

基于时域有限差分法的石墨烯纳米带阵列 多频滤波特性研究

阳胜, 曾春平, 肖驰, 周亚乔, 王昊, 马琨*

昆明理工大学理学院, 云南 昆明 650500

摘要 基于石墨烯纳米带阵列的共振效应, 提出了三层石墨烯纳米带阵列结构, 研究了该阵列参数对复合结构的多频滤波特性的影响规律。利用时域有限差分(FDTD)法, 讨论了费米能级、石墨烯带宽占比、外界折射率对滤波频率的影响。研究结果表明, 增加费米能级能使谐振频率蓝移, 增加石墨烯带宽占比和外界折射率均使谐振频率红移, 费米能级改变 0.1 eV 时, 谐振频率的改变量超过 5 THz。

关键词 集成光学; 石墨烯纳米带; 多频滤波器; 时域有限差分方法; 表面等离子体

中图分类号 O436

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP56.061301

Multi-Frequency Filtering Characteristics of Graphene-Nanoribbon Arrays Based on Finite Difference Time Domain Method

Yang Sheng, Zeng Chunping, Xiao Chi, Zhou Yaqiao, Wang Hao, Ma Kun*

School of Science, Kunming University of Science and Technology, Kunming, Yunnan 650500, China

Abstract With the help of the resonance effect of graphene nanoribbon arrays, a three-layer graphene nanoribbon array is proposed. The influences of the various parameters of this array on the multi-frequency filtering characteristics of the composite structure are investigated. With the finite-difference time-domain (FDTD) method, the influences of Fermi level, graphene bandwidth ratio, and external refractive index on filter frequency are discussed. The research results show that the increase of Fermi level can make the resonant frequency blue shift, in contrast, the increase of graphene bandwidth ratio and external refractive index can both make the resonant frequency red shift. When Fermi level is changed by 0.1 eV, the resonant frequency can be changed by an amount of more than 5 THz.

Key words integrated optics; graphene nanoribbons; multi-frequency filters; finite difference time domain method; surface plasmon

OCIS codes 130.7408; 240.6680; 300.6495; 310.6628

1 引言

自 21 世纪初, 基于高质量原子层石墨烯的场效应晶体管被成功研制^[1-2], 人们对凝聚态物质中二维原子晶体材料开启了新认识, 迅速成为物理学、材料科学和光电子领域的研究热点^[3]。随着研究的深入, 这种新型的二维材料很快渗透到各种激光器、光调制器、光探测器以及表面等离子体(SPP)等方面, 并且在新一代光通信系统和集成光学器件的设计制

作中展现出了极具潜力的应用前景^[4-5]。

石墨烯材料具有电子迁移率高、电导率可调、尺寸小等优点, 并且拥有优异的力学性质和较高的熔点等独特优势, 能够在恶劣环境经受住考验, 是作为晶体管、触摸屏、太阳能电池的理想材料^[6]。但石墨烯是透明材料, 此性质导致石墨烯材料与光作用较为微弱, 许多光电性能无法展现^[7-8]。表面等离子体具有很强的局域场增强特性, 可极大地增强石墨烯和光的相互作用^[9]。

收稿日期: 2018-08-31; 修回日期: 2018-10-05; 录用日期: 2018-10-17

基金项目: 国家自然科学基金(51278235)、云南省教育厅科学研究基金重大项目(ZD2015003)

* E-mail: Makun_box@sina.com

石墨烯表面等离子体相关研究已经取得了巨大进展^[10]。初始阶段,研究人员对石墨烯表面等离子体主要是理论分析,自2008年起,Wang等^[11-12]实际测得外加电压对石墨烯光电效应的影响,通过在石墨烯和硅之间外加电压来调控石墨烯化学势。经过一段时间的研究探索,将石墨烯等离子体材料仿真应用于各种光子器件,例如石墨烯波导偏振器、功分器、滤波器^[13]。与传统等离子体材料(金、银)相比,石墨烯等离子体材料更具优势^[14]:1)具有超强的约束能力,石墨烯等离子体波的折射率约为金属表面等离子体波的折射率1.03的68倍;2)具有灵活的可调性,石墨烯电导率可通过外加电压进行任意调控;3)具有极低的传输损耗,高掺杂浓度下,石墨烯表面等离子体波具有极高的载流子浓度,传播距离是波长的十几倍^[15-16]。因此,石墨烯表面等离子体在光电信息领域倍受研究者关注^[17-18]。

本文提出的石墨烯纳米阵列带采用传统的周期结构,设计出石墨烯纳米阵列周期性垂直堆叠的复合结构,利用时域有限差分(FDTD)仿真软件建立三层石墨烯纳米带阵列,研究石墨烯纳米带阵列各参数对复合结构激发多频滤波特性的规律,并讨论费米能级 E_f 、石墨烯带宽占比 D 、外界折射率 n 对滤波频率的影响。结果表明,该复合结构可实现多频带滤波、宽光谱调制,拓展了石墨烯材料在光电子器件中的应用。

2 基本模型与理论研究

2.1 石墨烯纳米带阵列复合结构

石墨烯纳米带阵列复合结构如图1所示,此复合结构由上中下(i, ii, iii)3层石墨烯纳米带阵列构成,单层石墨烯纳米带沿 X 方向周期排列在空气中,周期为 p , X 方向设定为无限长,纳米带的厚度为0.5 nm,纳米带的宽度为 w ,上中(i, ii)层纳米的间隔为 d ,中下(ii, iii)层纳米带间隔为 d 。入射光为沿 X 方向极化的平面波,以 Y 轴负方向对周期排布的石墨烯纳米带进行垂直照射,要使入射波激发模型中的等离子体波并在石墨烯纳米带中传播,入射场必须满足相位匹配方程^[19]

$$\operatorname{Re}(k_g) - \frac{2\pi}{c}f_0 \sin \theta = \frac{2\pi}{p}, \quad (1)$$

式中: k_g 为表面等离子体波的波数; f_0 为共振频率; c 为真空中的光速; θ 为入射角。当平面波为垂直入射时,共振频率可表示为

$$f_0 = \frac{e}{\sqrt{2}\pi\hbar} \sqrt{\frac{E_f}{\epsilon_0(\epsilon_{r1} + \epsilon_{r2})p}}, \quad (2)$$

式中: e 为电子电荷; \hbar 为约化的普朗克常数; E_f 为石墨烯材料的费米能级且 $E_f > 0$; ϵ 为有效介电常数; ϵ_{r1} 和 ϵ_{r2} 分别为石墨烯纳米带上表面和下表面介质的有效介电常数。(2)式即为激发表面等离子体波的共振条件。

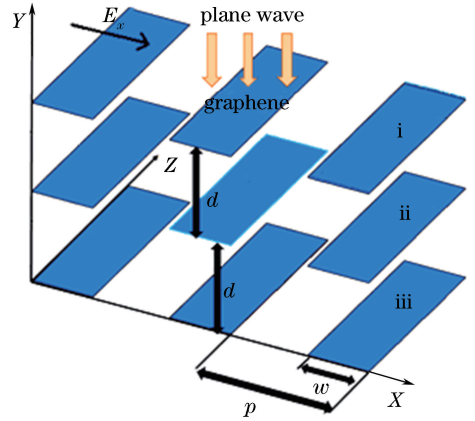


图1 复合结构示意图

Fig. 1 Schematic of composite structure

2.2 石墨烯电导率模型

在光学应用领域,石墨烯与其他光学材料主要有两个不同点:一方面,它是一种非常薄的材料层,其厚度与单一原子一样小;另一方面,它可以用表面电导率和体积电导率来表征。通常状况下,表面电导率要比体积电导率好得多,根据Kubo公式可表示为 $\sigma = \sigma_{\text{intra}} + \sigma_{\text{inter}}$ 。其中带内项 σ_{intra} 具体表达式为^[20-21]

$$\sigma_{\text{intra}}(\omega) = \frac{2e^2 T}{\pi\hbar} \frac{j}{\omega + j\tau^{-1}} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{E_f}{2K_B T} \right) \right], \quad (3)$$

带间项 σ_{inter} 具体表达式为

$$\sigma_{\text{inter}}(\omega) = \frac{e^2}{4\hbar} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \frac{\hbar\omega - 2E_f}{2K_B T} - \frac{j}{2\pi} \ln \frac{(\hbar\omega - 2E_f)^2}{(\hbar\omega - 2E_f)^2 + 4(K_B T)^2} \right], \quad (4)$$

式中: ω 为角频率; T 为温度; K_B 为玻尔兹曼常数; $\tau = \mu E_f / (e\nu_f^2)$ 为弛豫时间,其中 ν_f 和 μ 分别为石墨烯材料的费米速度和电子迁移率。本文主要针对太赫兹和远红外波段开展研究,在此波段内,带内项在石墨烯模型中起主要作用,故将电导率公式近似用Drude模型表示为

$$\sigma_{\text{intra}}(\omega) = j \frac{e^2 E_f}{\pi\hbar^2 (\omega + j\tau^{-1})}. \quad (5)$$

2.3 FDTD 仿真设置

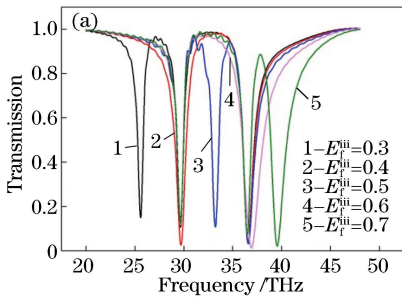
数值仿真环节使用FDTD模拟软件, X 方向设

置为反对称边界条件, Y 方向设置为周期性边界条件, Z 方向设置为完美匹配层(PML)边界条件, 网格精度设置为 2.5 nm, 由于石墨烯纳米带置于空气中, 背景折射率设置为 1, 当环境温度为 300 K 时, 可以将化学势能与费米能级近似相等($\mu_c \approx E_f$), 故环境温度设置为 300 K。

3 多频滤波特性分析

3.1 费米能级 E_f^{III} 对输出光谱的影响

图 2(a) 展示了石墨烯 III 的费米能级分别取 $E_f^{\text{III}} = 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$ eV 时石墨烯纳米带阵列的光谱响应曲线, 其中 $E_f^{\text{I}} = 0.4$ eV, $E_f^{\text{II}} = 0.6$ eV, $w_{\text{I}} = w_{\text{II}} = w_{\text{III}} = 150$ nm。图 2(b) 为滤波频率随费



米能级 E_f^{III} 的变化关系。可以观察到, 当 $E_f^{\text{III}} \neq E_f^{\text{II}}$ 且 $E_f^{\text{III}} \neq E_f^{\text{I}}$ 时, 光谱响应曲线存在 3 个谐振频率, 分别由石墨烯 I、II、III 产生, 而当 $E_f^{\text{III}} = E_f^{\text{II}}$ 或 $E_f^{\text{III}} = E_f^{\text{I}}$ 时, 光谱响应曲线存在 2 个谐振频率, 这是由于当石墨烯费米能级相等时, 谐振频率也相同。图 2(b) 表示随着石墨烯 E_f^{III} 值的增加, 石墨烯 III 的谐振频率随之增大, 石墨烯 I、II 的谐振频率几乎不变, 这是由于谐振频率与费米能级成正比, E_f^{III} 增加, 谐振波谷蓝移, 并且, E_f^{III} 每增加 0.1, 谐振频率增加约 5 THz。由此可以得到, 复合结构中每增加一层不同费米能级的石墨烯纳米带阵列, 输出光谱中就会增加一个对应的谐振频率, 通过改变费米能级的值, 可以实现对滤波器自由光谱(两相邻谐振频率之差)的调节。

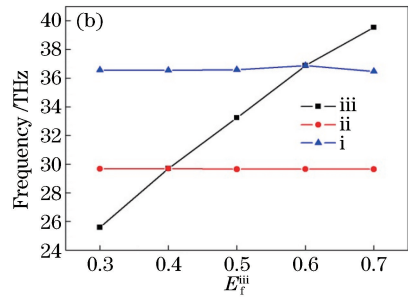


图 2 费米能级 E_f^{III} 对输出光谱的影响。(a) 费米能级 E_f^{III} 不同时复合结构输出的光谱图; (b) 滤波频率随费米能级 E_f^{III} 的变化
Fig. 2 Effect of Fermi level E_f^{III} on output spectrum. (a) Output spectra of composite structure under different Fermi levels E_f^{III} ; (b) filter frequency versus Fermi level E_f^{III}

3.2 带宽占比 D_{III} 对输出光谱的影响

图 3(a) 展示了当参数 $p = 300$ nm, $E_f^{\text{III}} = E_f^{\text{II}} = E_f^{\text{I}} = 0.4$ eV, D 为带宽占比, $D_{\text{I}} = 0.38, D_{\text{II}} = 0.54$ 时, 改变石墨烯 III 带宽与周期的比值 $D_{\text{III}} = 0.30, 0.38, 0.46, 0.54, 0.62$ 的输出光谱, 图 3(b) 为滤波频率随占比 D_{III} 的变化关系。由图可以观察到, 当 $D_{\text{III}} \neq D_{\text{II}}$ 且 $D_{\text{III}} \neq D_{\text{I}}$ 时, 光谱响应曲线存在 3 个谐振频率, 分别由石墨烯 I、II、III 产生; 反之, 当 $D_{\text{III}} = D_{\text{II}}$ 或 $D_{\text{III}} = D_{\text{I}}$, 光谱

响应曲线仅存在 2 个谐振频率, 这是由于当石墨烯带宽占比相等时, 两谐振波波谷重合。图 3(b) 表示随着带宽占比 D_{III} 增加, 石墨烯 III 的谐振频率随之减小, 石墨烯 I、II 的谐振频率几乎不受影响, 这是由于谐振频率与带宽成反比, D_{III} 增加, 谐振频率红移。同样得出, 当复合结构中每增加一层不同带宽占比的石墨烯阵列, 输出光谱中就会增加一个对应的谐振频率, 通过调整带宽与周期的占比, 可以对输出光谱实现宽光谱调制。

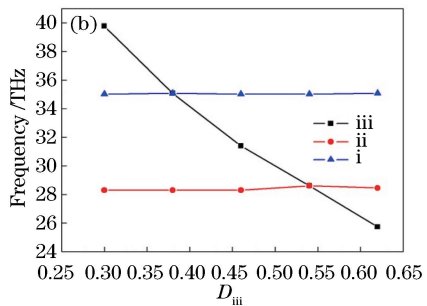
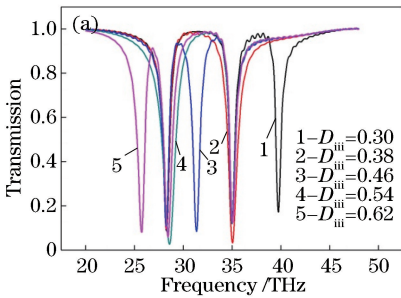


图 3 带宽占比 D_{III} 对输出光谱的影响。(a) D_{III} 不同时复合结构输出的光谱图; (b) 滤波频率随 D_{III} 的变化
Fig. 3 Effect of bandwidth ratio D_{III} on output spectrum. (a) Output spectra of composite structure under different D_{III} ; (b) filter frequency versus D_{III}

3.3 折射率 n_{iii} 对输出光谱的影响

在 i、ii、iii 层石墨烯纳米带的下表面,分别引入一层宽为 90 nm 电解质材料,其折射率分别为 $n_i, n_{ii}, n_{\text{iii}}$ 。图 4(a) 给出了该结构中 $n_{\text{iii}} = 1.1, 1.3, 1.4, 1.7, 1.9$, $n_i = 1.3, n_{ii} = 1.7, E_{\text{p}}^{\text{iii}} = E_{\text{p}}^{\text{ii}} = E_{\text{p}}^{\text{i}} = 0.7 \text{ eV}, D_{\text{iii}} = D_{\text{ii}} = D_{\text{i}} = 0.5, p = 300 \text{ nm}$ 的输出光谱图。从图 3(a) 可以看出,当 $n_{\text{iii}} = 1.1$ 时,输出光谱分别在 28.51, 34.22, 37.53 THz 处存在 3 个谐振频率,分别由石墨烯纳米带阵列 i、ii、iii 产生。

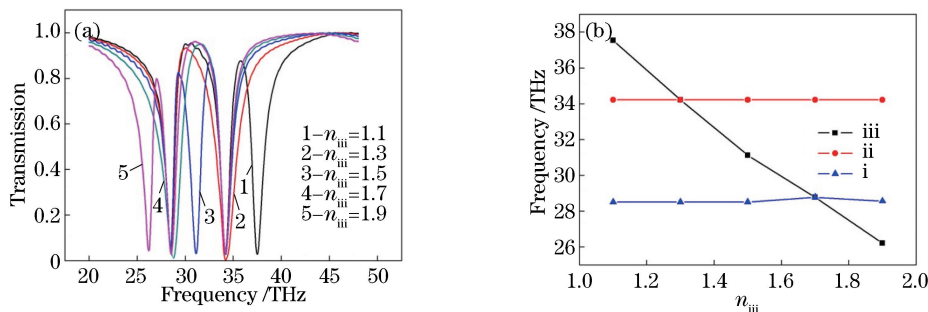


图 4 折射率 n_{iii} 对输出光谱的影响。(a) n_{iii} 不同时复合结构输出的光谱图;(b)滤波频率随 n_{iii} 的变化

Fig. 4 Effect of refractive index n_{iii} on output spectrum. (a) Output spectra of composite structure under different n_{iii} ; (b) filter frequency versus n_{iii}

4 结 论

采用石墨烯纳米带阵列为腔体,纵切面采用 3 层垂直结构,以入射光激发谐振的匹配条件和石墨烯材料的理论基础,利用 FDTD 仿真软件建立了结构模型,并利用该软件分析得出费米能级、石墨烯带宽占比、外界折射率与滤波频率之间的关系。此外,对该结构调制能力进行分析,可得:对费米能级改变 0.1 eV,可使谐振频率的改变量超过 5 THz,宽光谱的调制能力不仅可以增大频率的选择范围,而且有利于将该材料结构应用于调制领域。此模型的提出,拓展了石墨烯在多频滤波领域的应用,并为光电子芯片的研究提供了一定的指导意义。

参 考 文 献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S, *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films [J]. *Science*, 2004, 306(5696): 666-669.
- [2] Song Y W, Jang S Y, Han W S, *et al.* Graphene mode-lockers for fiber lasers functioned with evanescent field interaction [J]. *Applied Physics Letters*, 2010, 96(5): 051122.
- [3] Liu M, Yin X B, Zhang X. Double-layer graphene optical modulator[J]. *Nano Letters*, 2012, 12(3):

当电解质折射率 n_{iii} 由 1.1 增加到 1.9 时,输出光谱的谐振频率随着折射率的增加而减小,石墨烯 i、ii 的谐振频率几乎不发生改变,这是由于当折射率增加时,石墨烯纳米带阵列 iii 下表面的介电常数 ϵ_r 增大,而 ϵ_r 与谐振频率成反比,导致谐振频率减小。图 4(b) 为滤波频率随折射率 n_{iii} 的变化关系,当 n_{iii} 不断增加且 n_i, n_{ii} 保持不变时,石墨烯 iii 谐振频率发生红移,石墨烯 i、ii 的谐振频率保持不变。

1482-1485.

- [4] Grigorenko A N, Polini M, Novoselov K S. Graphene plasmonics[J]. *Nature Photonics*, 2012, 6(11): 749-758.
- [5] Gosciniaik J, Tan D T H. Graphene-based waveguide integrated dielectric-loaded plasmonic electro-absorption modulators [J]. *Nanotechnology*, 2013, 24(18): 185202.
- [6] Liu W G, Hu B, Li B, *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.
- [7] Chu H S, How Gan C. Active plasmonic switching at mid-infrared wavelengths with graphene ribbon arrays [J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 102(23): 231107.
- [8] Bi W H, Li C L, Wang X Y, *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.

- [9] Liu J F, Wright A R, Zhang C, *et al.* Strong terahertz conductance of graphene nanoribbons under a magnetic field[J]. Applied Physics Letters, 2008, 93(4): 041106.
- [10] Zhang Y B, Tang T T, Girit C, *et al.* Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene[J]. Nature, 2009, 459(7248): 820-823.
- [11] Efetov D K, Kim P. Controlling electron-phonon interactions in graphene at ultrahigh carrier densities [J]. Physical Review Letters, 2010, 105 (25): 256805.
- [12] Liu Y Z, Zhang Y P, Cao Y Y, *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] Qiu P P, Qiu W B, Lin Z L, *et al.* Energy-band structure and density of states of composite lattice two-dimensional graphene plasmon polariton crystals [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54 (5):052401.
邱平平, 邱伟彬, 林志立, 等. 复式晶格二维石墨烯等离子体晶体的能带结构与态密度 [J]. 激光与光电子学进展, 2017, 54(5): 052401.
- [14] Thongrattanasiri S, Manjavacas A, García de Abajo F J. Quantum finite-size effects in graphene plasmons [J]. ACS Nano, 2012, 6(2): 1766-1775.
- [15] Bao Q L, Zhang H, Yang J X, *et al.* Graphene-polymer nanofiber membrane for ultrafast photonics [J]. Advanced Functional Materials, 2010, 20(5): 782-791.
- [16] Chen S 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.
- [17] Liu M, Yin X B, Ulin-Avila E, *et al.* A graphene-based broadband optical modulator [J]. Nature, 2011, 474(7349): 64-67.
- [18] 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.
- [19] Xu J L, Li X L, Wu Y Z, *et al.* Graphene saturable absorber mirror for ultra-fast-pulse solid-state laser [J]. Optics Letters, 2011, 36(10): 1948-1950.
- [20] Falkovsky L A. Optical properties of graphene[J]. Journal of Physics: Conference Series, 2008, 115 (129): 012004.
- [21] Xu B, Martinez A, Set S Y, *et al.* Polarization maintaining, nanotube-based mode-locked lasing from figure of eight fiber laser [J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2014, 26(2): 180-182.