

石墨烯-介质纳米线混合波导亚波长传输特性

滕达^{1*}, 方弘历¹, 严建军¹, 王安然¹, 姜满¹, 梁冰寒¹, 杨香丽¹, 胡雪梅¹, 管子怡¹, 田原铭¹, 王凯^{2**}¹郑州师范学院物理与电子工程学院, 河南, 郑州 450044;²中国科学院上海技术物理研究所红外成像材料与探测器重点实验室, 上海 200083

摘要 设计了一种由圆形硅纳米线和涂覆石墨烯的三角形纳米线组成的混合等离子体波导结构, 采用有限元方法研究了该波导中的基模场分布和亚波长传输特性。利用硅纳米线波导周围的倏逝波与石墨烯的耦合, 大幅提升了等离子体波导的亚波长传输性能。研究结果表明, 三角形顶角大小、间隙距离、石墨烯费米能级等对模式的传输特性有很大影响。所设计的波导结构具有强光场局域、低损耗传播和高品质因数等优点。与同类型结构相比, 所设计的波导综合性能更优, 有望应用于波导集成型等离子体光器件中, 如调制器、纳米激光器等。

关键词 光学器件; 波导; 石墨烯等离子体; 红外波

中图分类号 O436 文献标志码 A

DOI: 10.3788/CJL220958

1 引言

随着表面等离子体研究的不断深入, 研究人员发现传统金属材料等离子体存在中远红外波段光场局域特性差、性能不可调控等问题^[1-2]。因此, 探寻新型等离子体材料显得尤为重要。近年来, 研究人员发现一系列新型等离子体材料, 如透明导电氧化物^[3]、氮化物^[4]、石墨烯^[5-6]、二硫化钼^[7-9]、狄拉克半金属^[10-12]等。其中, 石墨烯能激发强光场局域的等离子体模式, 同时性能可调。石墨烯^[13]是一种新型单原子层二维材料, 其能带结构中的价带和导带位于狄拉克点, 即禁带宽度为零。可见光波段的单层石墨烯光吸收率仅为 2.3%。特别地, 光吸收率可以通过改变费米能级来进行调控^[14-15]。因上述独特的电学和光学特性, 基于石墨烯的光电器件展现出优异的应用前景, 并吸引了大量科研人员的关注。近期, 理论和实验研究均表明, 石墨烯可激发红外波段等离子体模式, 且具有独特的等离子体特性, 如强场局域和可调谐性^[5]。随后, 有关石墨烯等离子体(GPs)及其他二维材料等离子体的研究大量涌现, 并推动了其在高性能亚波长光子器件领域中的应用, 如调制器、纳米波导、光电探测器、偏振器、耦合器、光开关等^[16-18]。

作为亚波长光子集成的重要组成部分, 石墨烯等离子体纳米波导^[19-20]更是受到广泛关注。2008年, Hanson^[21]提出了石墨烯平行平板波导, 发现这类波导与金属平行平板波导类似, 且模式特性可调谐。早期

相关研究集中在平面型石墨烯等离子体波导, 如石墨烯纳米带^[22]、介质加载石墨烯波导^[5, 23]等。2014年, 任国斌课题组建立了涂覆石墨烯层的圆形纳米线(GNW)波导模本征方程, 开拓了曲面石墨烯等离子体波导研究的新方向^[24]。同年, 童利民课题组实验验证了GNW作为纳米光子器件的可能性^[25]。近期, 研究人员提出多种基于GNW的混合等离子体波导, 如GNW-电介质-GNW^[26-29]、GNW-SiO₂-Si^[30-31]结构等, 其归一化模式场面积为~10⁻⁵量级, 同时传播距离在10 μm左右。值得注意的是, Wu等^[32]提出了基于三角形介质衬底的GNW结构, 将归一化模式场面积减小至~10⁻⁷量级, 但是这种强光场局域是以牺牲传播距离为代价换取的, 如频率为30 THz且石墨烯费米能级为0.8 eV时, 该波导传播距离仅为8 μm。尽管近期的研究在该领域取得了一系列进展, 但是如何在场约束和传输损耗之间取得更好的平衡仍然是一个挑战。

本文提出了一种石墨烯-介质纳米线混合波导, 将GNW与绝缘硅(SOI)相结合^[33-34], 利用Si波导周边的倏逝波增强石墨烯-光的相互作用, 制备了波导集成型石墨烯等离子体光器件。该方法不仅提升了石墨烯波导性能, 且与硅光子技术相兼容, 有望应用于亚波长波导集成型等离子体光器件中, 如调制器、纳米激光器等。

2 理论模型

图1为所设计波导的结构示意图, 由涂覆石墨烯

收稿日期: 2022-06-10; 修回日期: 2022-06-16; 录用日期: 2022-07-01; 网络首发日期: 2022-07-11

基金项目: 上海市自然科学基金(20ZR1466200, 21ZR1474000)、河南省高等学校重点科研项目计划(21A140029)、郑州师范学院青年骨干教师培养项目(QNGG-20774)、郑州师范学院科研启动专项经费、郑州师范学院开放研究基金、郑州师范学院大学生科研创新基金(2021003)、河南省自然科学基金项目(222300420378)

通信作者: *tengda@zznu.edu.cn; **wangkai@mail.sitp.ac.cn

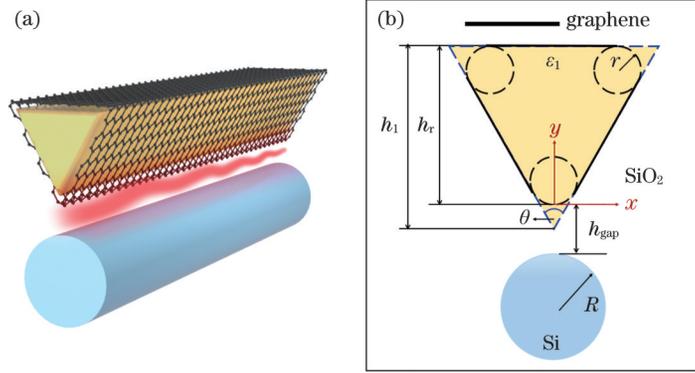


图 1 波导结构示意图。(a) 三维截面示意图；(b) 二维截面示意图

Fig. 1 Structural diagrams of waveguide. (a) Three-dimensional section diagram; (b) two-dimensional section diagram

层的三角形纳米线(介电常数为 ϵ_1)和圆形 Si(介电常数为 $\epsilon_{\text{si}}=11.9$)纳米线波导组成,间隙区域填充 SiO_2 (介电常数为 $\epsilon_{\text{silica}}=2.25$)。三角形纳米线的高度 $h_1=100\text{ nm}$,顶角为 θ ,用半径为 r 的圆角圆滑三角形三个角,如图 1(b)虚线圆所示。此时,三角形纳米线的实际高度为 $h_c=h_1-r/\sin(\theta/2)+r$ 。圆形 Si 纳米线的半径为 R ,与圆滑之后的三角形纳米线的间距为 h_{gap} 。器件制备流程为:首先采用物理(如激光烧蚀)或化学沉积技术生长半径为 R 的 Si 纳米线^[35];其次,已报道研

究证实可采用化学气相沉积方法生长顶角为锐角且高为 100 nm 左右的三角形截面纳米线^[36],采用文献[25]中石墨烯涂覆介质纳米线的方法制备涂覆石墨烯层的三角形纳米线;最后,将 Si 纳米线转移至 SiO_2 基底上,并沉积厚度为 $2R+h_{\text{gap}}$ 的 SiO_2 薄层,再将涂覆石墨烯层的三角形纳米线转移至 SiO_2 薄层上,并在周围沉积 SiO_2 。

本文所采用的石墨烯光学电导率(σ_g)由随机相位近似估算^[37-38],即

$$\sigma_g = \frac{2ie^2k_B T}{\pi\hbar^2(\omega + i/\tau)} \ln \left[2\cosh\left(\frac{E_F}{2k_B T}\right) \right] + \frac{e^2}{4\hbar} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\hbar\omega - 2E_F}{2k_B T}\right) - \frac{i}{2\pi} \ln \frac{(\hbar\omega + 2E_F)^2}{(\hbar\omega - 2E_F)^2 + (2k_B T)^2} \right], \quad (1)$$

式中: T 为绝对温度; k_B 为玻尔兹曼常数; \hbar 为约化的普朗克常数; $e=1.6\times 10^{-19}\text{ C}$ 为元电荷; ω 为角频率; $\tau=n_c E_F/(eV_F^2)$ 为电子弛豫时间^[39],其中 n_c 为石墨烯中的载流子迁移率, $V_F=10^6\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 为费米速度; $E_F\approx\hbar V_F\sqrt{n_0\pi}$ 为石墨烯费米能级^[40],可以通过直流偏压或化学掺杂对其进行调节。根据最新研究,石墨烯中载流子密度 n_0 可达 $2.5\times 10^{14}\text{ cm}^{-2}$ ^[41],对应费米能级 $E_F=1.8\text{ eV}$ 。故本文 E_F 取值范围为 $0.4\sim 1.4\text{ eV}$ 。如无特殊说明,本文中 $T=300\text{ K}$, $E_F=0.6\text{ eV}$, $n_c=10^4\text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ ^[42]。计算中,石墨烯层可用纳米线表面电流表示,即 $J=\sigma_g E$,其中 J 为表面电流密度, E 为电场矢量;也可用 0.5 nm 或 1 nm 厚度的几何薄层表示(对应多层石墨烯),并对薄层进行网格划分。前者可大幅节约计算资源,且两种方法的计算结果的相对偏差小于 1% ,详见参考文献[43]。

为了研究波导亚波长传输性能,假设等离子激元模式沿 z 方向传播,电场变化规律为 $\exp(i\beta z)\exp(-i\omega t)$,其中传播常数 $\beta=k_0 N_{\text{eff}}$, N_{eff} 由有限元软件 COMSOL 计算得到,其实部 $\text{Re}(N_{\text{eff}})=n_{\text{eff}}$ (n_{eff} 为有效模式系数)与色散有关,虚部 $\text{Im}(N_{\text{eff}})$ 与损耗有关。计算域为 $2\lambda_0\times 2\lambda_0$, λ_0 为自由空间波长。计算域外部采用完美电导体边界,且采用完美吸收层避免边界处的电磁场反射。同时,进行了收敛性分析,确保网格和边界对结果

无影响。本文仅考虑石墨烯的固有损耗,传播距离 $L_p=1/[k_0\text{Im}(N_{\text{eff}})]$,其中 $k_0=2\pi/\lambda_0$ 。归一化模场面积定义为 $A_N=A_{\text{eff}}/A_0$,其中等效模式场面积 $A_{\text{eff}}=\iint W(\rho)d^2\rho/\max[W(\rho)]$,衍射受限光场面积 $A_0=\lambda_0^2/4$, $W(\rho)$ 为电磁能量密度^[44-46], ρ 为位置坐标。品质因数定义为 $F=L_p/(A_{\text{eff}}/\pi)^{1/2}$ ^[47]。

3 分析与讨论

图 2(a)~(d)展示了不同参数下石墨烯-介质混合波导基模的归一化电场分布,参数为频率 $f=30\text{ THz}$, $E_F=0.6\text{ eV}$, $r=5\text{ nm}$, $R=50\text{ nm}$, $\epsilon_1=\epsilon_{\text{silica}}$ 。对比图 2(a)和图 2(b)及图 2(c)和图 2(d)发现,相同 θ 下 $h_{\text{gap}}=1\text{ nm}$ 时波导的间隙区域能量更集中,说明 h_{gap} 越小,能量更集中。对比图 2(a)和图 2(c)及图 2(b)和图 2(d)发现,相同 h_{gap} 下 $\theta=\pi/2$ 时光场分布范围更大,即场约束性能较差。总体来看,光场主要约束在间隙区域中,实现了二维光场聚焦。由于最大场值位于石墨烯层表面,故建立图 1(b)所示的坐标体系。从图 2(e)和图 2(f)可得到,在相同 h_{gap} 下, θ 越小,一维电场值线宽(即全峰半宽)越窄;在相同 θ 下, h_{gap} 越小,一维电场值线宽越窄。具体地,从 x 方向来看,当 $h_{\text{gap}}=1\text{ nm}$ 时, $\theta=\pi/6$ 比 $\theta=\pi/2$ 对应的线宽略小,分别约为 6.8 nm 和

7.0 nm; 当 $h_{\text{gap}}=10$ nm 时, $\theta=\pi/6$ 和 $\theta=\pi/2$ 对应的线宽分别约为 13.0 nm 和 13.5 nm。从 y 方向来看, 场值曲线的线宽在一定程度上近似等于间隙距离 h_{gap} , 且 $h_{\text{gap}}=1$ nm 时, 角度 θ 对线宽的影响较小。如 $h_{\text{gap}}=1$ nm 时, $\theta=\pi/6$ 和 $\theta=\pi/2$ 对应的线宽均约为

1.3 nm。而当间隙 $h_{\text{gap}}=10$ nm 时, 角度 θ 对线宽的影响较大, $\theta=\pi/6$ 和 $\theta=\pi/2$ 对应的线宽分别约为 8 nm 和 10 nm。故所设计的结构可以实现面积约为 $13.5 \times 10 \text{ nm}^2$ (甚至更小) 的光斑, 对应尺寸为 $\lambda_0^2/(7.4 \times 10^5)$ 。

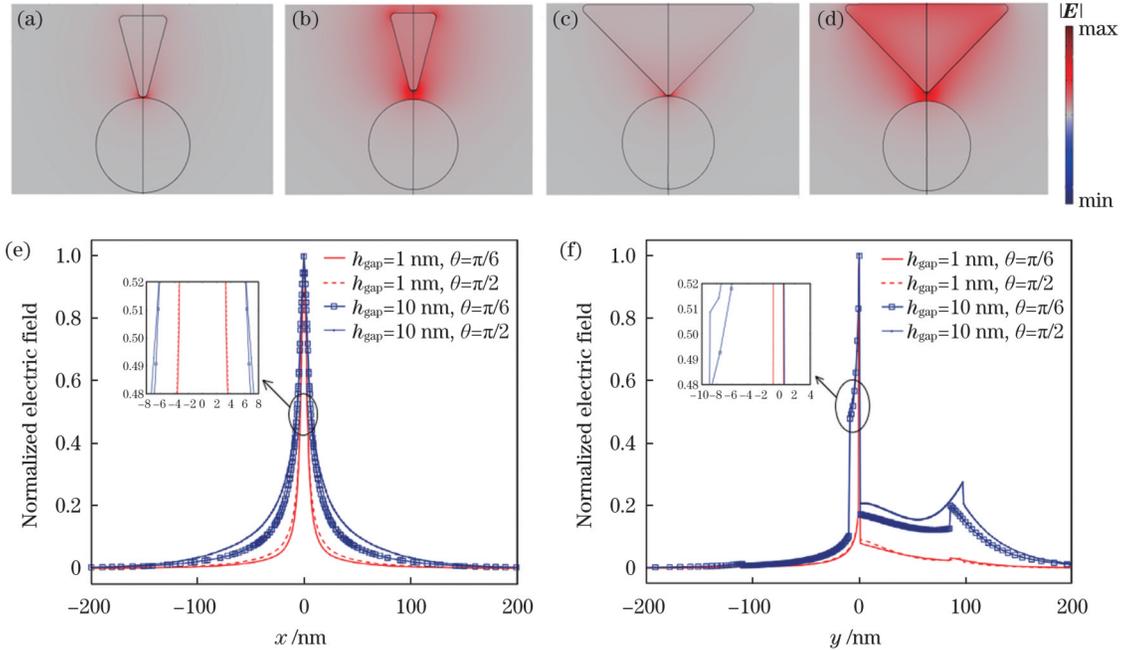


图2 基模的归一化电场分布。(a) $h_{\text{gap}}=1$ nm, $\theta=\pi/6$; (b) $h_{\text{gap}}=10$ nm, $\theta=\pi/6$; (c) $h_{\text{gap}}=1$ nm, $\theta=\pi/2$; (d) $h_{\text{gap}}=10$ nm, $\theta=\pi/2$; 沿 (e) x 方向和 (f) y 方向的归一化电场分布

Fig. 2 Normalized electric field distributions of fundamental mode. (a) $h_{\text{gap}}=1$ nm, $\theta=\pi/6$; (b) $h_{\text{gap}}=10$ nm, $\theta=\pi/6$; (c) $h_{\text{gap}}=1$ nm, $\theta=\pi/2$; (d) $h_{\text{gap}}=10$ nm, $\theta=\pi/2$; normalized electric field distributions along (e) x and (f) y directions

图3为不同角度 θ 下石墨烯等离激元的模式传输特性随 h_{gap} 的变化曲线, 其他参数为 $f=30$ THz, $E_F=0.6$ eV, $r=5$ nm, $R=50$ nm, $\epsilon_1=\epsilon_{\text{silicon}}$ 。如图3(a)所示, 有效模式系数 n_{eff} 随 h_{gap} 的增大而减小。当 h_{gap} 在 1~10 nm 区间时, n_{eff} 的变化幅度较大; 当 $h_{\text{gap}}>10$ nm 时, n_{eff} 缓慢减小。由图3(b)发现, 随着 h_{gap} 的增大, 传播距离 L_p 逐渐增大。当 $\theta=\pi/6$ 和 $\pi/3$ 时, 传播距离 L_p 的增大较为明显。当 $\theta=\pi/2$ 和 $2\pi/3$ 时, 在 $h_{\text{gap}}=1\sim 5$ nm 区间内, L_p 随 h_{gap} 的增大而增大; 当 $h_{\text{gap}}>5$ nm 时, L_p 基本保持不变。这是因为顶角角度 θ 过大时, 三角形另外两个角的尖端效益逐渐突显, 所以 Si 纳米线对涂覆石墨烯层的三角形纳米线场的影响减弱[图3(e)]。图3(c)中的归一化模场面积 A_N 随着 h_{gap} 的增大而增大, 且变化范围较大, 其中 $\theta=2\pi/3$ 时, 归一化模场面积 A_N 最大, $\theta=\pi/6$ 和 $\pi/3$ 时归一化模场面积相近。从图3(b)和图3(c)中不难发现, 随着 θ 的减小, 传播距离增大, 同时模式场面积减小, 表明该结构在局部突破了表面等离激元模式中传输损耗和场约束之间的制约关系, 即实现了模式损耗与模场面积的同时减小。从图3(e)所示电场分布可以看出, 当 θ 从 $2\pi/3$ 减小至 $\pi/6$ 时, 三角形纳米线的截面尺寸减小, 从而使得光场更为集中; 此外, 当 θ 减小时, 石墨烯与光相互作用区

域的面积减小, 导致损耗降低。由图3(d)可得到, 品质因数 F 随着 h_{gap} 的增大而减小。当 $\theta=\pi/6$ 时, 品质因数最大。可见, 顶角 θ 为锐角时所设计波导结构的传输特性比钝角情形下更优。故后续采用 $\theta=\pi/6$ 和 $h_{\text{gap}}=2$ nm。

图4为不同圆角半径 r 下石墨烯等离激元的模式传输特性随 Si 纳米线半径 R 的变化曲线, 参数为 $f=30$ THz, $E_F=0.6$ eV, $\epsilon_1=\epsilon_{\text{silicon}}$, $\theta=\pi/6$, $h_{\text{gap}}=2$ nm。如图4(a)所示, 有效模式系数 n_{eff} 随着 R 的增大而增大, 且三角形纳米线的圆角半径 r 越大, n_{eff} 越大。由图4(b)可以看出, 随着 R 的增大, L_p 的变化幅度变小。 L_p 在 $R=20\sim 30$ nm 区间内小幅下降, 在 $R>40$ nm 时基本保持不变。如图4(c)所示, 随着 R 的增大, 归一化模场面积先逐渐减小, 后趋于稳定; 圆角半径 r 越小, 归一化模场面积 A_N 越小。由于传输损耗主要来自石墨烯层, 且光场主要集中在间隙区域, 当 R 增大时, GNW 与 Si 纳米线的相互作用区域近似为平面, 故损耗基本保持不变。如图4(d)所示, R 增大时品质因数 F 逐渐增大, 且 $r=2$ nm 时品质因数可达 956 以上。

进一步研究了三角形纳米线介电常数 ϵ_1 对传输特性的影响, 参数为 $f=30$ THz, $E_F=0.6$ eV, $R=50$ nm, $r=2$ nm, $\theta=\pi/6$, $h_{\text{gap}}=2$ nm。如图5所示, 当 ϵ_1 从 2 增

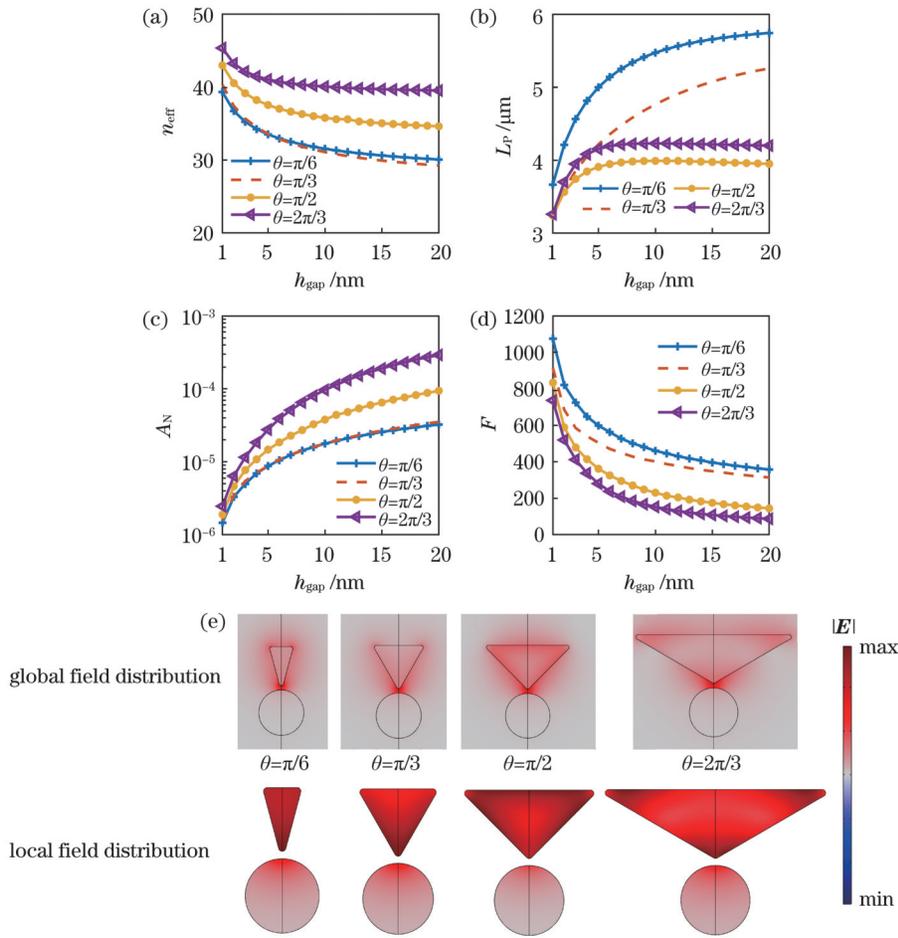


图 3 模式特性与 h_{gap} 的关系。(a) n_{eff} ; (b) 传播距离; (c) 归一化模场面积; (d) 品质因数; (e) $h_{\text{gap}} = 10$ nm 时的归一化电场分布
 Fig. 3 Relationship between modal properties and h_{gap} . (a) n_{eff} ; (b) propagation distance ; (c) normalized mode field area; (d) figure of merit; (e) normalized electric field distributions when $h_{\text{gap}} = 10$ nm

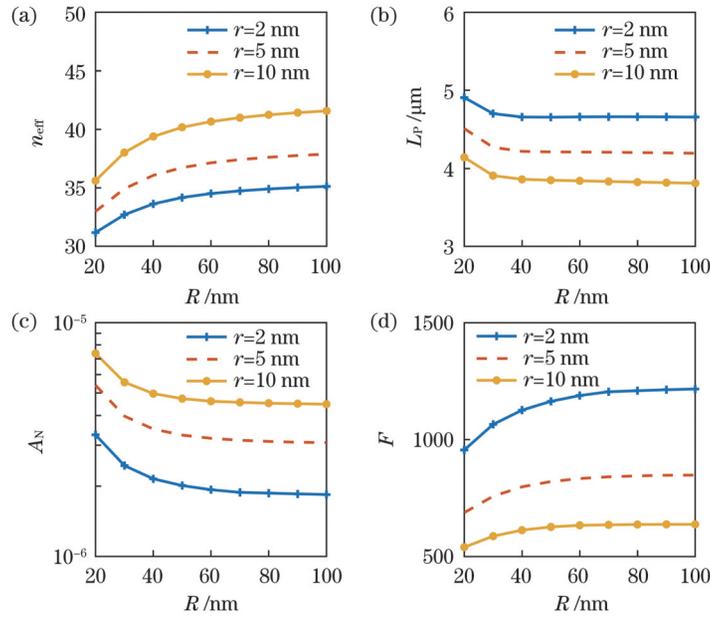


图 4 模式特性随 R 的变化关系。(a) n_{eff} ; (b) 传播距离; (c) 归一化模场面积; (d) 品质因数

Fig. 4 Relationship between modal properties and R . (a) n_{eff} ; (b) propagation distance ; (c) normalized mode field area; (d) figure of merit

大至 12 时, n_{eff} 逐渐增大, 同时传播距离 L_p 减小, 模式场面积 A_N 逐渐增大, 品质因数 F 从 1190 降至 245。
 图 5(b) 插图给出了涂覆石墨烯层的三角形纳米线和 Si

纳米线的内部场分布, 可清晰观察到; 随着 ϵ_1 的增大, 三角形纳米线的内电场值逐渐增大, 且与石墨烯的相互作用增强, 导致石墨烯的吸收损耗增大, 进而使传播距

离减小。图 5(c)插图给出了整体结构中的基模场分布。随着 ϵ_1 的增大,三角形纳米线的外围场分布更为弥

散,使模式场面积 A_N 增大。因此,选择介电常数更小的介质材料将有助于提升该波导结构的整体性能。

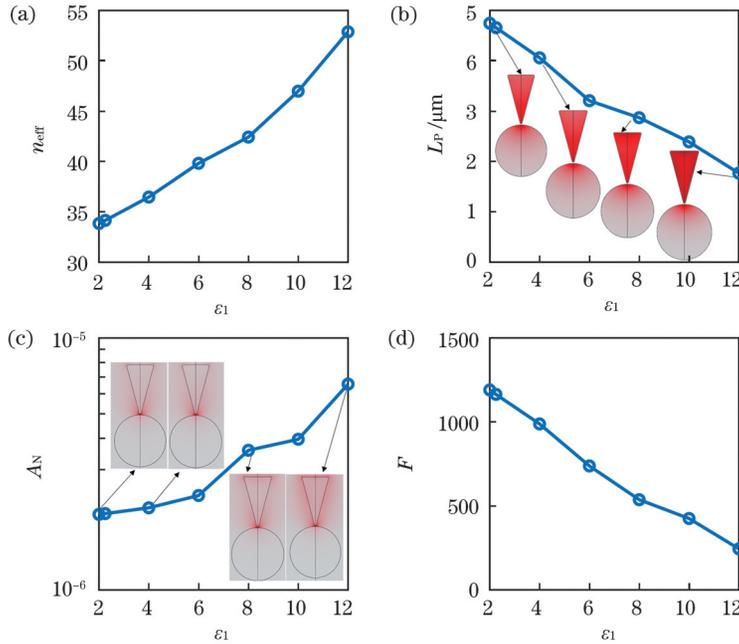


图 5 三角形纳米线介电常数 ϵ_1 对模式特性的影响。(a) n_{eff} ; (b) 传播距离; (c) 归一化模场面积; (d) 品质因数

Fig. 5 Effects of dielectric constant ϵ_1 of triangular nanowire on mode characteristics. (a) n_{eff} ; (b) propagation distance; (c) normalized mode field area; (d) figure of merit

图 6 为不同频率下石墨烯等离激元的模式传输特性随石墨烯费米能级 E_F 的变化曲线,参数为 $\epsilon_1=2, \theta=\pi/6, h_{\text{gap}}=2 \text{ nm}, r=2 \text{ nm}, R=50 \text{ nm}$ 。如图 6(a) 所示,随着 E_F 的增大,有效模式系数 n_{eff} 逐渐减小,且 f 增大时,有效模式系数 n_{eff} 也随之增大。从图 6(b) 可以看出,传播距离 L_p 随费米能级 E_F 的增大而增大,表明费米能级增大时损耗快速下降。在相同 E_F 下,增大 f 将导致传播距离 L_p 减小。如 $E_F=1 \text{ eV}$ 时, f 为 20、30、40 THz 时

应的传播距离分别为 21.5、14.8、9.8 μm 。如图 6(c) 所示,随着费米能级 E_F 的增大,归一化模场面积 A_N 逐渐增大, $f=20 \text{ THz}$ 和 $E_F=1 \text{ eV}$ 时对应的归一化模场面积为 2.11×10^{-6} , 整体上看 A_N 的范围为 $1.19 \times 10^{-6} \sim 4.29 \times 10^{-6}$ 。图 6(d) 表明,随着 E_F 的增大,品质因数 F 逐渐增大。当 $E_F > 1 \text{ eV}$ 时, F 值高达 2500 以上。

最后,与 Wu 等^[32]提出的波导结构(B)进行了对比,如图 7(a) 所示。该结构由圆形 GNW 和三角形 Si 纳米

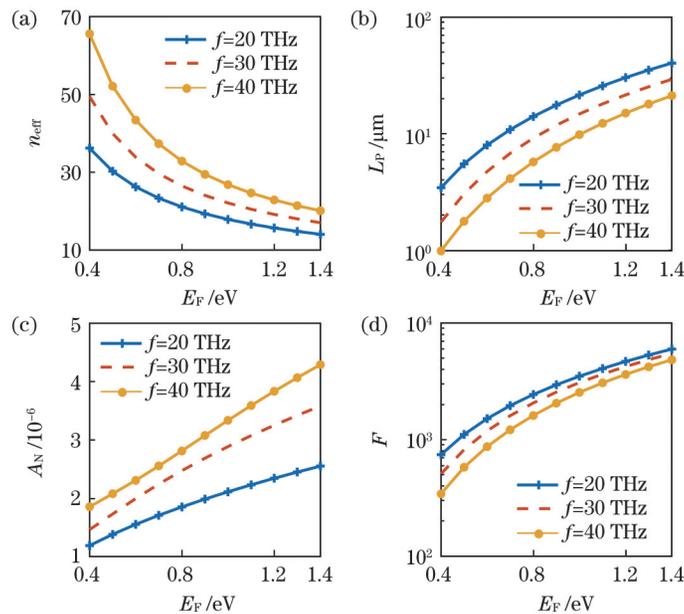


图 6 模式特性与 E_F 的关系。(a) n_{eff} ; (b) 传播距离; (c) 归一化模场面积; (d) 品质因数

Fig. 6 Relationship between modal properties and E_F . (a) n_{eff} ; (b) propagation distance; (c) normalized mode field area; (d) figure of merit

线组成。而本文所设计的波导结构(A)由三角形GNW和圆形Si纳米线组成。图7(b)和图7(c)分别为两种波导结构在 $R=50\text{ nm}$ 和 $R=100\text{ nm}$ 下的基模归一化电场分布,其他参数为 $\epsilon_1=2, \epsilon_{\text{silica}}=2.25, \epsilon_{\text{si}}=11.9, \theta=\pi/6, r=2\text{ nm}, h_{\text{gap}}=2\text{ nm}, 10\text{ nm}, E_F=1\text{ eV}$ 和 $f=30\text{ THz}$ 。由图7(b)和图7(c)可以发现,在 $R=50\text{ nm}$ 和 $R=100\text{ nm}$ 两种情形下,与波导结构B相比,波导结构A中

的光场能量更集中。故波导结构A相比B具有更好的光场约束能力。这得益于结构A采用的石墨烯包裹的尖端结构,且等离激元的模式场强最大值位于石墨烯层表面,故电场聚焦效应较为显著。而结构B采用的是石墨烯包裹的圆形纳米线,不存在尖端,且尽管结构B中的三角形Si纳米线是尖端结构,但场强最大值位于石墨烯层表面,电场聚焦效应相比结构A较弱。

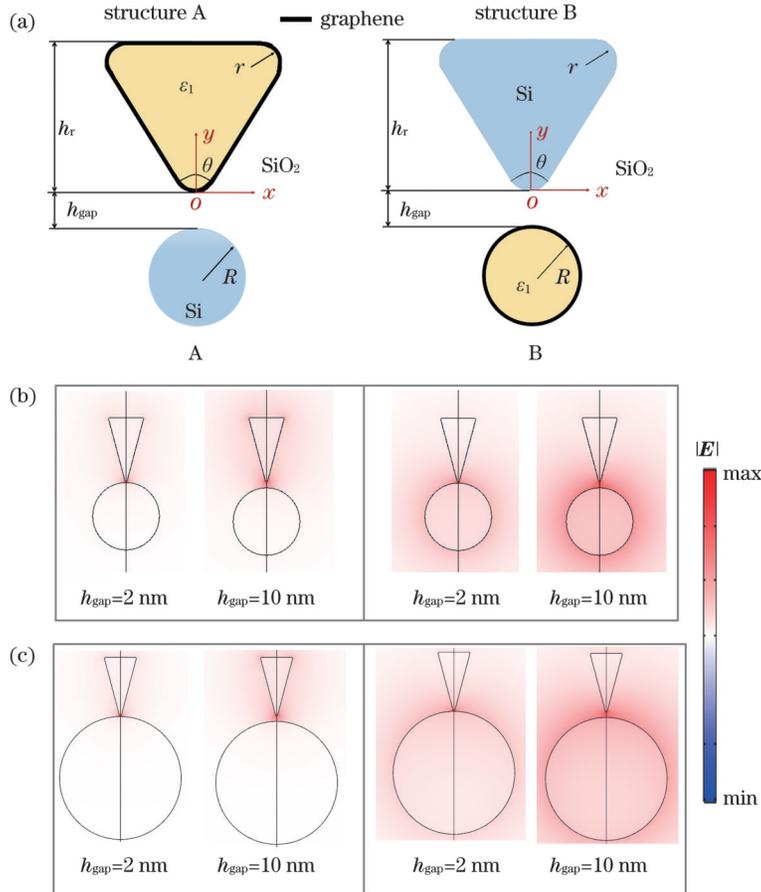


图7 波导结构中的基模场分布。(a)波导结构示意图;(b) $R=50\text{ nm}$ 和(c) $R=100\text{ nm}$ 时的基模场分布

Fig. 7 Fundamental mode field distributions in waveguide structure. (a) Structural diagram of waveguide; fundamental mode field distributions for (b) $R=50\text{ nm}$ and (c) $R=100\text{ nm}$

进一步对比研究了波导结构A和B的亚波长传输特性。如图8所示,四条点线从右到左分别表示 $f=20, 22, 24, \dots, 40\text{ THz}$ 所对应的数据,其中 $R=50\text{ nm}, h_{\text{gap}}=2\text{ nm}, 10\text{ nm}$,其他参数同图7(b)。当 $h_{\text{gap}}=10\text{ nm}$ 时,波导结构A和B中的基模传播距离 L_P 分别为 $12.2\sim 24.0\text{ }\mu\text{m}$ 和 $10.0\sim 24.5\text{ }\mu\text{m}$ 。但是波导结构A的基模归一化模场面积($6.54\times 10^{-6}\sim 1.58\times 10^{-5}$)比B结构($4.98\times 10^{-5}\sim 1.10\times 10^{-4}$)小一个数量级。当 $h_{\text{gap}}=2\text{ nm}$ 时,波导结构A和B中的基模传播距离 L_P 分别为 $9.8\sim 21.0\text{ }\mu\text{m}$ 和 $9.3\sim 23.8\text{ }\mu\text{m}$ 。同样,波导结构A的基模归一化模场面积($2.11\times 10^{-6}\sim 3.33\times 10^{-6}$)比B结构($1.93\times 10^{-5}\sim 2.57\times 10^{-5}$)小一个数量级。可见在 $20\sim 40\text{ THz}$ 频率范围内,两种波导结构的传输损耗基本相同,但是波导结构A的光场约束性能优于波导结构B,即在场约束和传输损耗之间取得了更好的权衡。

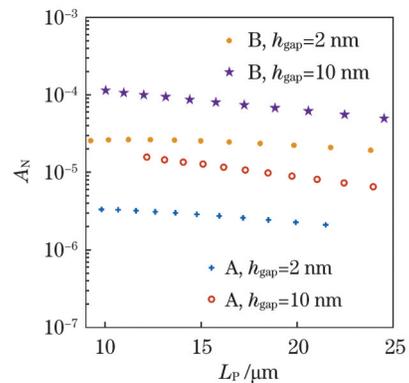


图8 波导结构A和B的亚波长传输特性对比

Fig. 8 Comparison of subwavelength transmission properties of waveguide structures A and B

在波导结构A的基础上,进一步用石墨烯层涂覆圆形Si纳米线,从而获得涂覆石墨烯层的圆形-三角

形纳米线双线结构,定义为波导结构 C。图 9 对比了 A 和 C 波导结构的亚波长传输特性,参数为 $\epsilon_1=2$, $\epsilon_{\text{silicon}}=2.25$, $\epsilon_{\text{si}}=11.9$, $\theta=\pi/6$, $r=2$ nm, $R=100$ nm, $E_F=1$ eV 和 $f=30$ THz。当间隙距离 h_{gap} 从 2 nm 递增到 10 nm 时,相较于波导结构 C,波导结构 A 的传播距离和模式场约束性能均大幅提升。A 和 C 结构中的基模传播距离分别为 14.9~17.5 μm 和 5.5~10.3 μm ,

A 和 C 结构中的基模归一化模场面积分别为 $2.43\times 10^{-6}\sim 9.35\times 10^{-6}$ 和 $7.86\times 10^{-6}\sim 2.40\times 10^{-5}$ 。如图 9(a) 中插图($h_{\text{gap}}=4$ nm)所示,A 结构模式场相比 C 结构模式场更为集中,且 C 结构中石墨烯与光的相互作用面积更大,导致损耗增大。最终,如图 9(d) 所示,C 结构的品质因数仅为 700 左右,而 A 结构中的 F 值高达 2000 以上。

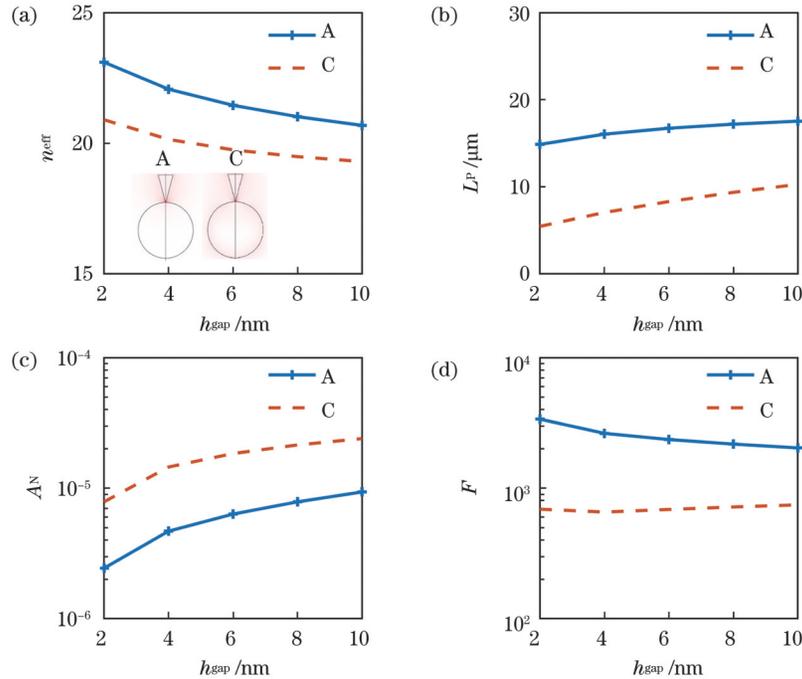


图 9 波导结构 A 和 C 的亚波长传输特性对比。(a) n_{eff} ; (b) 传播距离; (c) 归一化模场面积; (d) 品质因数

Fig. 9 Comparison of subwavelength transmission properties of waveguide structures A and C. (a) n_{eff} ; (b) propagation distance; (c) normalized mode field area; (d) figure of merit

4 结 论

设计了一种由圆形硅纳米线和涂覆石墨烯的三角形纳米线组成的混合等离激元波导结构,研究了该混合波导的亚波长传输特性。所设计的波导结构具备极强的光场约束性能。随着顶角 θ 的减小,波导模损耗和模式场面积同时减小。这得益于三角形 GNW 优异的场聚焦效应,同时 θ 减小导致石墨烯与光的相互作用面积减小,进而降低了损耗。所提结构在局部突破了表面等离激元模式中传输损耗和模场约束之间的制约关系。在 20~40 THz 频率内,基模归一化模式场面积为 $\sim 10^{-6}$ 数量级,同时传播距离为几十微米,品质因数可达 2500 以上。相比同类型结构,在传播距离相当时,模式场面积减小了一个数量级。相关研究结果有望应用于亚波长光子器件中,如波导调制器和纳米激光器及其他波导集成型器件。

参 考 文 献

- [1] Alonso Calafell I, Rozema L A, Alcaraz Iranzo D, et al. Giant enhancement of third-harmonic generation in graphene - metal heterostructures[J]. Nature Nanotechnology, 2021, 16(3): 318-324.
- [2] Mittendorff M, Winnerl S, Murphy T E. 2D THz optoelectronics[J]. Advanced Optical Materials, 2021, 9(3): 2001500.
- [3] Wang Y C, Zhao H, Huo D W, et al. Accumulation-layer hybridized surface plasmon polaritons at an ITO/LiNbO₃ interface[J]. Optics Letters, 2019, 44(4): 947-950.
- [4] 张晨, 薛文瑞, 陈岳飞, 等. 基于氮化钛和二氧化钛的超宽带太阳能吸收器[J]. 光学学报, 2020, 40(21): 2124002. Zhang C, Xue W R, Chen Y F, et al. Ultra-broadband solar absorber based on titanium nitride and titanium dioxide[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(21): 2124002.
- [5] Teng D, Wang K. Theoretical analysis of terahertz dielectric-loaded graphene waveguide[J]. Nanomaterials, 2021, 11(1): 210.
- [6] 高明盛, 罗朝明, 周宏敏, 等. 基于介质和石墨烯涂层的古斯-汉欣位移的精确调控[J]. 中国激光, 2017, 44(7): 0703019. Gao M S, Luo Z M, Zhou H M, et al. Precise control of Goos-Hänchen shift based on dielectric and graphene coating[J]. Chinese Journal of Lasers, 2017, 44(7): 0703019.
- [7] Yang X G, Li B J. Monolayer MoS₂ for nanoscale photonics[J]. Nanophotonics, 2020, 9(7): 1557-1577.
- [8] He X Y, Liu F, Lin F T, et al. Tunable MoS₂ modified hybrid surface plasmon waveguides[J]. Nanotechnology, 2019, 30(12): 125201.
- [9] Yang X G, Wen L, Yan J H, et al. Energy dissipation and asymmetric excitation in hybrid waveguides for routing and coloring[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2021, 12(29): 7034-7040.
- [10] He X Y, Liu F, Lin F T, et al. Tunable 3D Dirac-semimetals supported mid-IR hybrid plasmonic waveguides[J]. Optics Letters,

- 2021, 46(3): 472-475.
- [11] 田元仕, 郭晓涵, 戴林林, 等. 基于狄拉克半金属宽带的可调谐太赫兹偏振器[J]. 中国激光, 2019, 46(6): 0614033.
Tian Y S, Guo X H, Dai L L, et al. Broadband tunable terahertz polarizers based on Dirac semimetal[J]. Chinese Journal of Lasers, 2019, 46(6): 0614033.
- [12] 易南宁, 宗容, 龚江, 等. 基于二氧化钒-狄拉克半金属混合超材料的单/双波段可切换太赫兹吸波器[J]. 中国激光, 2022, 49(3): 0314002.
Yi N N, Zong R, Gong J, et al. Single-/ dual-band switchable terahertz absorber based on vanadium dioxide-Dirac semi-metal hybrid metamaterial[J]. Chinese Journal of Lasers, 2022, 49(3): 0314002.
- [13] Liang G Z, Yu X C, Hu X N, et al. Mid-infrared photonics and optoelectronics in 2D materials[J]. Materials Today, 2021, 51: 294-316.
- [14] Bonaccorso F, Sun Z, Hasan T, et al. Graphene photonics and optoelectronics[J]. Nature Photonics, 2010, 4(9): 611-622.
- [15] 杨晓霞, 孔祥天, 戴庆. 石墨烯等离激元的光学性质及其应用前景[J]. 物理学报, 2015, 64(10): 106801.
Yang X X, Kong X T, Dai Q. Optical properties of graphene plasmons and their potential applications[J]. Acta Physica Sinica, 2015, 64(10): 106801.
- [16] Romagnoli M, Soriano V, Midrio M, et al. Graphene-based integrated photonics for next-generation datacom and telecom[J]. Nature Reviews Materials, 2018, 3(10): 392-414.
- [17] 孔祥壮, 李金花, 罗晓曼, 等. 基于偏置纳米线的石墨烯表面等离激元调制器[J]. 光学学报, 2021, 41(19): 1923001.
Kong X Z, Li J H, Luo X M, et al. Graphene surface plasmon polariton modulator based on biased nanowires[J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(19): 1923001.
- [18] Yang X G, Liu Y, Lei H X, et al. An organic-inorganic broadband photodetector based on a single polyaniline nanowire doped with quantum dots[J]. Nanoscale, 2016, 8(34): 15529-15537.
- [19] 卫壮志, 薛文瑞, 彭艳玲, 等. 涂覆石墨烯的三根电介质纳米线波导的模式特性[J]. 光学学报, 2019, 39(1): 0124001.
Wei Z Z, Xue W R, Peng Y L, et al. Mode characteristics of waveguides based on three graphene-coated dielectric nanowires[J]. Acta Optica Sinica, 2019, 39(1): 0124001.
- [20] Teng D, Wang K, Li Z. Graphene-coated nanowire waveguides and their applications[J]. Nanomaterials, 2020, 10(2): 229.
- [21] Hanson G W. Quasi-transverse electromagnetic modes supported by a graphene parallel-plate waveguide[J]. Journal of Applied Physics, 2008, 104(8): 084314.
- [22] Hu H, Yu R W, Teng H C, et al. Active control of micrometer plasmon propagation in suspended graphene[J]. Nature Communications, 2022, 13: 1465.
- [23] 王清晨, 宋梁. 介质加载石墨烯等离子体波导传输特性[J]. 激光与光电子学进展, 2017, 54(11): 112401.
Wang Q C, Song L. Propagation characteristics of dielectric-loaded graphene plasma waveguides[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54(11): 112401.
- [24] Gao Y X, Ren G B, Zhu B F, et al. Single-mode graphene-coated nanowire plasmonic waveguide[J]. Optics Letters, 2014, 39(20): 5909-5912.
- [25] Chen B G, Meng C, Yang Z Y, et al. Graphene coated ZnO nanowire optical waveguides[J]. Optics Express, 2014, 22(20): 24276-24285.
- [26] Sun M, Tian J P, Lan X H, et al. Transmission properties of two vertically coupled double-graphene-coated nanowires integrated with substrate[J]. Optik, 2019, 185: 242-247.
- [27] Hajati M, Hajati Y. Plasmonic characteristics of two vertically coupled graphene-coated nanowires integrated with substrate[J]. Applied Optics, 2017, 56(4): 870-875.
- [28] Teng D, Wang Y C, Xu T Z, et al. Symmetric graphene dielectric nanowaveguides as ultra-compact photonic structures[J]. Nanomaterials, 2021, 11(5): 1281.
- [29] Teng D, Wang K, Li Z, et al. Graphene-coated nanowire dimers for deep subwavelength waveguiding in mid-infrared range[J]. Optics Express, 2019, 27(9): 12458-12469.
- [30] Hajati M, Hajati Y. High-performance and low-loss plasmon waveguiding in graphene-coated nanowire with substrate[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2016, 33(12): 2560-2565.
- [31] Teng D, Guo J K, Yang Y D, et al. Study of modal properties in graphene-coated nanowires integrated with substrates[J]. Applied Physics B, 2020, 126(11): 173.
- [32] Wu D, Tian J, Yang R. Study of mode performances of graphene-coated nanowire integrated with triangle wedge substrate[J]. Journal of Nonlinear Optical Physics & Materials, 2018, 27(2): 1850013.
- [33] Wang J Q, Xing Z K, Chen X, et al. Recent progress in waveguide-integrated graphene photonic devices for sensing and communication applications[J]. Frontiers in Physics, 2020, 8: 37.
- [34] Wang J Q, Zhang L, Chen Y Z, et al. Saturable absorption in graphene-on-waveguide devices[J]. Applied Physics Express, 2019, 12(3): 032003.
- [35] Yan R, Gargas D, Yang P. Nanowire photonics[J]. Nature Photonics, 2009, 3(10): 569-576.
- [36] Zhang Q, Li G Y, Liu X F, et al. A room temperature low-threshold ultraviolet plasmonic nanolaser[J]. Nature Communications, 2014, 5: 4953.
- [37] Teng D, Wang K, Huan Q S, et al. High-performance light transmission based on graphene plasmonic waveguides[J]. Journal of Materials Chemistry C, 2020, 8(20): 6832-6838.
- [38] Xiao S Y, Wang T, Liu T T, et al. Active modulation of electromagnetically induced transparency analogue in terahertz hybrid metal-graphene metamaterials[J]. Carbon, 2018, 126: 271-278.
- [39] Ahmadvand A, Gerislioglu B, Ahuja R, et al. Toroidal metaphotonics and metadevices[J]. Laser & Photonics Reviews, 2020, 14(11): 1900326.
- [40] 滕达, 马文帅, 杨研蝶, 等. 基于衬底的涂覆石墨烯层的三角形纳米线亚波长传输特性研究[J]. 光学学报, 2020, 40(13): 1324002.
Teng D, Ma W S, Yang Y D, et al. Study on subwavelength transmission properties of triangular-shaped graphene-coated nanowires on substrate[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(13): 1324002.
- [41] Kanahashi K, Tanaka N, Shoji Y, et al. Formation of environmentally stable hole-doped graphene films with instantaneous and high-density carrier doping via a boron-based oxidant[J]. Npj 2D Materials and Applications, 2019, 3: 7.
- [42] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films[J]. Science, 2004, 306(5696): 666-669.
- [43] 赵永哲, 滕达, 王云成, 等. 石墨烯在有限元计算中的两种表示方法[J]. 激光与光电子学进展, 2021, 58(7): 0723003.
Zhao Y Z, Teng D, Wang Y C, et al. Two processing methods of graphene in finite element calculation[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2021, 58(7): 0723003.
- [44] 王志斌, 尹少杰, 段晓宁, 等. 带有对称三角肋的混合表面等离子体波导[J]. 中国激光, 2020, 47(3): 0313001.
Wang Z B, Yin S J, Duan X N, et al. Hybrid surface-plasmon waveguide with symmetrical triangular ribs[J]. Chinese Journal of Lasers, 2020, 47(3): 0313001.
- [45] 李志全, 岳中, 白兰迪, 等. 混合双肋型表面等离子体波导的传输特性[J]. 中国激光, 2017, 44(5): 0513001.
Li Z Q, Yue Z, Bai L D, et al. Transmission characteristics of mixed double ribbed surface plasmon waveguide[J]. Chinese Journal of Lasers, 2017, 44(5): 0513001.
- [46] Oulton R F, Sorger V J, Genov D A, et al. A hybrid plasmonic waveguide for subwavelength confinement and long-range propagation[J]. Nature Photonics, 2008, 2(8): 496-500.
- [47] Buckley R, Berini P. Figures of merit for 2D surface plasmon waveguides and application to metal stripes[J]. Optics Express, 2007, 15(19): 12174-12182.

Subwavelength Transmission Characteristics of Graphene-Dielectric Nanowire Hybrid Waveguides

Teng Da^{1*}, Fang Hongli¹, Yan Jianjun¹, Wang Anran¹, Jiang Man¹, Liang Binghan¹,
Yang Xiangli¹, Hu Xuemei¹, Guan Ziyi¹, Tian Yuanming¹, Wang Kai^{2**}

¹*School of Physics and Electrical Engineering, Zhengzhou Normal University, Zhengzhou 450044, Henan, China;*

²*Key Laboratory of Infrared Imaging Materials and Detectors, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China*

Abstract

Objective Subwavelength optical field confinement and low-loss propagation are important for compact photonic integration. However, the field confinement capability of noble metal-based plasmonic devices is always accompanied by the inherent ohmic loss. These structures perform well at the near-infrared and visible frequencies. However, in the mid- and far-infrared regions, the lack of tunability in their electromagnetic response and poor modal field confinement ability hinder their applications at the nanoscale. Recently, both theoretical and experimental reports have demonstrated that graphene can support surface plasmons in the infrared range with unique tunability, extremely strong modal field confinement, and a large field enhancement. Owing to the tradeoff between modal loss and confinement in plasmonic structures, it is difficult to obtain a deep-subwavelength modal field and long-range propagation simultaneously. Although a graphene-based hybrid waveguide integrated with a triangle wedge substrate has been proposed to achieve an ultra-small normalized mode size, the modal loss remains relatively large (with a propagation length less than 10 μm). Thus, obtaining a better balance between the modal loss and field confinement remains a significant challenge. In this study, a hybrid plasmon waveguide consisting of a cylindrical silicon nanowire and graphene-coated triangular nanowire is designed. The designed waveguide exhibits strong optical field confinement capability, low loss propagation, and a high figure of merit; thus, it is suitable as a building block for subwavelength photonic devices, such as modulators and nanolasers.

Methods The proposed plasmon waveguide consists of a graphene-coated triangular nanowire separated from a cylindrical silicon nanowire by a nanoscale dielectric gap with width (h_{gap}) (Fig. 1). For the modeling and simulation, the wave optics module of COMSOL software is employed. The eigenvalue solver is used to obtain the complex effective mode index (N_{eff}) and effective mode area (A_{eff}). In the simulation, the graphene layer is modeled as an electric field-induced surface current $\mathbf{J} = \sigma_{\text{g}} \mathbf{E}$ without thickness, where \mathbf{J} is the surface current and \mathbf{E} is the electric field. The calculation domain is $2\lambda_0 \times 2\lambda_0$, and a perfectly matched layer (PML) is applied to the surroundings of the geometry to avoid the influence of reflection. A convergence analysis is performed to ensure that the numerical boundaries and meshing do not interfere with the solutions.

Results and Discussion The proposed waveguide exhibits well-confined modal fields with the focal spot area of $13.5 \times 10 \text{ nm}^2$ (even less), corresponding to size of $\lambda_0^2 / (7.4 \times 10^5)$. The modal transmission properties are highly dependent on angle θ . When θ decreases, both the propagation loss and modal area decrease, indicating that the tradeoff between modal loss and confinement is broken to some extent. Additionally, a smaller gap distance results in a larger figure of merit (Fig. 3). Interestingly, when the radius of the Si nanowire increases, the propagation length decreases slightly at first and then appears to be invariable, while the modal area decreases monotonically. This is because the loss is mainly from the graphene layer, and when R increases, the graphene-light interaction region is nearly invariable. When R ranges from 40 nm to 100 nm, the loss is invariable, while the modal area reduces (Fig. 4). When the triangular nanowire permittivity ranges from 2 to 12, the figure of merit decreases from 1190 to 245, implying that a smaller permittivity can improve waveguide performance (Fig. 5). The tunability of the Fermi energy of graphene allows the active tuning of the modal properties. When the Fermi energy ranges from 0.4 eV to 1.4 eV, the normalized modal areas of the fundamental modes are on the order of $\sim 10^{-6}$. In particular, when the Fermi energy is above 1 eV, a propagation length of several tens of micrometers and a figure of merit of over 2500 can be achieved (Fig. 6). Finally, the proposed waveguide is demonstrated to have better comprehensive performance than a similar waveguide structure (Fig. 8) and a two-wire system (Fig. 9).

Conclusions In this work, the subwavelength transmission characteristics of a graphene-dielectric nanowire hybrid waveguide are proposed and examined. The proposed waveguide exhibits extremely strong optical field confinement capability. In particular, when θ decreases, both the modal loss and modal area decrease. This is due to the tip focusing effect of the triangular-shaped GNW, and the decrease in θ results in a reduction in the graphene-light interaction region, which in turn reduces the loss. Thus, the tradeoff between modal loss and confinement is broken to some extent. When the frequency ranges from 20 THz to 40 THz, the normalized modal areas of the fundamental modes in the designed waveguide are on the order of $\sim 10^{-6}$ with a propagation length of approximately several tens of micrometers, as well as a high figure of merit of over 2500. Compared with a similar waveguide structure, the mode field area is reduced by one order of magnitude while maintaining a comparable propagation distance. These findings are expected to have potential applications in waveguide-integrated plasmonic devices and greatly reduce the device size, such as modulators and nano-lasers.

Key words optical devices; waveguides; graphene plasmons; infrared wave