхности с двумя прямоугольными графеновыми полосками в элементарной ячейке для *s*-поляризованной волны, как и в метаповерхности из квадратных полосок [10, 11], наблюдается эффект почти полного резонансного поглощения. Резонансные частоты определяются длиной полосок. Для ортогональной поляризации резонансы сдвинуты в сторону бо́льших частот вправо. При частоте 0,6 ТГц развязка по коэффициенту отражения для волн разной поляризации составляет около 15 дБ (см. рис. 6).

Если в элементарной ячейке расположены две прямоугольные графеновые полоски разной, но близкой длины, наблюдаются два близко расположенных резонанса поглощения (см. рис. 6). Как отмечено выше, этот эффект позволяет увеличить широкополосность поглотителя (см. рис. 7).

В программе предусмотрены возможности как поворота плоскости падения ψ , так и изменения угла падения θ . Как видно из предыдущих графиков, в полосе непрозрачности для *s*-поляризованной волны коэффициент отражения R близок к нулю, а у *p*-поляризованной волны коэффициент R большой. Для обеих поляризаций коэффициент прохождения мал. Поэтому



Рис. 6. Частотные зависимости коэффициентов отражения (R), прохождения (T) и поглощения (P) при дифракции на многослойной графеновой метаповерхности из двух прямоугольных нанолент графена в ячейке. Номера кривых такие же, как на рис. 4. Расстояние между полосками d = 10 мкм, $w_1 = w_2 = 20$ мкм. Полоски имеют разную длину $(l_1 = 50$ мкм, $l_2 = 40$ мкм, a) и одинаковую длину $(l_1 = l_2 = 50$ мкм, $\delta)$



Рис. 7. Сравнение коэффициентов поглощения для трёх типов графеновых метаповерхностей: одна графеновая полоска в элементарной ячейке (кривая 1), две одинаковые полоски (2), две полоски разной длины (3). Размеры указаны на рис. 6



Рис. 8. Частотные зависимости коэффициентов отражения (R) и поглощения (P) при дифракции на многослойной графеновой метаповерхности из двух прямоугольных нанолент графена в ячейке при различных углах падения. Размеры лент соответствуют рис. 6 δ . Кривые 1–3 показывают коэффициент отражения R при углах падения $\theta = 0^{\circ}$, 30° , 60° ; кривые 4– δ — коэффициент потерь P при углах $\theta = 0^{\circ}$, 30° , 60°

рассматриваемые многослойные графеновые метаповерхности могут работать как поляризаторы только на отражение. Чтобы разнести падающие и отражённые лучи, угол падения θ не дол-

А. М. Лерер, Г. С. Макеева, О. А. Голованов

жен быть нулевым. Как видно из рис. 8, эффект полного поглощения и поляризация отражённой волны наблюдаются в широком диапазоне углов падения, что обусловливает нечувствительность терагерцовых поглотителей и поляризаторов на основе многослойных графеновых метаповерхностей к углам падения поляризованной волны.

Также рассчитаны характеристики поглотителей и в других частотных диапазонах от 0,2 до 3,0 ТГц. В диапазоне 0,2÷1,5 ТГц удаётся получить поглощение не менее 90% в полосе 30%. В более высоких диапазонах также наблюдается резонансное поглощение, но его максимум составляет величину меньше 90% и снижается с увеличением частоты. Это обусловлено плавным уменьшением действительной и мнимой частей поверхностной проводимости графена.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Тремя электродинамическими методами решены задачи дифракции плоских электромагнитных волн на графеновых метаповерхностях двумерных периодических решёток из элементов прямоугольных графеновых нанолент, расположенных на подложках, содержащих диэлектрические и графеновые слои. Расчёт разными методами расширяет круг решаемых задач электродинамики графеновых структур, позволяет перейти к рассмотрению нелинейных задач. Кроме того, расчёт устройств независимыми методами подтверждает достоверность теоретических результатов.

Как показывают результаты моделирования, метаповерхности, содержащие элементы из двух прямоугольных графеновых полосок в элементарной ячейке на многослойных подложках из чередующихся слоёв диэлектрика и графена, являются эффективными электрически управляемыми поглотителями в терагерцовом диапазоне частот, поглощающими почти 100% падающей на них энергии при резонансе поверхностного плазмон-поляритона.

Для *s*-поляризации падающей волны резонансные частоты определяются длиной графеновых полосок, для ортогональной ей *p*-поляризации резонансы сдвинуты в сторону более высоких частот. Развязка по коэффициенту отражения для волн разной поляризации около 15 дБ. Показано, что эффект полного поглощения и поляризации отражённой волны наблюдается в широком диапазоне углов падения. Это определяет возможность создания нечувствительных к углам падения терагерцовых поляризаторов, работающих в режиме отражения.

Если в элементарной ячейке расположены две графеновые полоски разной, но близкой длины, наблюдаются два близко расположенных резонанса поглощения. Этот эффект позволяет увеличить широкополосность терагерцового поглотителя.

Из результатов расчёта также следует увеличение ближнего поля в решётке из двух графеновых полосок, разделённых малым зазором, при поляризации падающего поля поперек зазора (аналог оптических антенн).

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чернозатонский Л. А., Сорокин П. Б., Арт А. А. // Усп. хим. 2014. Т. 83, № 3. С. 251.

2. Chen P.-Y., Soric J. Y., Padooru R., et al. // New J. Phys. 2013. V. 15. Art. no. 123029.

3. Liu Ch., Bai Y., Zhou J., et al. // J. Korean Phys. Soc. 2017. V. 54, No. 5. P. 349.

4. Rahmanzadeh M., Rajabalipanah H., Abdolali A. // Appl. Opt. 2018. V. 57. P. 959.

5. Peng L., Li X. M., Liu X., et al. // Nanoscale Adv., 2019. No. 1. P. 1452.

6. Ye L., Zeng F., Zhang Y., et al. // Nanomaterials. 2018. V. 8, No. 10. P. 834.

7. Guo T., Argyropoulos C. // Opt. Lett. 2016. V. 41, No. 23. P. 5 592.

- 8. Fallahi A., Perruisseau-Carrier J. // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. Art.no. 195408.
- 9. Zhang Y., Feng Y., Zhu B., et al. // Opt. Express. 2014. V. 22, No. 19. Art. no. 22743.
- 10. Лерер А. М., Макеева Г. С. // Письма в журн. техн. физики. 2018. Т. 44, № 18. С. 103.
- 11. Лерер А. М., Макеева Г. С. // Опт. спектроскопия. 2018. Т. 125, № 6. С. 838.
- 12. Hanson G. W. // J. Appl. Phys. 2008. V. 103. Art.no. 064302.
- Никольский В. В. Декомпозиционный подход к задачам электродинамики. М.: Наука, 1983. 297 с.
- 14. Голованов О. А. // Радиотехника и электроника. 2006. Т. 51, № 12. С. 1423.
- 15. Никольский В. В. Проекционные методы в электродинамике: Сб. науч.-метод. ст. по прикладной электродинамике. М.: Высш. шк., 1977. С. 4.
- 16. Никольский В.В., Голованов О.А. // Радиотехника и электроника. 1980. Т. 25, № 3. С. 751.
- 17. Никольский В.В., Лаврова Т.И. // Радиотехника и электроника. 1978. Т. 23, № 2. С. 240.
- 18. Голованов О. А. // Радиотехника и электроника. 1990. Т. 35, № 9. С. 1853.
- 19. Лерер А. М. // Радиотехника и электроника. 2012. Т. 57, № 11. С. 1160.
- 20. Кравченко В. Ф., Лабунько О. С., Лерер А. М., Синявский Г. П. Вычислительные методы в современной радиофизике. М.: Физматлит, 2009. 464 с.
- 21. Лерер А. М. Иванова И. Н. // Радиотехника и электроника. 2016. Т. 61, № 5. С. 435.

Поступила в редакцию 15 мая 2019 г.; принята в печать 30 октября 2019 г.

DIFFRACTION OF ELECTROMAGNETIC WAVES BY MULTILAYER GRAPHENE METASURFACES IN THE TERAHERTZ FREQUENCY BAND

A. M. Lerer, G. S. Makeeva, and O. A. Golovanov

We perform mathematical modeling of diffraction of plane electromagnetic waves by multilayer metasurfaces comprised by elements of graphene nanoribbons. The modeling is based on solving the three-dimensional boundary-value diffraction problem by three methods, specifically, those of selfcontained units with Floquet channels, the volume integro-differential equation, and approximated boundary conditions. The coefficients of reflection, transmission, and absorption of *s*- and *p*-polarized waves by metasurfaces made of elements of rectangular graphene nanoribbons have been calculated as functions of the frequency, as well as the incidence angle, for various values of the chemical potential with allowance for the geometric and dimensional effects in the terahertz frequency band. It is shown that at the resonance frequencies of the surface plasmon polariton, multilayer metasurfaces comprised by two graphene strips in an elementary cell on substrates, which contain layers of a dielectric and graphene, are electrically controlled efficient wideband terahertz absorbers and polarizers in the reflection regime that are insensitive to incidence angles.