

纳米金属光栅对石墨烯滤波影响的仿真分析

孙斌, 杨友昌, 万猛, 谢飞凤

遵义师范学院物理与机电工程学院, 贵州 遵义 563006

摘要 采用有限元法,研究了基于石墨烯/金属混合纳米光栅的太赫兹(THz)滤波器。混合光栅可构成纳米腔阵列,利用腔中磁场法布里-珀罗谐振效应,制作了 THz 滤波器。该滤波器对波长的选择不易受外界环境的影响,而且其滤波波长可动态调控;另外,可通过增加石墨烯的层数增强其滤波能力。

关键词 表面光学;表面等离子体激元;波长滤波器件;太赫兹频谱;电光材料;纳米结构

中图分类号 O469 文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP54.102401

Simulation Analysis on Influence of Metal Nanograting on Graphene Filtering

Sun Bin, Yang Youchang, Wan Meng, Xie Feifeng

School of Physics and Electronic Science, Zunyi Normal University, Zunyi, Guizhou 563006, China

Abstract A terahertz (THz) filter based on graphene/metal hybrid nanogratings is studied with the finite element method. Nanocavity arrays can be formed by the hybrid gratings. A THz filter is prepared by using the magnetic Fabry-Perot resonance effect in the nanocavity. The wavelength choice performance of this filter is unaffected by the external environments and the filtering wavelength can also be dynamically controlled. In addition, the filtering performance of this filter can be enhanced via the increase of the graphene layer number.

Key words optics at surfaces; surface plasmon polaritons; wavelength filtering devices; terahertz frequency SPP spectrum; electro-optical materials; nanostructures

OCIS codes 240.6680; 130.7408; 300.6495; 160.2100; 310.6628

1 引言

石墨烯是一种由单层碳原子构成的二维六方晶格,近年来受到研究人员的广泛关注^[1-3]。石墨烯中的电子所具有的狄拉克线性色散性质,使其成为制作快速电子电路的理想材料之一^[4-5]。但由于石墨烯是一种没有能隙的半导体,因此不能用于设计数字电子器件^[6]。目前,石墨烯在传统电子器件^[7]、光子器件及光电器件^[8-9]等方面已表现出广阔的应用前景。

在石墨烯的各类应用中,表面等离子体激元(SPP)的相关研究是非常有吸引力的研究领域之一^[10-13]。在表面等离子器件中,石墨烯主要有三种应用方式:1)在红外波段激发动态可调的 SPP^[14-15];2)在可见光频段用作可调的透明平台;3)作为已存在的 SPP 器件的包裹功能材料。在诸多应用中,石墨烯和金属是两大主要材料。Kocabas 等^[16-17]通过化学蒸汽沉积法在金属表面生成的一层或几层石墨烯,不仅可以增加器件对光的吸收,还能防止金属表面氧化。Mohammad 等^[18]利用金属和石墨烯的混合结构,增加了器件对太赫兹波的吸收,其金属条带阵列可用来辅助激发太赫兹频段石墨烯表面等离子体极化激元(GSPPs)。Cai 等^[19]利用石墨烯/金属混合结构,进一步增加了器件对可见光的吸收,且激发了金属中的 SPP 来增加石墨烯对可见光的吸收。这些文献报道的石墨烯和金属混合结构^[20]中,只有两种材料能分别在各自特定的波段激发 SPP,石墨烯电导率的可调性是实现有源电光器件的关键。在诸多石墨烯电导率可调方式(静电场,静磁

收稿日期:2017-05-16;收到修改稿日期:2017-05-27

基金项目:国家自然科学基金(11265017,11464052)、贵州省科学基金(黔科合J字[2015]2149号)、遵义师范学院博士基金(40300326)、省市科技合作专项资金(省市科合[2015]55号)

作者简介:孙斌(1986—),男,博士,副教授,主要从事表面等离子体激元方面的研究。E-mail: sunbin@hnu.edu.cn

场和化学掺杂等)中,利用门电压产生静电场是最主要的方法之一,而金属是加载门电压的理想电极材料,可以利用各种形状的金属在石墨烯上形成空间各异的电导率分布。然而,文献[21-22]中只报道了已调电导率的石墨烯与光的相互作用,关于金属电极的加入对器件功能的影响研究鲜有报道。

本文设计了一种由纳米金属光栅电极与石墨烯片所构成的纳米条带混合光栅结构,采用有限元法研究了其在不同结构参数下的滤波性能,并分析了其滤波机理。与不加电极时相比,虽然该结构对太赫兹(THz)波的吸收有所减弱,但仍具有门电压可调性,且可通过增加石墨烯的层数来增强吸收。

2 基本模型

图1所示为石墨烯/金属纳米条带阵列混合结构,其中 k 为波矢, E 为电场。石墨烯条带由金属电极加电压形成,设其宽度均为 w ,上下并列放置,其间隙和阵列周期分别为 g 和 P 。与其他混合结构相比,该结构除了包含厚度为 t 的金属块材料外,还有二维的石墨烯材料。为方便讨论,假设此混合结构放置在空气中,即相对介电常数 $\epsilon=1$ 。由于大部分金属在红外和太赫兹波段可以近似看作理想电导体(PEC),金属电极材料可以选化学稳定性好的金、银,或成本低、易制造的铝。

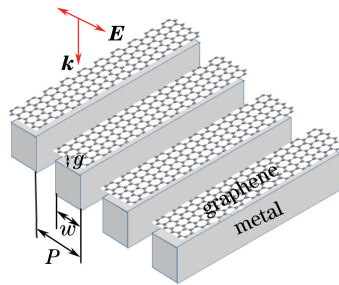


图1 石墨烯/金属光栅混合结构示意图

Fig. 1 Schematic of graphene/metal grating hybrid structure

根据 Kubo 公式,石墨烯的面电导率由电子的带内跃迁和带间跃迁所构成,即 $\sigma=\sigma_{\text{intra}}+\sigma_{\text{inter}}$ (σ_{intra} 为带内跃迁项, σ_{inter} 为带间跃迁项),其大小依赖于响应波长 λ (或角频率 $\omega=2\pi c/\lambda$, c 为光速)、温度 T 、化学势 μ_c 和动量弛豫时间 τ (或衰减速率 γ)。在一定条件下,Kubo 公式可以简化为

$$\sigma_{\text{intra}}(\omega, \mu_c, \gamma, T) = \frac{ie^2 k_B T}{\pi \hbar^2 (\omega + i\gamma)} \left\{ \frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left[\exp \left(\frac{-|\mu_c|}{k_B T} \right) + 1 \right] \right\}, \quad (1)$$

$$\sigma_{\text{inter}}(\omega, \mu_c, \gamma, T) = \frac{ie^2}{4\pi \hbar} \ln \left[\frac{2|\mu_c| - (\omega + i\gamma)\hbar}{2|\mu_c| + (\omega + i\gamma)\hbar} \right], \quad (2)$$

式中 e 为电子电荷, k_B 为玻尔兹曼常数, \hbar 为约化普朗克常数。考虑器件在常温下工作,设 $T=300$ K; $\gamma=ev_F^2/(n\mu_c)$,其中费米速度 $v_F=1 \times 10^6$ m·s⁻¹, n 为载流子的迁移速率。石墨烯的损耗由 n 决定。目前,高纯度石墨烯片的载流子迁移速率在真空中大于 10 m²·V⁻¹·s⁻¹,而在氮化硼中其迁移速率可以达到 6 m²·V⁻¹·s⁻¹[23]。由于在本文中未指定介质类型,可保守估计 $n=1$ m²·V⁻¹·s⁻¹。另外,石墨烯条带宽度均大于 20 nm,石墨烯条带边缘的量子局域效应可忽略不计[24]。

当用微波照射石墨烯时,其电导率的带内跃迁项 σ_{intra} 起主要作用,因此很多文献直接忽略了带间跃迁项 σ_{inter} 。随着入射波频率变大, σ_{inter} 的作用越明显,由于本文中所研究的工作波段包括了近红外,因此同时考虑了这两项对石墨烯光学性质的贡献。从(1)、(2)式可以看出,石墨烯的电导率是一个复数,其实数项代表损耗,虚数项代表折射率因子。当虚部为正的时候,石墨烯表现为金属性质,可以支持横磁(TM)模式;而当虚部为负时,石墨烯表现为介质性质,支持横电(TE)模式。

基于有限元法(FEM)计算此结构的光学性质。数值模型中,在基本单元的左右边界上采用周期边界来仿真此结构的周期性,而在上下边界采用完全匹配吸收层来模拟无限大空间中的复合结构。石墨烯是用面电导率描述的二维材料,因此在数值模型中采用边界来模拟石墨烯。在边界上,石墨烯对光的响应公式为

$$J = \sigma E, \quad (3)$$

式中 J 为石墨烯的面电流, E 为石墨烯的总电场强度。为了得到稳定可靠的结果, 计算区域采用自适应的细分三角形网格, 其中特征区域例如石墨烯和金属条带区域, 网格最小尺寸为 5 nm。

3 结果分析与讨论

为了研究该纳米结构与光的相互作用, 计算了其在 TM 极化光垂直照射下的透射、吸收和反射谱, 如图 2 所示。为了激发 GSPPs, 设定其结构参数: 石墨烯化学势 $\mu_c = 0.5$ eV, 周期 $P = 300$ nm, 双条带宽度 $w = 150$ nm。为了隔离石墨烯与金属, 设两条带间距 $g = 35$ nm。由图 2 可知, 当入射波波长 $\lambda = 9.83$ μm 时, 光的透射率最小, 吸收率最大, 同时还有少量反射。图 2 内插图(磁场分布)也显示: 大部分磁场局限在间隙内, 即激发了磁场谐振, 且可以推断该谐振为一阶谐振模式。由此可认为, 在经过此条带时, 大部分入射波耦合到磁场谐振模式, 该纳米结构拥有了捕获微波的能力。该结构尺寸为纳米量级, 可以应用于设计纳米微波天线。由图 2 内插图还可以知道, 磁场法布里-珀罗(F-P)谐振效应能将光能量限制在薄层内, 使得该结构对波长的选择性不容易受外界环境的影响。石墨烯条带阵列与 TM 波相互作用主要有两种方式: 1) 阵列对波矢补偿, 从而激发 GSPPs 传播模式; 2) 在入射电磁波电场作用下, 单个纳米石墨烯条带中导带的自由电子作被迫振动, 从而激发产生局域石墨烯局域表面等离子体谐振(GLSPR)模式。另外, 由于纳米金属条带在 THz 波段表现为理想导体, 且其尺寸远小于波长, 其作为电极时对 THz 波入射光不起阻碍作用, 但金属条带在石墨烯条带附近, 石墨烯条带模式会受其调制或限制。

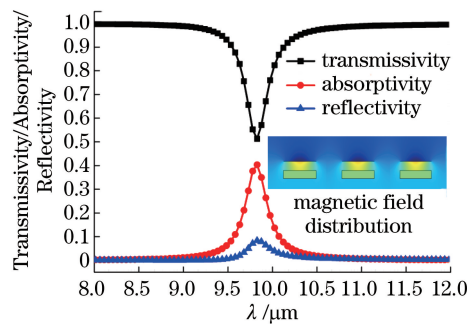


图 2 混合条带结构在 TM 光垂直照射下的透射、吸收、反射谱。内插图为峰位处的磁场分布

Fig. 2 Transmission, absorption and reflection spectra of hybrid ribbon structure under vertical irradiation of TM light, where inset shows magnetic field distribution at peak position

为研究该混合结构中激发的磁场 F-P 谐振模式的来源, 计算了结构的透射谱随条带宽度、阵列周期的变化, 如图 3(a)、(b) 所示。众所周知, GLSPR 的谐振峰与单元结构尺寸有关, 而 GSPPs 的与阵列周期有关。由图 3(a) 可知, 磁谐振峰位随条带宽度变宽而发生红移, 而图 3(b) 中峰位与阵列周期的变化无关。以上结果表明, 自由空间辐射波在石墨烯条带上激发的 GLSPR, 使得石墨烯条带上的自由电子和空穴在条带两端分别聚集, 且激发镜像电荷, 在电荷聚集过程中形成回路电流。根据安培环路定理, 纳米电流回路激发

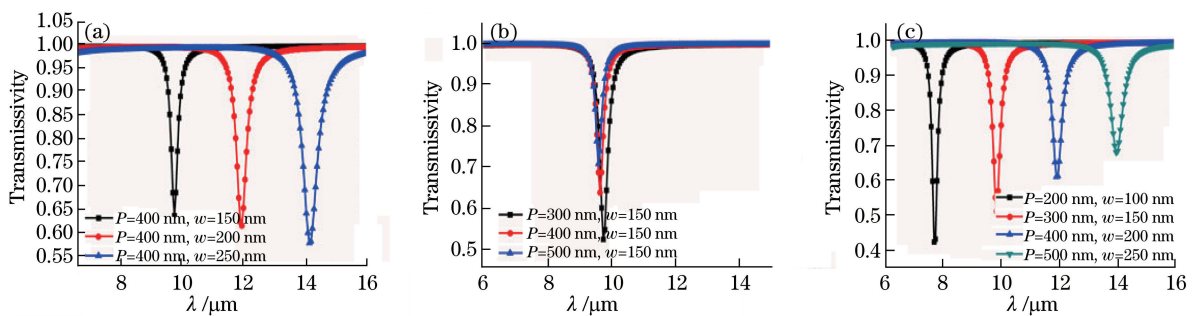


图 3 当 $\mu_c = 0.5$ eV, $g = 35$ nm 时, 混合条带结构在 (a) 不同条带宽度、(b) 不同阵列周期、(c) 固定 $w/P = 0.5$ 下的透射谱

Fig. 3 Transmission spectra of hybrid ribbon structures with (a) different ribbon widths, (b) different array periods, and (c) fixed $w/P = 0.5$ when $\mu_c = 0.5$ eV and $g = 35$ nm

纳米局域的磁场谐振,从而产生磁场 F-P 谐振模式。由图 3(b)还可知,保持条带宽度不变,阵列周期对透射峰值产生影响。这是因为条带宽度相同时,阵列周期越小,条带之间的缝隙就越小,直接透过的光越少;另外,条带密度(单位长度内条带个数)会越大,形成的谐振模式越多,对光的吸收越强,导致透射峰的谷值越低。保持相同阵列占比($w/P=0.5$),混合阵列的结构和透射谱如图 3(c)所示。谐振峰位受到条带宽度的线性调制,随着条带宽度的增加,对应的谐振波长变大,透射峰的半峰全宽($w_{1/2}$)也变宽,品质因子($Q=f/\nabla f$, f 为谐振峰频率, ∇f 为峰宽)减小。这是由于随着波长的变大,对应的磁谐振模式在较长的条带上振荡,内损耗和辐射损耗均变大。为了得到最佳的滤波效果,应尽量采用较小的条带宽度(或使相应的谐振波长变小)。

在 $P=300\text{ nm}$, $w=150\text{ nm}$, $g=35\text{ nm}$ 条件下,计算了混合条带结构滤波的峰位和峰值与石墨烯条带化学势 μ_c 的关系,并和单石墨烯条带结构动态调控效果作对比,如图 4 所示。由图 4 可知,对于混合条带结构,透射峰波长与化学势成反比,即调节门电压使石墨烯化学势增大时,对应的谐振波长变短;透射峰值与化学势成反比。当 $\mu_c=0.9\text{ eV}$ 时,透射峰值达 20%,显示出很好的滤波效果。对比石墨烯/金属混合条带结构与单石墨烯条带结构对微波的透射谱,可知混合条带结构的滤波性能稍差,但加入金属能将磁谐振模式限制在金属和石墨烯之间,使得滤波器的谐振过程几乎不受环境介质的影响。

为了提高混合结构的滤波效果,最直接的方法是增加石墨烯对光的吸收。单层石墨烯对光的吸收会饱和,因此尝试通过增加石墨烯重叠层数来增加吸收。图 5 所示为多层石墨烯混合结构的透射谱图。已有研究指出,当石墨烯少于 5 层时,各层间的耦合可忽略不计,因此多层石墨烯的电导率即为成倍单层石墨烯电导率。当石墨烯层数增加时,其电导率的实部和虚部都相应成倍增加,材料损耗减少。随着层数的增加,对应的谐振峰位发生蓝移,对应的透射抑制也增强,透射率在叠加 5 层时可以降为 20%,如图 5 所示,大大地增加了此结构的滤波能力。由图 5 还可知,2~3 层的石墨烯条带可以达到不错的吸收效果,峰位的移动较少。

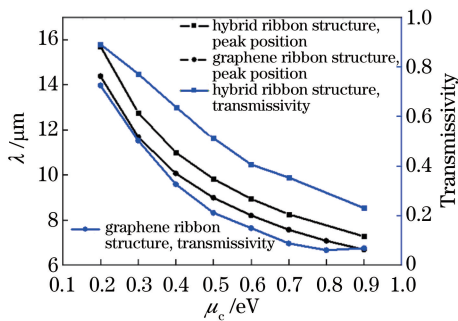


图 4 当 $P=300\text{ nm}$, $w=150\text{ nm}$, $g=35\text{ nm}$ 时,不同结构的透射峰位和峰值与石墨烯化学势间的关系

Fig. 4 Transmissivity peak position and peak value of different structures versus chemical potential of graphene when $P=300\text{ nm}$, $w=150\text{ nm}$, $g=35\text{ nm}$

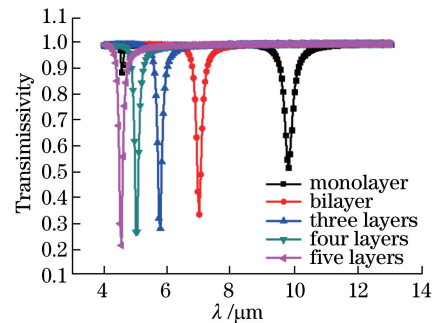


图 5 不同石墨烯层数的石墨烯/金属混合条带结构的透射率图谱

Fig. 5 Transmissivity spectra of graphene/metal hybrid ribbon structures with different numbers of graphene layers

4 结 论

研究了石墨烯/金属混合条带阵列与太赫兹波之间的相互作用,利用石墨烯条带与金属条带所构成的腔结构来形成磁场 F-P 谐振模式,从而增加对太赫兹波的吸收,达到滤波的效果。分析了该结构的透射谱与条带宽度、阵列周期之间的关系,进一步验证了局域表面等离子元是诱导磁谐振模式的主要原因之一。由于该结构包含石墨烯,可以利用石墨烯的可变电导率性质来动态调控其滤波波长,同时还能通过增加石墨烯的层数来增强其滤波能力,最终实现结构优化的门电压可控的太赫兹滤波有源器件。该模型不足之处在于只能实现单频滤波功能,因此下一步工作期待通过重叠多个该复合结构来实现多频滤波功能。

参 考 文 献

- [1] Geim A K, Novoselov K S. The rise of graphene[J]. *Nature Materials*, 2007, 6(3): 183-191.
- [2] Liu Yuanzhong, Zhang Yuping, Cao Yanyan, *et al.* Modulator of tunable modulation depth based on graphene metamaterial[J]. *Acta Optica Sinica*, 2016, 36(10): 1016002.
刘元忠, 张玉萍, 曹妍妍, 等. 基于石墨烯超材料深度可调的调制器[J]. *光学学报*, 2016, 36(10): 1016002.
- [3] Tian Zhenghao, Si Changfeng, Qu Wenshan, *et al.* High-performance organic photovoltaics using solution-processed graphene oxide[J]. *Acta Optica Sinica*, 2017, 37(4): 0416001.
田正浩, 司长峰, 屈文山, 等. 基于溶液加工氧化石墨烯的高性能有机太阳能电池[J]. *光学学报*, 2017, 37(4): 0416001.
- [4] Wu Y, Lin Y M, Bol A A, *et al.* High-frequency, scaled graphene transistors on diamond-like carbon[J]. *Nature*, 2011, 472(7341): 74-78.
- [5] Lin Y M, Valdes-Garcia A, Han S J, *et al.* Wafer-scale graphene integrated circuit[J]. *Science*, 2011, 332(6035): 1294-1297.
- [6] Pince E, Kocabas C. Investigation of high frequency performance limit of graphene field effect transistors[J]. *Applied Physics Letters*, 2010, 97(17): 173106.
- [7] Rogers J A. Electronic materials: Making graphene for macroelectronics[J]. *Nature Nanotechnology*, 2008, 3(5): 254-255.
- [8] Bonaccorso F, Sun Z, Hasan T, *et al.* Graphene photonics and optoelectronics[J]. *Nature Photonics*, 2010, 4(9): 611-622.
- [9] Chanteloup L J C, Albach D, Morris S C, *et al.* Breakthroughs in photonics 2010[J]. *IEEE Photonics Journal*, 2011, 3(2): 241-336.
- [10] Wu Dongqin, Huang Chong, Yang Weifeng. Improvement on pH sensing properties based on surface treatment of graphene plasma[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2017, 54(1): 012401.
吴冬芹, 黄翀, 杨玮枫. 基于石墨烯等离子体表面处理改善 pH 传感特性的研究[J]. *激光与光电子学进展*, 2017, 54(1): 012401.
- [11] Li Yong, Zhang Huifang, Fan Tianxin, *et al.* Theoretical analysis of double dielectric loaded graphene surface plasmon polariton[J]. *Acta Optica Sinica*, 2016, 36(7): 0724001.
李勇, 张惠芳, 范天馨, 等. 双介质加载石墨烯表面等离子体激元波导的理论分析[J]. *光学学报*, 2016, 36(7): 0724001.
- [12] Liu Yuanzhong, Zhang Yuping, Cao Yanyan, *et al.* Modulator of tunable modulation depth based on graphene metamaterial[J]. *Acta Optica Sinica*, 2016, 36(10): 1016002.
刘元忠, 张玉萍, 曹妍妍, 等. 基于石墨烯超材料深度可调的调制器[J]. *光学学报*, 2016, 36(10): 1016002.
- [13] Bi Weihong, Li Caili, Wang Xiaoyu, *et al.* Birefringence and electro-optic properties of graphene covered microfiber [J]. *Acta Optica Sinica*, 2016, 36(10): 1026013.
毕卫红, 李彩丽, 王晓愚, 等. 覆石墨烯微纳光纤双折射与电光调控特性[J]. *光学学报*, 2016, 36(10): 1026013.
- [14] Yao Z H, Huang Y Y, Wang Q, *et al.* Tunable surface-plasmon-polariton-like modes based on graphene metamaterials in terahertz region[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 117: 544-548.
- [15] Huang Y Y, Yao Z H, Hu F R, *et al.* Manipulating magnetoinductive coupling with graphene-based plasmonic metamaterials in THz region[J]. *Plasmonics*, 2016, 11(4): 963-970.
- [16] Salihoglu O, Balci S, Kocabas C. Plasmon-polaritons on graphene-metal surface and their use in biosensors[J]. *Applied Physics Letters*, 2012, 100(21): 213110.
- [17] Chen S, Brown L, Levendorf M, *et al.* Oxidation resistance of graphene-coated Cu and Cu/Ni alloy[J]. *ACS Nano*, 2011, 5(2): 1321-1327.
- [18] Jadidi M M, Sushkov A B, Myers-Ward R L, *et al.* Hybrid metal-graphene plasmons for tunable terahertz technology [J]. *Nano Letters*, 2015, 15(10): 7099-7104.
- [19] Cai Y J, Zhu J F, Liu Q H. Tunable enhanced optical absorption of graphene using plasmonic perfect absorbers[J]. *Applied Physics Letters*, 2015, 106(4): 043105.

- [20] Liu Weiguang, Hu Bin, Li Biao, *et al.* Research progress of optical modulator based on graphene-metal composite structures[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2016, 53(3): 030005.
刘伟光, 胡滨, 李彪, 等. 基于石墨烯-金属复合结构的光学调制器研究进展[J]. *激光与光电子学进展*, 2016, 53(3): 030005.
- [21] Vakil A, Engheta N. Transformation optics using graphene[J]. *Science*, 2011, 332(6035): 1291-1294.
- [22] Cheng H, Chen S Q, Yu P, *et al.* Dynamically tunable plasmonically induced transparency in periodically patterned graphene nanostrips[J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 103(20): 203112.
- [23] Dean C R, Young A F, Meric I, *et al.* Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics [J]. *Nature Nanotechnology*, 2010, 5(10): 722-726.
- [24] Thongrattanasiri S, Manjavacas A, De Abajo F J G. Quantum finite-size effects in graphene plasmons[J]. *ACS Nano*, 2012, 6(2): 1766-1775.