

复式晶格二维石墨烯等离子激元晶体的能带结构与态密度

邱平平¹, 邱伟彬¹, 林志立¹, 陈厚波¹, 任骏波¹, 王加贤¹, 阚强², 潘教青²

¹ 华侨大学信息科学与工程学院, 福建 厦门 361021;

² 中国科学院半导体研究所, 北京 100083

摘要 提出了一种复式晶格二维石墨烯等离子激元晶体结构, 该结构由包含 4 个石墨烯纳米盘的原胞周期性排列组成。通过有限元法迭代求解本征频率, 得到了石墨烯等离子激元晶体的能带结构和态密度。数值仿真结果表明, 所提出的结构存在完全光子带隙, 带隙宽度可达 5.7 THz, 且其位置和带宽可以通过改变石墨烯的化学势来调谐。该结构可以应用在高密度表面等离子激元集成回路和等离激元片内交叉互联技术中。

关键词 表面光学; 完全带隙; 有限元方法; 石墨烯; 表面等离子激元; 态密度

中图分类号 O436 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP54.052401

Energy-Band Structure and Density of States of Composite Lattice Two-Dimensional Graphene Plasmon Polariton Crystals

Qiu Pingping¹, Qiu Weibin¹, Lin Zhili¹, Chen Houbo¹, Ren Junbo¹,
Wang Jiaxian¹, Kan Qiang², Pan Jiaoqing²

¹ College of Information Science and Engineering, Huaqiao University, Xiamen, Fujian 361021, China;

² Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China

Abstract A composite lattice two-dimensional graphene plasmon polariton crystal structure is proposed, which composed of periodically arranged primitive cells with four graphene nanodisks. The energy-band structure and density of states of graphene plasmon polariton crystals are obtained by iteratively solving the eigenfrequencies with the finite element method. The numerical simulation results show that, in the proposed structure, there exists a complete photonic bandgap with a bandgap width of 5.7 THz, and the position and width of this bandgap can be tuned by modifying the chemical potential of graphene. The proposed structure can be applied in the techniques such as high density surface plasmon polariton integrated circuit and on-chip plasmon polariton interconnection.

Key words optics at surfaces; complete bandgap; finite element method; graphene; surface plasmon polariton; density of states

OCIS codes 240.5420; 240.6680; 240.6690

1 引言

光子晶体(PC)最早于1987年由Yablonovich^[1]和John^[2]分别在研究抑制自发辐射和光子局域时被提

收稿日期: 2016-12-12; **收到修改稿日期:** 2017-01-25

基金项目: 国家自然科学基金(6137805)、泉州科技基金(Z1424009)、半导体重点实验室开放基金(KLSMS-1201)、华侨大学研究生科研创新能力培育计划项目(1511301022)

作者简介: 邱平平(1992—),男,硕士研究生,主要从事低维材料微纳光子器件方面的研究。

E-mail: 1511301022@hqu.edu.cn

导师简介: 邱伟彬(1971—),男,博士,副教授,主要从事低维材料微纳光子器件方面的研究。

E-mail: wbqiu@hqu.edu.cn(通信联系人)

出,是一种介电常数呈空间周期性变化的新型光学微结构材料。类似于半导体材料,由于周期性势场作用产生电子能带,光子晶体中也存在由空间周期性调谐的介电常数引起的光子带隙(PBG),处于带隙频率范围内的光是被禁止传播的。近年来,由于光子晶体具有潜在应用价值,大量关于光子晶体的研究被报道,如光子晶体光纤^[3-4]、光子晶体波导^[5-6]、光子晶体微腔^[7-8]。但是,传统的光子晶体器件都是基于介质材料的,大多在微米量级,由于光学衍射极限的存在,很难进一步优化光子晶体器件尺寸。

石墨烯是一种新颖的单原子层二维(2D)材料,其具有出色的电学和光学特性^[9-11]而备受瞩目,如石墨烯光电探测器、调制器、场效应晶体管^[12-15]。相比于传统表面等离子体材料(金、银等贵金属),石墨烯所支持的表面等离子激元(SPP)具有极好的限制能力、相对低的损耗,以及可通过化学掺杂和施加外部电场、磁场实现可调谐性^[16-18],是等离子体材料的理想选择。2012年,Yan等^[19]研究了石墨烯微盘阵列结构的等离子体激发特性;同年,实现了石墨烯纳米盘周期阵列结构对SPP的调控,并且利用在石墨烯下面加缓冲层的方法增加了石墨烯堆叠层数^[20]。2015年,邓新华等^[21]将石墨烯引入到常规一维光子晶体中,构建了可调谐太赫兹光子晶体结构,发现了与常规光子晶体有所不同的能带压缩现象。2016年,Shi等^[22]对石墨烯纳米带阵列结构的能带结构和滤波特性进行了研究。

本文提出了一种复式晶格二维石墨烯等离子激元晶体结构,和普通晶格原胞相比,复式晶格具有更低的结构周期对称性,采用复式晶格可以降低光子晶体结构周期的对称性,同时能够解除布里渊区中高对称点处光子能带简并造成的对光子晶体带隙宽度的限制,增大完全光子带隙的频率范围^[23]。利用基于有限元方法(FEM)的商业软件COMSOL Multiphysics仿真计算了所提出结构的能带结构与态密度(DOS),发现其具有完全光子带隙;此外,还发现所提出结构的能带位置和带宽可以通过改变石墨烯的化学势来调谐。

2 模拟方法与模型

所提出的复式晶格光子晶体结构为周期性排列的光子晶体原胞,每个原胞中含有4个圆形纳米盘,如图1所示。在一片独立的石墨烯上,半径为 r 的圆形纳米盘的化学势为 μ_{c2} ,纳米盘周围石墨烯的化学势为 μ_{c1} , a 为晶格常数,4个圆形纳米盘的圆心坐标分别为 $(-a/4, 0)$ 、 $(a/4, 0)$ 、 $(0, a/4)$ 和 $(0, -a/4)$,沿 x 轴和 y 轴方向设置为周期性边界条件。

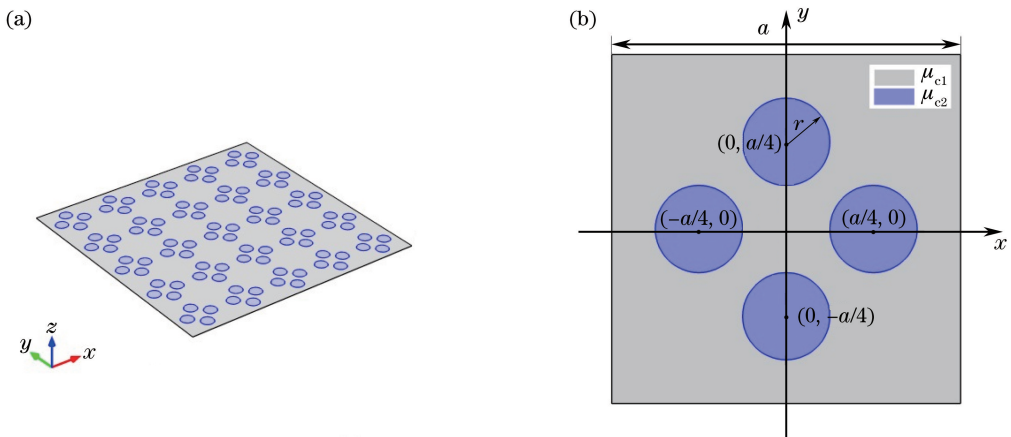


图1 复式晶格二维石墨烯等离子激元晶体结构。(a) 三维视图;(b) 计算窗口

Fig. 1 Structure diagram of composite lattice 2D graphene plasmon polariton crystals.

(a) Three-dimensional view; (b) computational window

在本模型中,单原子层石墨烯作为零厚度薄膜可用其有效折射率来表征。石墨烯材料的有效折射率定义为 $n_{\text{eff}} = \beta / k_0$,其中 k_0 为真空中波数, β 为传播常数。对于横(TM)磁模,由单层石墨烯支持的SPP的传播常数 β 可以表示为^[24-25]

$$\beta = k_0 \sqrt{1 - \left(\frac{2}{\eta_0 \sigma_g} \right)^2}, \quad (1)$$

式中 $\eta_0 = (\mu_0/\epsilon_0)^{1/2}$ 为空气阻抗, μ_0 和 ϵ_0 分别为真空中磁导率和介电常数; σ_g 为表面电导率。石墨烯的表面电导率 σ_g , 包含带间电子跃迁电导率 σ_{inter} 和带内电子-光子散射电导率 σ_{intra} , 由 Kubo 公式^[26-27]

$$\sigma_g = \sigma_{\text{intra}} + \sigma_{\text{inter}}, \quad (2)$$

$$\sigma_{\text{intra}} = \frac{-ie^2 k_B T}{\pi \hbar^2 (\omega - i/\tau)} \left\{ \frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left[1 + \exp \left(-\frac{\mu_c}{k_B T} \right) \right] \right\}, \quad (3)$$

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

式中 μ_c 为石墨烯的化学势, τ 为电子的动量弛豫时间。 ω 为等离子激元的角频率, e 为电子电荷, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为温度, \hbar 为约化普朗克常数。值得注意的是, 石墨烯的化学势可以通过化学掺杂或者施加外部电场、磁场进行调谐^[16-18]。Efetov 等^[28] 已经在实验上证明, 石墨烯的化学势最高可调谐至 2 eV。同时, 高质量悬挂石墨烯的迁移率高达 $10^5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 相应的弛豫时间大于 1.5 ps^[29]。为保证模型计算的准确性, 设置 $\tau = 0.5 \text{ ps}$, 石墨烯的化学势最高设置为 0.9 eV。

由于布拉维格子的对称性, 计算正方格子光子晶体的能带可等同于计算 Bloch 波矢沿第一布里渊区 (BZ) 的不可约布里渊区边界 Γ -X-M- Γ 连续变化所形成的能带。利用 COMSOL Multiphysics 的射频模块的本征求解器, 迭代求解不可约布里渊区边界上波矢对应的能带的本征频率, 即可得到石墨烯等离子激元晶体的能带结构。光子晶体态密度的定义为在单位频率范围内光子晶体本征态的数目, 通常可表示为^[30-31]

$$N(\omega) = \sum_n \int_{\text{BZ}} d^2 \mathbf{k} \delta[\omega - \omega_n(\mathbf{k})], \quad (5)$$

式中 $\delta[\omega - \omega_n(\mathbf{k})]$ 表示提取相同频率下的本征态, \mathbf{k} 为波矢。使用 Matlab 对所得到的本征频率数组进行编程归类求和, 计算出单位频率范围内本征频率的数目, 即为光子晶体态密度。之后进行积分求和, 将不可约布里渊区边界 Γ -X-M- Γ 连续变化所形成的能带中相同频率下的本征态数目相加, 得到相应的光子晶体态密度分布。

3 结果分析

由于石墨烯的有效折射率随着频率的变化而变化, 因此难以获得石墨烯等离子激元晶体本征频率的解析解。为了得到石墨烯等离子激元晶体的能带结构, 需要将每一个 k 对应的本征频率进行迭代。图 2 为复式晶格二维石墨烯等离子激元晶体的能带结构及其对应态密度的计算结果, 其中晶格常数 $a = 40 \text{ nm}$, 圆形石墨烯纳米盘半径 $r = 5 \text{ nm}$, $\mu_{c1} = 0.6 \text{ eV}$, $\mu_{c2} = 0.9 \text{ eV}$, k 为波矢大小。图 2(a) 中第一条能带覆盖频率范围为 103.5~125.7 THz, 第二条能带覆盖频率范围为 131.3~140.8 THz, 在频率范围 125.7~131.3 THz 之间不存在本征频率, 此频率范围内的 SPP 是禁止传播的, 即所谓的光子带隙, 其带宽为 5.6 THz, 其中图 2(a) 内插图为第一布里渊区, Γ -X-M- Γ 所围成的区域为它的不可约布里渊区。从图 2(b) 也可以看出, 光子带隙中不存在任何本征态, 态密度为 0。

计算了化学势分别为 $\mu_{c1} = 0.65 \text{ eV}$, $\mu_{c2} = 0.9 \text{ eV}$ 和 $\mu_{c1} = 0.7 \text{ eV}$, $\mu_{c2} = 0.9 \text{ eV}$ 时的复式晶格二维石墨烯

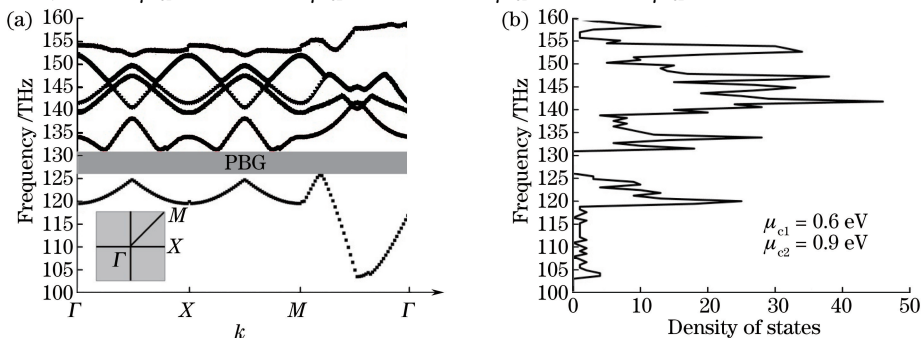


图 2 复式晶格二维石墨烯等离子激元晶体的能带结构与态密度。(a)能带结构;(b)态密度

Fig. 2 Energy-band structure and density of states of composite lattice 2D graphene plasmon polariton crystals.

(a) Energy-band structure; (b) density of states

等离子激元晶体的前两条能带结构,如图3所示。图3(a)中两条能带覆盖频率范围分别为107.4~131.4 THz和137.1~147.6 THz,光子带隙宽度为5.7 THz;图3(b)中两条能带覆盖频率范围分别为110.8~136.8 THz和142.4~153.9 THz,光子带隙宽度为5.6 THz。可以看出,通过调谐石墨烯的化学势,能带位置有明显的变化,带隙宽度也稍有改变。

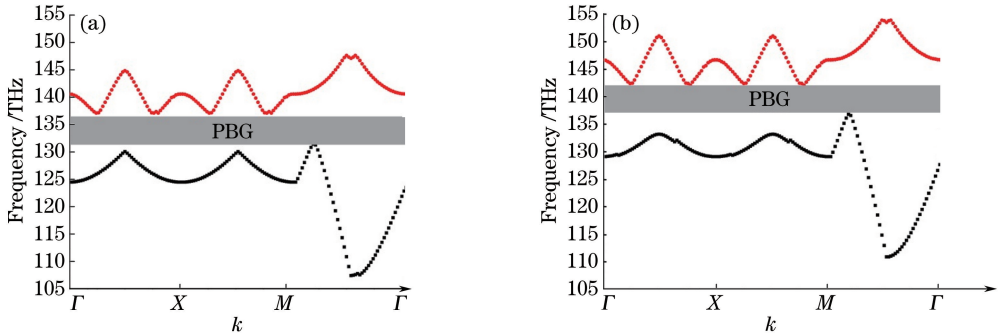


图3 不同化学势下复式晶格二维石墨烯等离子激元晶体的前两条能带结构。

(a) $\mu_{c1}=0.65\text{ eV}, \mu_{c2}=0.9\text{ eV}$; (b) $\mu_{c1}=0.7\text{ eV}, \mu_{c2}=0.9\text{ eV}$

Fig. 3 The first two energy-band structures of composite lattice 2D graphene plasmon polariton crystals under different chemical potentials. (a) $\mu_{c1}=0.65\text{ eV}, \mu_{c2}=0.9\text{ eV}$; (b) $\mu_{c1}=0.7\text{ eV}, \mu_{c2}=0.9\text{ eV}$

4 结 论

提出了一种复式晶格二维石墨烯等离子激元晶体结构,石墨烯周期性化学势调谐产生了光子带隙。利用有限元方法计算了石墨烯等离子激元晶体的能带结构和态密度,发现其能带位置和带隙宽度可以通过改变石墨烯的化学势来调谐。与传统的垂直入射不同,本结构采用面内入射,单个原胞尺寸为 $40\text{ nm}\times 40\text{ nm}$,有利于片上集成。该结构在高密度集成光电系统中有潜在的应用价值。

参 考 文 献

- [1] Yablonovich E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(20): 2059.
- [2] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(23): 2486.
- [3] Finger M A, Iskhakov T S, Joly N Y, *et al.* Raman-free, noble-gas-filled photonic-crystal fiber source for ultrafast, very bright twin-beam squeezed vacuum[J]. Phys Rev Lett, 2015, 115(14): 143602.
- [4] Liu Jianfei, Liu Fan, Zeng Xiangye, *et al.* Sensing characteristics of photonic crystal fiber filled with magnetic fluid[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53(7): 070601.
刘剑飞, 刘帆, 曾祥烨, 等. 基于磁流体填充的光子晶体光纤传感特性研究[J]. 激光与光电子学进展, 2016, 53(7): 070601.
- [5] Goban A, Hung C L, Hood J D, *et al.* Superradiance for atoms trapped along a photonic crystal waveguide[J]. Phys Rev Lett, 2015, 115(6): 063601.
- [6] Su Kang, Wang Ziming, Liu Jianjun. Three waveguides directional coupler based on 2D square lattice photonic crystal[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(3): 0323002.
苏康, 王梓名, 刘建军. 二维正方晶格光子晶体三光波导方向耦合器[J]. 光学学报, 2016, 36(3): 0323002.
- [7] Majumdar A, Kim J, Vuckovic J, *et al.* Electrical control of silicon photonic crystal cavity by graphene[J]. Nano Lett, 2013, 13(2): 515-518.
- [8] Bose R, Sridharan D, Kim H, *et al.* Low-photon-number optical switching with a single quantum dot coupled to a photonic crystal cavity[J]. Phys Rev Lett, 2012, 108(22): 227402.
- [9] Vakil A, Engheta N. Transformation optics using graphene[J]. Science, 2011, 332(6035): 1291-1294.
- [10] Avouris P. Graphene: Electronic and photonic properties and devices[J]. Nano Lett, 2010, 10(11): 4285-4294.
- [11] Qiu W B, Liu X H, Zhao J, *et al.* Nanofocusing of mid-infrared electromagnetic waves on graphene monolayer[J]. Appl Phys Lett, 2014, 104(4): 041109.

- [12] Engel M, Steiner M, Lombardo A, *et al.* Light-matter interaction in a microcavity-controlled graphene transistor[J]. Nature Communications, 2012, 3: 906.
- [13] Gan X, Shiue R J, Gao Y, *et al.* Chip-integrated ultrafast graphene photodetector with high responsivity[J]. Nature Photonics, 2013, 7(11): 883-887.
- [14] Liu M, Yin X B, Ulin-Avila E, *et al.* A graphene-based broadband optical modulator[J]. Nature, 2011, 474(7349): 64-67.
- [15] Yang Hua, Cao Yang, He Junhui, *et al.* Research progress in graphene-based infrared photodetectors[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53(7): 070601.
杨花, 曹阳, 贺军辉, 等. 石墨烯红外光电探测器研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2016, 53(7): 070601.
- [16] Fei Z, Rodin A S, Andreev G O, *et al.* Gate-tuning of graphene plasmons revealed by infrared nano-imaging[J]. Nature, 2012, 487(7405): 82-85.
- [17] Chen J, Badioli M, Alonso-González P, *et al.* Optical nano-imaging of gate-tunable graphene plasmons[J]. Nature, 2012, 487(7405): 77-81.
- [18] Koppens F H L, Chang D E, Javier G D A F. Graphene plasmonics: A platform for strong light-matter interactions[J]. Nano Lett, 2011, 11(8): 3370-3377.
- [19] Yan H G, Li Z Q, Li X S, *et al.* Infrared spectroscopy of tunable Dirac terahertz magneto-plasmons in graphene[J]. Nano Lett, 2012, 12(7): 3766-3771.
- [20] Yan H G, Li X, Chandra B, *et al.* Tunable infrared plasmonic devices using graphene/insulator stacks [J]. Nature Nanotechnology, 2012, 7(5): 330-334.
- [21] Deng Xinhua, Yuan Jiren, Liu Jiangtao, *et al.* Tunable terahertz photonic crystal structures containing graphene[J]. Acta Physica Sinica, 2015, 64(7): 074101.
邓新华, 袁吉仁, 刘江涛, 等. 基于石墨烯的可调谐太赫兹光子晶体结构[J]. 物理学报, 2015, 64(7): 074101.
- [22] Shi B, Cai W, Zhang X Z, *et al.* Tunable band-stop filters for graphene plasmons based on periodically modulated graphene[J]. Scientific Reports, 2016, 6: 26796.
- [23] Han Changsheng, Yang Yibiao, Wang Yuncai, *et al.* Bandgap characteristics of two-dimensional Archimedes ($4, 8^2$) compound lattice photonic crystals with dielectric rods[J]. Acta Photonica Sinica, 2014, 43(6): 616003.
韩昌盛, 杨毅彪, 王云才, 等. 二维介质柱型 Archimedes($4, 8^2$) 复式晶格光子晶体禁带特性研究 [J]. 光子学报, 2014, 43(6): 616003.
- [24] Zhao J, Qiu W B, Huang Y X, *et al.* Investigation of plasmonic whispering-gallery mode characteristics for graphene monolayer coated dielectric nanodisks[J]. Opt Lett, 2014, 39(19): 5527-5530.
- [25] Huang Y X, Qiu W B, Lin S X, *et al.* Investigation of plasmonic whispering gallery modes of graphene equilateral triangle nanocavities[J]. Science China Information Sciences, 2016: 59(4): 042413.
- [26] Hanson G W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene[J]. Journal of Applied Physics, 2008, 103(6): 064302.
- [27] Gusynin V P, Sharapov S G, Carbotte J P. Magneto-optical conductivity in graphene[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2006, 19(2): 026222.
- [28] Efetov D K, Kim P. Controlling electron-phonon interactions in graphene at ultrahigh carrier densities[J]. Phys Rev Lett, 2010, 105(25): 256805.
- [29] Zhang T, Chen L, Wang B, *et al.* Tunable broadband plasmonic field enhancement on a graphene surface using a normal-incidence plane wave at mid-infrared frequencies[J]. Scientific Reports, 2015, 5: 11195.
- [30] Lourtioz J M, Benisty H, Berger V, *et al.* Photonic crystals: Towards nanoscale photonic devices[M]. 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 2008: 59-77.
- [31] Sukhoivanov I A, Igor V G. Photonic crystals: Physics and practical modeling[M]. Berlin: Springer-Verlag, 2009: 96-103.