

基于涂覆石墨烯的双椭圆柱和圆柱并行纳米线波导的多极方法分析

杜易达¹, 李宁¹, 薛文瑞^{1*}, 李慧慧¹, 张越¹, 李昌勇^{1,2,3}

¹山西大学物理电子工程学院, 山西 太原 030006;

²山西大学激光光谱研究所量子光学与光量子器件国家重点实验室, 山西 太原 030006;

³山西大学极端光学协同创新中心, 山西 太原 030006

摘要 本文采用多级方法(MPM)对涂覆石墨烯的双椭圆和圆柱并行纳米线波导的基模的有效折射率进行了计算,并采用有限元法(FEM)对计算结果进行了验证。本文研究了两种计算方法的结果之间的相对误差随MPM展开项数的最大值、工作波长、费米能、椭圆柱形纳米线的半长轴及半短轴、纳米线表面之间的横向间距,以及圆柱形纳米线的相对高度等变化的规律。通过对照计算结果得到以下规律:随着级数展开项数增大,MPM的结果越接近FEM的结果;随着工作波长和费米能增大,有效折射率实部和虚部的相对误差均增大;随着圆柱形电介质纳米线的半径和椭圆柱形纳米线的半长轴增大,有效折射率实部的相对误差增大,而其虚部的相对误差减小;随着椭圆柱形纳米线的半短轴增大,有效折射率实部的相对误差减小,而其虚部的相对误差增大;随着纳米线表面之间的横向间距和圆柱形纳米线的相对高度增大,有效折射率实部和虚部的相对误差均减小。这些现象均可以通过场分布得到解释。在本文的计算范围内,相对误差均保持在 10^{-3} 量级。该研究工作为混合型电介质并行纳米线波导的设计、制作和应用提供了理论基础。

关键词 石墨烯; 纳米线; 波导; 多极方法; 有限元法

中图分类号 O436

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS231207

1 引言

表面等离子波导能够传导突破衍射极限的亚波长约束的电磁波,其在具有高集成度的光学回路中具有优异的导波性能^[1-4]。然而,在红外和太赫兹波段范围内,由于贵金属表面激发的表面等离子激元(SPP)具有显著的欧姆损耗效应^[5],并且缺乏可调节性^[6],急须采用具有较小欧姆损耗和可调节性的新材料来代替贵金属材料。石墨烯是一种新型的2D材料,是一种适用于中红外至太赫兹波段范围内的表面等离子波导材料^[7]。与金属材料相比,石墨烯具有低损耗、强模式约束和可调谐性这三大优势^[8]。石墨烯和电介质的组合可构成各类基本结构,如传感器^[9]、波导^[10-13]、调制器^[14]和滤波器^[15]等,这些结构可用于光子学集成电路和纳米器件^[16]。其中基于石墨烯材料的波导结构是近年来一个研究热点^[17-19]。

2014年Liu等^[20]利用有限元法(FEM)研究了石墨烯楔形和凹槽波导中SPP的性质,结果表明,石墨烯楔形波导可以在太赫兹红外波段有效地支持等离子激元的传播。2015年Zhai等^[21]采用FEM对涂覆石墨烯

的双椭圆电介质纳米并行线的传输特性、电磁参数以及结构参数之间的依赖关系进行了研究,发现波导的几何尺寸、工作频率以及温度对传输特性都有影响。2016年Zhao等^[22]采用解析法对涂覆双层石墨烯圆柱形波导的等离激元模式进行了研究,结果发现,模式特性可以通过改变两个石墨烯层之间的距离、石墨烯的化学势和层间电介质的介电常数来有效地调节。2017年Liu等^[23]采用解析法对涂覆双层石墨烯的单根圆柱形双层电介质纳米线波导的远程SPP(LRSPP)进行了研究,发现采用LRSPP基模的波导具有显著的优势,可以同时实现更大的传播长度和更深的亚波长限制。2019年Cheng等^[24]采用分离变量法(SVM)分析了涂覆双层石墨烯的共焦椭圆电介质纳米线的模式特性。发现涂覆石墨烯的SPP模式可以通过改变工作波长、半长轴之间的距离、石墨烯的费米能级和几何参数来调节。2022年Li等^[25]采用多级方法(MPM)对涂覆石墨烯的嵌套偏心空心圆柱的椭圆形电介质纳米线波导所支持的最低阶的3个模式的传输特性进行了研究,结果发现,通过改变波导的结构参数可以调节模式的传输性能。同年,Li等^[26]采用FEM对涂覆石墨烯的

收稿日期: 2023-07-03; 修回日期: 2023-08-15; 录用日期: 2023-09-06; 网络首发日期: 2023-09-22

基金项目: 国家自然科学基金(61378039, 61575115)、国家基础科学人才培养基金(J11103210)

通信作者: *wrxue@sxu.edu.cn

双圆柱和圆柱并行纳米线波导所支持的 5 个最低阶模式的传输特性进行了分析,并指出该波导所支持的这些模式均由基模和一阶模组成。为了克服数值方法不能对模式的形成机制给出清晰的物理图像的问题,本文拟采用 MPM 对文献[26]中的波导结构的基模进行半解析分析,并与 FEM 的计算结果进行对比。通过对照两种方法的计算结果,本文对有效折射率实部、虚部及其相对误差随级数展开项数的最大值、工作波长、费米能、圆柱形纳米线的半径、椭圆柱形纳米线的半长轴及半短轴、纳米线表面之间的横向间距,以及圆柱形纳米线的相对高度等变化的规律进行了分析。该研究结果有望在解决石墨烯表面等离子体调制^[14]、导波^[24-25]和耦合^[27]等问题上得到应用。

2 结构模型和计算方法

涂覆单层石墨烯的三根并行的混合型电介质纳米线波导结构的横截面如图 1 所示,它由两根椭圆柱形电介质纳米线和一根圆柱形电介质纳米线构成,背景为空气。三根纳米线分别被标记为 0 号、1 号和 2 号纳米线。以 0 号纳米线的对称中心 o_0 为原点,建立直角坐标系 $o_0-x_0y_0$ 和椭圆坐标系 $o_0-\xi_0\eta_0$; 以 1 号纳米线的对称中心 o_1 为原点,建立直角坐标系 $o_1-x_1y_1$ 和椭圆坐标系 $o_1-\xi_1\eta_1$; 以 2 号纳米线的对称中心 o_2 为原点,建立直角坐标系 $o_2-x_2y_2$ 和极坐标系 $o_2-\rho\phi$; 以 o_0 和 o_1 连线的中点 o 为原点,建立直角坐标系 $o-xy$ 。 ξ_0 、 ξ_1 和 ρ 为径向坐标变量, η_0 、 η_1 和 ϕ 为角向坐标变量。假设 a_0 、 b_0 和 q_0 分别为 0 号纳米线的半长轴、半短轴和焦距; a_1 、 b_1 和 q_1 分别为 1 号纳米线的半长轴、半短轴和焦距。0 号和 1 号纳米线边界处的径向坐标分别为 ξ_{00} 和 ξ_{10} 。2 号纳米线的半径为 ρ_0 。 s 为 0 号和 2 号 (或者 1 号和 2 号) 纳米线表面之间的横向间距。 h 为 2 号纳米线的圆心在 y 轴上的高度。横截面内的任意一点在 7 套坐标系中的坐标分别为 (x_0, y_0) 、 (ξ_0, η_0) 、 (x_1, y_1) 、 (ξ_1, η_1) 、 (x_2, y_2) 、 (ρ, ϕ) 和 (x, y) 。坐标之间的关系为: $x_0 = x - c$, $x_1 = x + c$, $x_2 = x$, $y_0 = y_1 = y$, $y_2 = y - h$, $x_0 = q_0 \cosh \xi_0 \cos \eta_0$, $y_0 = q_0 \sinh \xi_0 \sin \eta_0$, $x_1 = q_1 \cosh \xi_1 \cos \eta_1$, $y_1 = q_1 \sinh \xi_1 \sin \eta_1$, $x_2 = \rho \cos \phi$, $y_2 = \rho \sin \phi$ 。为了简单起见,本文采用的两根椭圆柱形电

介质纳米线具有相同的半长轴、半短轴和焦距,即 $a_0 = a_1$, $b_0 = b_1$, $q_0 = q_1$, 这也意味着 $\xi_{00} = \xi_{10}$ 。

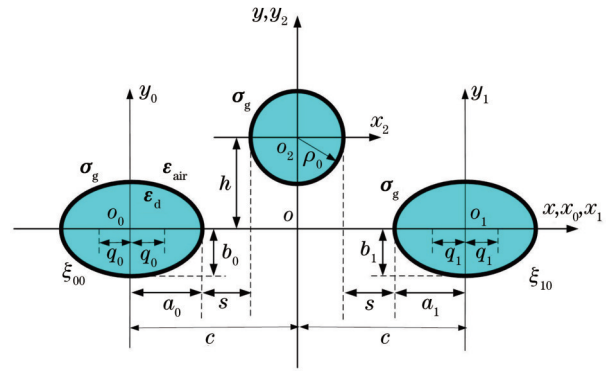


图 1 涂覆石墨烯的三根并行的混合型电介质纳米线波导的横截面示意图

Fig. 1 Cross-sectional schematic diagram of three parallel hybrid dielectric nanowire waveguides coated with graphene

图 1 中电介质纳米线的介电常数为 ϵ_d , 空气背景的介电常数为 ϵ_{air} , 取 $\epsilon_d = 2.1025$, $\epsilon_{air} = 1.000$ 。电介质纳米线表面涂覆的石墨烯电导率为 σ_g , 石墨烯的电导率由带内电导率 σ_{intra} 和带间电导率 σ_{inter} 两部分组成, 即 $\sigma_g = \sigma_{intra} + \sigma_{inter}$, 其表达式可由库珀公式^[28]得到:

$$\sigma_{intra} = \frac{2ie^2 k_b T}{\hbar^2 \pi (\omega + i\Gamma)} \ln \left[2 \cosh \left(\frac{E_f}{2k_b T} \right) \right], \quad (1)$$

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

式中: e 为电子电量; k_b 为玻尔兹曼常数; $T = 300$ K 为环境温度; \hbar 为约化普朗克常量; $\omega = 2\pi f$ 是角频率; $\Gamma = 2 \times 10^{12}$ rad/s 是载流子散射率; E_f 为石墨烯的费米能。本文讨论的波导结构的尺寸为典型的尺寸^[29-31], 并可以通过化学气相沉淀法^[32]或者包裹-切割法制备^[33]。

本文可以采用 MPM 对波导进行计算。假设 0 号纳米线单独存在时, 其内部电场和磁场的 z 分量分别为 Ez_{01} 和 H_z_{01} , 外部电场和磁场的 z 分量分别为 Ez_{02} 和 H_z_{02} , 它们的表达式为

$$\begin{cases} Ez_{01} = \sum_{m=0}^{\infty} A_m R_{em}^{(1)}(\xi_0) S_{em}(\eta_0) + \sum_{m=1}^{\infty} A'_m R_{om}^{(1)}(\xi_0) S_{om}(\eta_0) \\ Hz_{01} = \sum_{m=0}^{\infty} B_m R_{em}^{(1)}(\xi_0) S_{em}(\eta_0) + \sum_{m=1}^{\infty} B'_m R_{om}^{(1)}(\xi_0) S_{om}(\eta_0) \\ Ez_{02} = \sum_{m=0}^{\infty} C_m R_{em}^{(3)}(\xi_0) S_{em}(\eta_0) + \sum_{m=1}^{\infty} C'_m R_{om}^{(3)}(\xi_0) S_{om}(\eta_0) \\ Hz_{02} = \sum_{m=0}^{\infty} D_m R_{em}^{(3)}(\xi_0) S_{em}(\eta_0) + \sum_{m=1}^{\infty} D'_m R_{om}^{(3)}(\xi_0) S_{om}(\eta_0) \end{cases}; \quad (3)$$

设 1 号纳米线单独存在时, 内部电场和磁场的 z 分量分别为 Ez_{11} 和 H_{z11} , 外部电场和磁场的 z 分量分别为 Ez_{12} 和 H_{z12} , 它们的表达式为

$$\begin{cases} Ez_{11} = \sum_{m=0}^{\infty} E_m R_{em}^{(1)}(\xi_1) S_{em}(\eta_1) + \sum_{m=1}^{\infty} E'_m R_{om}^{(1)}(\xi_1) S_{om}(\eta_1) \\ Hz_{11} = \sum_{m=0}^{\infty} F_m R_{em}^{(1)}(\xi_1) S_{em}(\eta_1) + \sum_{m=1}^{\infty} F'_m R_{om}^{(1)}(\xi_1) S_{om}(\eta_1) \\ Ez_{12} = \sum_{m=0}^{\infty} G_m R_{em}^{(3)}(\xi_1) S_{em}(\eta_1) + \sum_{m=1}^{\infty} G'_m R_{om}^{(3)}(\xi_1) S_{om}(\eta_1) \\ Hz_{12} = \sum_{m=0}^{\infty} H_m R_{em}^{(3)}(\xi_1) S_{em}(\eta_1) + \sum_{m=1}^{\infty} H'_m R_{om}^{(3)}(\xi_1) S_{om}(\eta_1) \end{cases}; \quad (4)$$

设 2 号纳米线单独存在时, 内部电场和磁场的 z 分量分别为 Ez_{21} 和 H_{z21} , 外部电场和磁场的 z 分量分别为 Ez_{22} 和 H_{z22} , 它们的表达式为

$$\begin{cases} Ez_{21} = \sum_{m=0}^{\infty} P_m I_m(\lambda_1 \rho) \cos(m\varphi) + \sum_{m=1}^{\infty} P'_m I_m(\lambda_1 \rho) \sin(m\varphi) \\ Hz_{21} = \sum_{m=0}^{\infty} Q_m I_m(\lambda_1 \rho) \cos(m\varphi) + \sum_{m=1}^{\infty} Q'_m I_m(\lambda_1 \rho) \sin(m\varphi) \\ Ez_{22} = \sum_{m=0}^{\infty} R_m K_m(\lambda_2 \rho) \cos(m\varphi) + \sum_{m=1}^{\infty} R'_m K_m(\lambda_2 \rho) \sin(m\varphi) \\ Hz_{22} = \sum_{m=0}^{\infty} S_m K_m(\lambda_2 \rho) \cos(m\varphi) + \sum_{m=1}^{\infty} S'_m K_m(\lambda_2 \rho) \sin(m\varphi) \end{cases}, \quad (5)$$

式中: $A_m, B_m, C_m, D_m, E_m, F_m, G_m, H_m, P_m, Q_m, R_m, S_m, A'_m, B'_m, C'_m, D'_m, E'_m, F'_m, G'_m, H'_m, P'_m, Q'_m, R'_m$ 和 S'_m 为第 m 阶表达式的系数, 共 24 组; $R_{em}^{(1)}$ 为第 m 阶第一类径向 Mathieu 偶函数; $R_{om}^{(1)}$ 为第 m 阶第一类径向 Mathieu 奇函数; $R_{em}^{(3)}$ 为第 m 阶第三类径向 Mathieu 偶函数; $R_{om}^{(3)}$ 为第 m 阶第三类径向 Mathieu 奇函数; S_{em} 为第 m 阶角向 Mathieu 偶函数; S_{om} 为第 m 阶角向 Mathieu 奇函数^[34]; I_m 是第一类变型贝塞尔函数; K_m 是第二类变型贝塞尔函数; $\lambda_1 = \sqrt{\beta^2 - \omega^2 \epsilon_d \epsilon_0 \mu_0}$; $\lambda_2 = \sqrt{\beta^2 - \omega^2 \epsilon_0 \mu_0}$, 其中 β 为传播常数, ϵ_0 为真空介电常数, μ_0 为真空磁导率。

假设三根电介质纳米线同时存在时, 根据场的叠加原理, 在 0 号椭圆形电介质纳米线内部, z 方向的电场和磁场分布为

$$E_{z_0}^{in} = E_{z_{01}} + E_{z_{12}} + E_{z_{22}}, \quad (6)$$

$$H_{z_0}^{in} = H_{z_{01}} + H_{z_{12}} + H_{z_{22} \circ} \quad (7)$$

在 0 号椭圆形电介质纳米线外部, z 方向的电场和磁场分布为

$$E_{z_0}^{out} = E_{z_{02}} + E_{z_{12}} + E_{z_{22}}, \quad (8)$$

$$H_{z_0}^{out} = H_{z_{02}} + H_{z_{12}} + H_{z_{22} \circ} \quad (9)$$

在 1 号椭圆形电介质纳米线内部, z 方向的电场和磁场分布为

$$E_{z_1}^{in} = E_{z_{11}} + E_{z_{02}} + E_{z_{22}}, \quad (10)$$

$$H_{z_1}^{in} = H_{z_{11}} + H_{z_{02}} + H_{z_{22} \circ} \quad (11)$$

在 1 号椭圆形电介质纳米线外部, z 方向的电场和磁场分布为

$$E_{z_1}^{out} = E_{z_{12}} + E_{z_{02}} + E_{z_{22}}, \quad (12)$$

$$H_{z_1}^{out} = H_{z_{12}} + H_{z_{02}} + H_{z_{22} \circ} \quad (13)$$

在 2 号圆形电介质纳米线内部, z 方向的电场和磁场分布为

$$E_{z_2}^{in} = E_{z_{21}} + E_{z_{02}} + E_{z_{12}}, \quad (14)$$

$$H_{z_2}^{in} = H_{z_{21}} + H_{z_{02}} + H_{z_{12} \circ} \quad (15)$$

在 2 号圆形电介质纳米线外部, z 方向的电场和磁场分布为

$$E_{z_2}^{out} = E_{z_{22}} + E_{z_{02}} + E_{z_{12}}, \quad (16)$$

$$H_{z_2}^{out} = H_{z_{22}} + H_{z_{02}} + H_{z_{12} \circ} \quad (17)$$

将式(3)~(17)代入椭圆坐标系下场的横向分量与纵向分量的关系式^[35], 就可以得到椭圆坐标系下的电场和磁场的径向和角向分量。将式(3)~(17)代入圆柱坐标系下场的横向分量与纵向分量的关系式^[35], 就可以得到圆柱坐标系下的电场和磁场的径向和角向分量。其中所涉及到的导数可以借助标量场的梯度和单位矢量的点乘积^[36-37]得到, 例如:

$$\frac{\partial \varphi(\rho, \phi)}{d_i d \xi_i} = \nabla \varphi(\rho, \phi) \cdot \hat{\xi}_i = \frac{\partial \varphi(\rho, \phi)}{\partial \rho} \hat{\rho} \cdot \hat{\xi}_i + \frac{\partial \varphi(\rho, \phi)}{\rho \partial \phi} \hat{\phi} \cdot \hat{\xi}_i, \quad (18)$$

$$\frac{\partial \varphi(\rho, \phi)}{d_i d \eta_i} = \nabla \varphi(\rho, \phi) \cdot \hat{\eta}_i = \frac{\partial \varphi(\rho, \phi)}{\partial \rho} \hat{\rho} \cdot \hat{\eta}_i + \frac{\partial \varphi(\rho, \phi)}{\rho \partial \phi} \hat{\phi} \cdot \hat{\eta}_i, \quad (19)$$

$$\frac{\partial \varphi(\xi_i, \eta_i)}{\partial \rho} = \nabla \varphi(\xi_i, \eta_i) \cdot \hat{\rho} = \frac{\partial \varphi(\xi_i, \eta_i)}{d_i \partial \xi_i} \hat{\xi}_i \cdot \hat{\rho} + \frac{\partial \varphi(\xi_i, \eta_i)}{d_i \partial \eta_i} \hat{\eta}_i \cdot \hat{\rho}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial \varphi(\xi_i, \eta_i)}{\rho \partial \phi} = \nabla \varphi(\xi_i, \eta_i) \cdot \hat{\phi} = \frac{\partial \varphi(\xi_i, \eta_i)}{d_i \partial \xi_i} \hat{\xi}_i \cdot \hat{\phi} + \frac{\partial \varphi(\xi_i, \eta_i)}{d_i \partial \eta_i} \hat{\eta}_i \cdot \hat{\phi}, \quad (21)$$

式中： $\varphi(\rho, \phi)$ 代表宗量为 ρ 和 ϕ 的任意标量函数； $\varphi(\xi_i, \eta_i)$ 代表宗量为 ξ_i 和 η_i 的任意标量函数； $i=0, 1$ 分别对应于椭圆坐标系 $o_0-\xi_0\eta_0$ 和 $o_1-\xi_1\eta_1$ ； $\hat{\xi}_i$ 和 $\hat{\eta}_i$ 为两个椭圆坐标系中的单位矢量； $\hat{\rho}$ 和 $\hat{\phi}$ 为极坐标系中的单位矢量； d_i 为度规因子。

将石墨烯视为无厚度的导体边界，在椭圆形电介质纳米线边界处的边值关系为

$$\begin{cases} E_Z^{\text{in}}|_{\xi=\xi_0} = E_Z^{\text{out}}|_{\xi=\xi_0} \\ E_\eta^{\text{in}}|_{\xi=\xi_0} = E_\eta^{\text{out}}|_{\xi=\xi_0} \\ H_Z^{\text{in}}|_{\xi=\xi_0} - H_Z^{\text{out}}|_{\xi=\xi_0} = \sigma_g E_\eta^{\text{in}}|_{\xi=\xi_0} \\ H_\eta^{\text{in}}|_{\xi=\xi_0} - H_\eta^{\text{out}}|_{\xi=\xi_0} = -\sigma_g E_Z^{\text{in}}|_{\xi=\xi_0} \end{cases}, \quad (22)$$

式中下标 $i=0, 1$ ，分别对应于0号和1号纳米线。在圆形电介质纳米线边界处的边值关系为

$$\begin{cases} E_Z^{\text{in}}|_{\rho=\rho_0} = E_Z^{\text{out}}|_{\rho=\rho_0} \\ E_\phi^{\text{in}}|_{\rho=\rho_0} = E_\phi^{\text{out}}|_{\rho=\rho_0} \\ H_Z^{\text{in}}|_{\rho=\rho_0} - H_Z^{\text{out}}|_{\rho=\rho_0} = \sigma_g E_\phi^{\text{in}}|_{\rho=\rho_0} \\ H_\phi^{\text{in}}|_{\rho=\rho_0} - H_\phi^{\text{out}}|_{\rho=\rho_0} = -\sigma_g E_Z^{\text{in}}|_{\rho=\rho_0} \end{cases}. \quad (23)$$

采用逐点匹配方法^[34]，利用以上公式将建立一个线性代数方程组。按照线性代数理论，其系数矩阵的行列式(24)为零时，才能得到非零解。式(24)就是特征方程。

$$\begin{vmatrix} a_{m,n}(0,0) & a_{m,n}(0,1) & \dots & a_{m,n}(0,23) \\ a_{m,n}(1,0) & a_{m,n}(1,1) & \dots & a_{m,n}(1,23) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m,n}(11,0) & a_{m,n}(11,1) & \dots & a_{m,n}(11,23) \end{vmatrix} = 0. \quad (24)$$

系数矩阵中包含 12×24 个子矩阵。在每一个子矩阵中， m 为无穷级数的项次，其最大值为 M_{\max} 。 n 为在每个边界上的匹配点次，其最大值为 N_{\max} 。受篇幅的限制，这里只给出 $a_{m,n}(0,0)$ 子矩阵中矩阵元的表达式：

$$a_{m,n}(0,0) = R_{em}^{(1)}(\xi_{00}) S_{em}(\eta_{0n}). \quad (25)$$

为了求解式(24)，左侧的矩阵必须为一个方阵，所以无穷级数的项次 m 的最大值 N_{\max} 必须与匹配点次 n 的最大数值 N_{\max} 成二倍的关系，即 $N_{\max} = 2M_{\max}$ 。通过数值求解式(24)，就可以得到混合型电介质纳米线波导中模式的场分布、有效折射率实部 $\text{Re}(n_{\text{eff}})$ 和有效折射率虚部 $\text{Im}(n_{\text{eff}})$ 。

为了验证MPM的计算精度，本文还采用FEM(Comsol Multiphysics 5.4TM)对波导进行了计算。在计算过程中，本文将最大的网格尺寸设置为 $\lambda/50$ ，并将最小的网格尺寸设置为 $\lambda/3000$ 。设置计算区域的边界为圆形，半径为 λ ，并设置其边界条件为散射边界条件。通过求解，同样可以得到波导模式的场分布、有效折射率实部 $\text{Re}(n_{\text{eff}})$ 和有效折射率虚部 $\text{Im}(n_{\text{eff}})$ 。

3 结果与讨论

图2是在 $\lambda = 9 \mu\text{m}$ ， $E_i = 0.5 \text{ eV}$ ， $a_0 = a_1 = 105 \text{ nm}$ ， $b_0 = b_1 = 85 \text{ nm}$ ， $\rho_0 = 50 \text{ nm}$ ， $s = 20 \text{ nm}$ 和 $h = 60 \text{ nm}$ 的条件下得到的基模电场 z 分量和电场强度分布图。从结果可以看出，基模的电场分量 E_z 和电场强度 $|E|$ 的分布关于 y 轴具有对称性。场主要分布在纳米线的间隙区域和间隙区域的石墨烯表面。

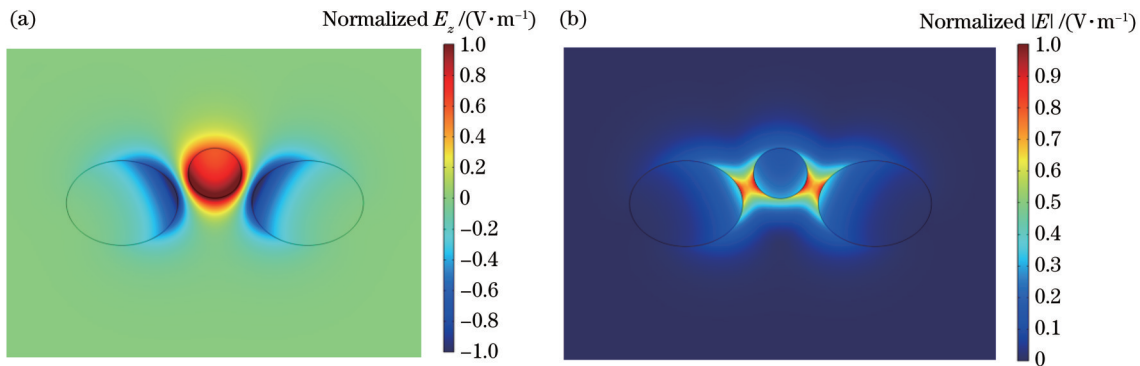


图2 基模的电场 z 分量和电场强度分布。(a)归一化的电场 z 分量；(b)归一化的电场强度分布

Fig. 2 Electric field z component and electric field intensity distribution of fundamental mode. (a) Normalized electric field z component; (b) normalized electric field intensity distribution

为了研究式(3)~(5)中的无穷级数的项次 m 的最大取值 M_{\max} 对计算精度的影响，在 $E_i = 0.5 \text{ eV}$ ， $a_0 =$

$a_1 = 100 \text{ nm}$ ， $b_0 = b_1 = 95 \text{ nm}$ ， $\rho_0 = 50 \text{ nm}$ ， $s = 20 \text{ nm}$ 和 $h = 60 \text{ nm}$ 的条件下，计算了基模的有效折射率。

图 3 给出了 MPM 计算的基模的有效折射率实部 (Re_MPM) 和有效折射率虚部 (Im_MPM), FEM 计算的有效折射率实部 (Re_FEM) 和有效折射率虚部 (Im_FEM) 以及 MPM 计算的结果相对于 FEM 计算的结果的相对误差 (relative error)。从图 3 可以看出, 当 M_{\max} 逐渐增大时, 有效折射率的实部和虚部的相对误差均缓慢减少。 M_{\max} 的改变对有效折射率虚部的相

对误差影响更显著。这些结果说明, 级数项数的最大取值 M_{\max} 是影响 MPM 计算精度的因素之一, 并且级数项数的最大取值 M_{\max} 越大, 计算精度越高。当 M_{\max} 取 11 时, 有效折射率实部的相对误差为 10^{-3} 量级、虚部的相对误差为 10^{-4} 量级。为了保持较高的精度, 在下文的讨论中, M_{\max} 均取为 11。

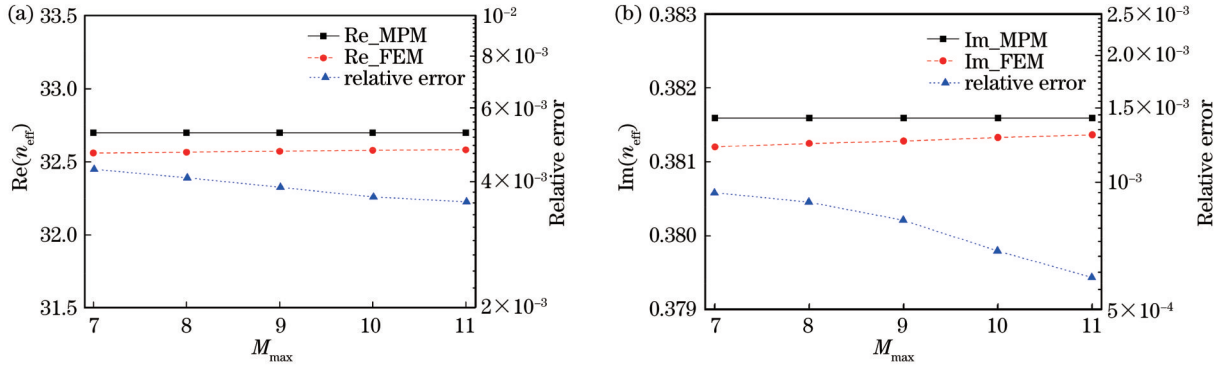


图 3 级数展开项数的最大值为 7、8、9、10 和 11 时, MPM 与 FEM 计算结果的对比图。(a) 有效折射率实部及其相对误差; (b) 有效折射率虚部及其相对误差

Fig. 3 Comparison chart of results calculated by multipole method (MPM) and finite element method (FEM) when maximum numbers of series expansion terms are 7, 8, 9, 10, and 11. (a) Real part of effective refractive index and its relative error; (b) imag part of effective refractive index and its relative error

图 4 给出了在 $M_{\max} = 11, E_f = 0.5 \text{ eV}, a_0 = a_1 = 100 \text{ nm}, b_0 = b_1 = 95 \text{ nm}, \rho_0 = 50 \text{ nm}, s = 20 \text{ nm}$ 和 $h = 60 \text{ nm}$ 的条件下, 波长 λ 在 $8.0 \sim 10.0 \mu\text{m}$ 范围内变化时, MPM 计算的基模的有效折射率实部、虚部以及相对于 FEM 计算的结果的相对误差随波长的变化关系。从图 4 可以看出, 随着波长从 $8.0 \mu\text{m}$ 增加到 $10.0 \mu\text{m}$, 有效折射率的实部和虚部都在单调下降, 而它们的相对误差在逐渐增大。为了解释这些现象, 图 4(a) 中嵌入了波长为 $8.0 \mu\text{m}$ 和 $10.0 \mu\text{m}$ 时的归一化的电场强

度分布图。通过电场图可以看出: 随着波长从 $8.0 \mu\text{m}$ 增加到 $10.0 \mu\text{m}$, 石墨烯表面的场逐渐减小, 场逐渐向间隙扩散, 波导对模式的约束减弱, 石墨烯与场的相互作用减小, 这意味着波导的损耗在减少^[38-39], 所以有效折射率的虚部逐步减小。因为纳米线表面的场之间的耦合逐渐增强, MPM 假设的纳米线同时存在时的场是它们单独存在时场的线性叠加的前提会有所偏离, 所以 MPM 计算得到的有效折射率的相对误差有所增大。

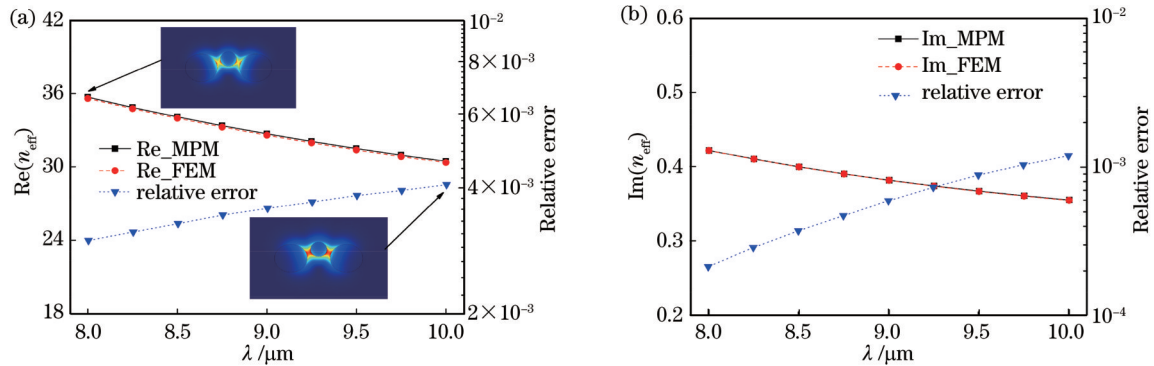


图 4 波长在 $8.0 \sim 10.0 \mu\text{m}$ 范围内, MPM 和 FEM 计算结果的对比图。(a) 有效折射率实部及其相对误差; (b) 有效折射率虚部及其相对误差

Fig. 4 Comparison chart between results calculated by MPM and results calculated by FEM within rang of wavelength from 8.0 to 10.0 μm . (a) Real part of effective refractive index and its relative error; (b) imag part of effective refractive index and its relative error

图 5 给出了在 $M_{\max} = 11$, $\lambda = 9.0 \mu\text{m}$, $a_0 = a_1 = 100 \mu\text{m}$, $b_0 = b_1 = 95 \text{ nm}$, $\rho_0 = 50 \text{ nm}$, $s = 20 \text{ nm}$ 和 $h = 60 \text{ nm}$ 的条件下, 费米能 E_f 在 $0.35 \sim 0.60 \text{ eV}$ 范围内, MPM 计算的基模的有效折射率实部、虚部以及相对于 FEM 计算结果的实部和虚部的相对误差。从图 5 可以看出, 随着费米能从 0.35 eV 增加到 0.60 eV , 有效折射率的实部和虚部都在单调下降, 而它们的相对误差在逐渐增大。为了解释这些现象, 图 5(a) 中嵌入

了费米能为 0.35 eV 和 0.60 eV 时的归一化的场强分布图。通过电场图可以看出: 随着费米能从 0.35 eV 增加到 0.60 eV , 在石墨烯表面上场的强度减弱, 场向间隙扩散, 波导对模式的约束减弱, 石墨烯与场的相互作用减小, 这意味着波导的损耗在减弱, 所以有效折射率的虚部逐步减小。因为纳米线表面的场之间的耦合逐渐增强, 所以 MPM 计算得到的有效折射率的相对误差有所增大。

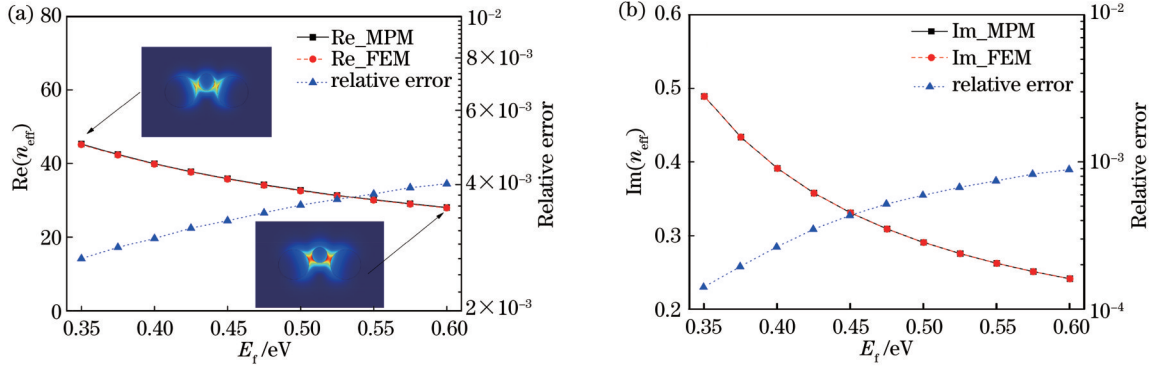


图 5 费米能在 $0.35 \sim 0.60 \text{ eV}$ 范围内, MPM 和 FEM 计算结果的对比图。(a) 有效折射率实部及其相对误差; (b) 有效折射率虚部及其相对误差

Fig. 5 Comparison chart between results calculated by MPM and results calculated by FEM within rang of Fermi energy from 0.35 to 0.60 eV . (a) Real part of effective refractive index and its relative error; (b) imag part of effective refractive index and its relative error

图 6 给出了当 $M_{\max} = 11$, $\lambda = 9.0 \mu\text{m}$, $E_f = 0.5 \text{ eV}$, $a_0 = a_1 = 100 \text{ nm}$, $b_0 = b_1 = 95 \text{ nm}$, $s = 20 \text{ nm}$ 和 $h = 60 \text{ nm}$ 的条件下, 圆柱形电介质纳米线半径 ρ_0 在 $42 \sim 58 \text{ nm}$ 内变化时, MPM 计算的基模的有效折射率实部、虚部以及相对于 FEM 计算结果的实部和虚部的相对误差。从图 6 可以看出, 随着圆柱形电介质纳米线半径 ρ_0 从 42 nm 增加到 58 nm , 有效折射率的实部、虚部以及有效折射率虚部的相对误差都在缓慢增

加, 而有效折射率实部的相对误差在逐渐减小。为了解释这些现象, 图 6(a) 中嵌入了圆柱形电介质纳米线半径为 42 nm 和 58 nm 时的归一化的场强分布图。通过电场图可以看出, 随着圆柱形电介质纳米线半径从 42 nm 增加到 58 nm , 在石墨烯表面的场强有所增强, 石墨烯与场的相互作用增强, 波导对模式的束缚增强, 损耗增大, 所以有效折射率的虚部逐步增大。因为纳米线表面的场之间的耦合逐渐增加, 所以 MPM 计算得到的有效折射率实部的相对误差有所减小。

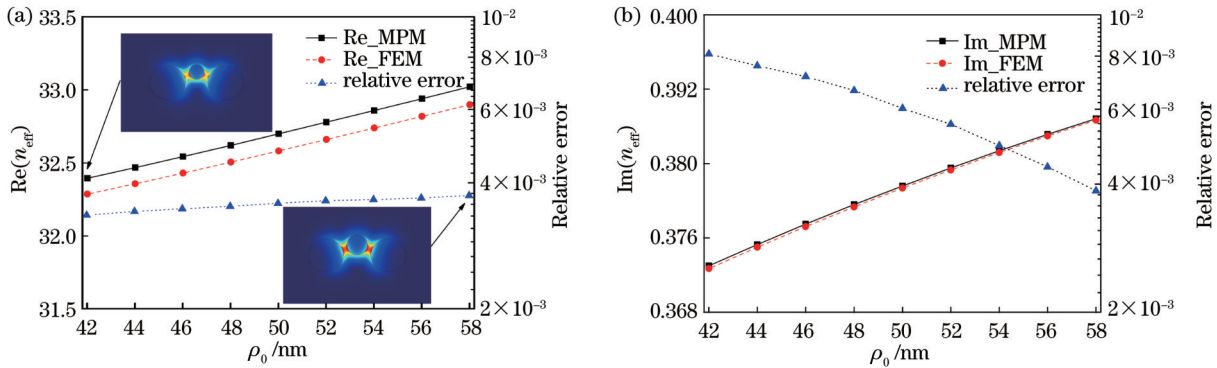


图 6 圆柱形纳米线的半径在 $42 \sim 58 \text{ nm}$ 范围内, MPM 和 FEM 计算结果的对比图。(a) 有效折射率实部及其相对误差; (b) 有效折射率虚部及其相对误差

Fig. 6 Comparison chart between results calculated by MPM and results calculated by FEM within rang of radius of cylindrical nanowire from 42 to 58 nm . (a) Real part of effective refractive index and its relative error; (b) imag part of effective refractive index and its relative error

图 7 给出了 $M_{\max} = 11, \lambda = 9.0 \mu\text{m}, E_f = 0.5 \text{ eV}, b_0 = b_1 = 95 \text{ nm}, \rho_0 = 50 \text{ nm}, s = 20 \text{ nm}$ 和 $h = 60 \text{ nm}$ 的条件下, 椭圆柱形电介质纳米线半长轴 a_0 和 a_1 的范围为 $96 \sim 104 \text{ nm}$ 时, MPM 计算的基模的有效折射率实部、虚部以及相对于 FEM 计算结果的实部和虚部的相对误差。从图 7 可以看出, 随着椭圆柱形电介质纳米线半长轴 a 从 96 nm 增加到 104 nm , 有效折射率的实部、虚部以及有效折射率虚部的相对误差逐渐减少,

而有效折射率实部的相对误差在逐渐增加。为了解释这些现象, 图 7(a) 中嵌入了椭圆柱形电介质纳米线半长轴为 94 nm 和 106 nm 时的归一化的场强分布图。通过电场图可以看出: 随着椭圆柱形电介质纳米线半长轴从 94 nm 增加到 106 nm , 石墨烯表面的场强减弱, 间隙内的场强增强, 石墨烯与场的相互作用减弱, 波导对场强的束缚减弱, 波导的损耗降低。因为纳米线表面的场之间的耦合逐渐增强, 所以 MPM 计算得到的有效折射率实部的相对误差有所增大。

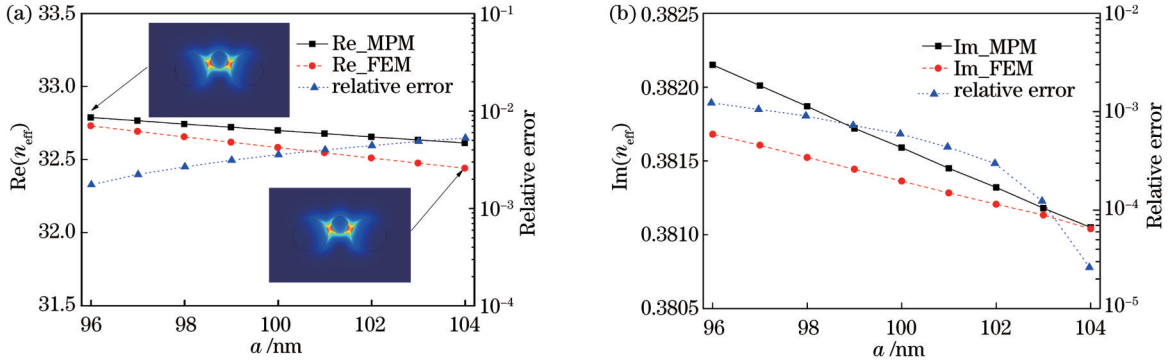


图 7 椭圆柱形纳米线的半长轴在 $96 \sim 104 \text{ nm}$ 范围内, MPM 和 FEM 计算结果的对比图。(a) 有效折射率实部及其相对误差; (b) 有效折射率虚部及其相对误差

Fig. 7 Comparison chart between results calculated by MPM and results calculated by FEM within rang of semi-major axis of elliptical cylindrical nanowire from 96 to 104 nm . (a) Real part of effective refractive index and its relative error; (b) imag part of effective refractive index and its relative error

图 8 给出了在 $M_{\max} = 11, \lambda = 9.0 \mu\text{m}, E_f = 0.5 \text{ eV}, a_0 = a_1 = 100 \text{ nm}, \rho_0 = 50 \text{ nm}, s = 20 \text{ nm}$ 和 $h = 60 \text{ nm}$ 的条件下, 椭圆柱形电介质纳米线半短轴 b 的范围为 $91 \sim 99 \text{ nm}$ 时, MPM 计算的基模的有效折射率实部、虚部以及相对于 FEM 计算结果的实部和虚部的相对误差。从图 8 可以看出, 随着椭圆柱形电介质纳米线半短轴 b 从 91 nm 增加到 99 nm , 有效折射率的实部、虚部以及有效折射率虚部的相对误差都在逐渐

增加, 而有效折射率实部的相对误差在逐渐减小。为了解释这些现象, 图 8(a) 中嵌入了椭圆柱形电介质纳米线半短轴为 91 nm 和 99 nm 时的归一化的场强分布图。通过电场图可以看出, 随着椭圆柱形电介质纳米线半短轴从 91 nm 增加到 99 nm , 石墨烯表面的场强增强, 石墨烯与场的相互作用增强, 波导对模式的束缚增强, 波导的损耗在增强, 所以有效折射率的虚部增加。因为纳米线表面的场之间的耦合逐渐减小, 所以 MPM 计算得到的有效折射率实部的相对误差有所

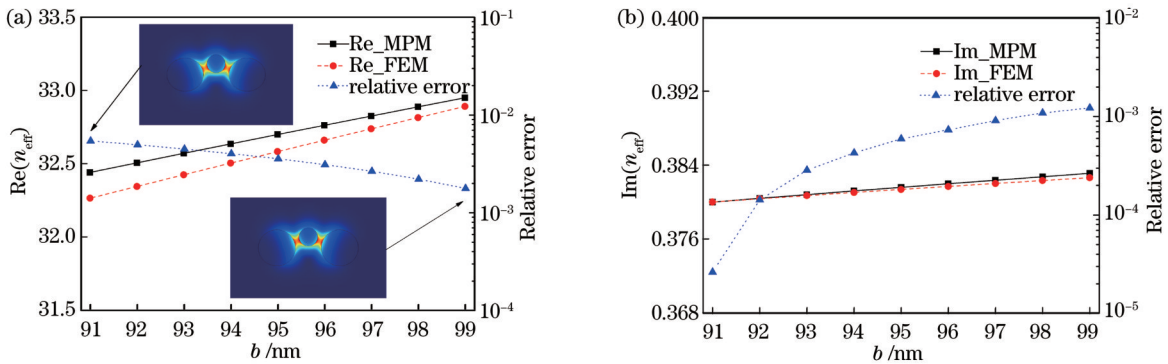


图 8 椭圆柱形纳米线的半短轴在 $91 \sim 99 \text{ nm}$ 范围内, MPM 和 FEM 计算结果的对比图。(a) 有效折射率实部及其相对误差; (b) 有效折射率虚部及其相对误差

Fig. 8 Comparison chart between results calculated by MPM and results calculated by FEM within rang of semi-short axis of elliptical cylindrical nanowire from 91 to 99 nm . (a) Real part of effective refractive index and its relative error; (b) imag part of effective refractive index and its relative error

减小。

图 9 给出了在 $M_{\max} = 11$, $\lambda = 9.0 \mu\text{m}$, $E_f = 0.5 \text{ eV}$, $a_0 = a_1 = 100 \text{ nm}$, $b_0 = b_1 = 95 \text{ nm}$, $\rho_0 = 50 \text{ nm}$, 和 $h = 60 \text{ nm}$ 的条件下, 横向间距 s 在 $12 \sim 28 \text{ nm}$ 范围内时, MPM 计算的基模的有效折射率实部、虚部以及相对于 FEM 计算结果的实部和虚部的相对误差。从图 9 可以看出, 随着纳米线表面之间的横向间距 s 从 12 nm 增加到 28 nm , 有效折射率的实部、虚部以及它们的相对误差都在单调减少。为了解释这

些现象, 图 9(a) 中嵌入了纳米线表面之间的横向间距为 12 nm 和 28 nm 时的归一化的场强分布图。通过电场图可以看出: 随着纳米线表面之间的横向间距从 12 nm 增加到 28 nm , 石墨烯表面的场强减弱, 场的分布范围逐渐扩大, 场与石墨烯的相互作用减弱, 波导对模式的束缚减弱, 传输损耗变小, 所以有效折射率的虚部减小。因为纳米线表面的场之间的耦合逐渐减小, 所以 MPM 计算得到的有效折射率的相对误差有所减小。

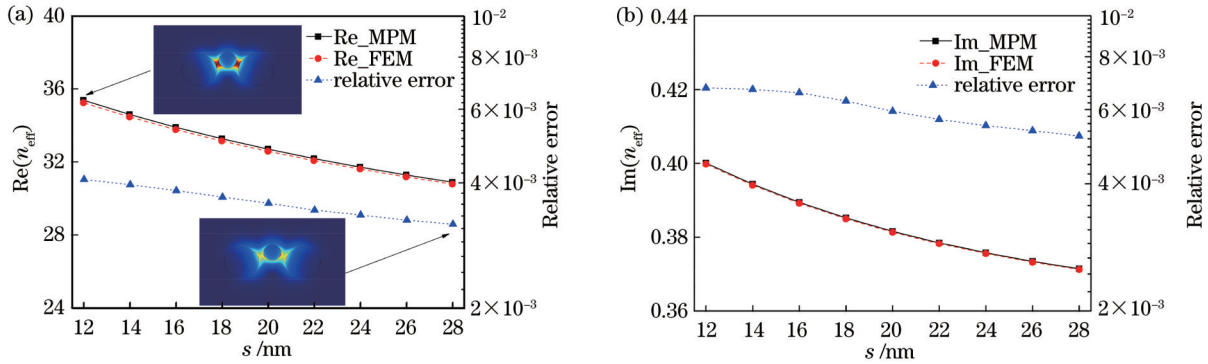


图 9 纳米线表面之间的横向间距在 $12 \sim 28 \text{ nm}$ 范围内, MPM 和 FEM 计算结果的对比图。(a) 有效折射率实部及其相对误差; (b) 有效折射率虚部及其相对误差

Fig. 9 Comparison chart between results calculated by MPM and results calculated by FEM within rang of transverse spacing between nanowire surfaces from 12 to 28 nm . (a) Real part of effective refractive index and its relative error; (b) imag part of effective refractive index and its relative error

图 10 给出了在 $M_{\max} = 11$, $\lambda = 9.0 \mu\text{m}$, $E_f = 0.5 \text{ eV}$, $a_0 = a_1 = 100 \text{ nm}$, $b_0 = b_1 = 95 \text{ nm}$, $\rho_0 = 50 \text{ nm}$, 和 $s = 20 \text{ nm}$ 的条件下, 圆柱纳米线的圆心在 y 轴上的高度 h 在 $50 \sim 66 \text{ nm}$ 范围内时, MPM 计算的基模的有效折射率实部、虚部以及相对于 FEM 计算结果的实部和虚部的相对误差。从图 10 可以看出, 随着圆柱纳米线的圆心在 y 轴上的高度 h 从 50 nm 增加到 66 nm , 有效折射率的实部、虚部以及它们的相对误差都在逐渐减小。为了解释这些现象, 图 10(a) 中嵌入

了圆柱纳米线的圆心在 y 轴上的高度为 50 nm 和 66 nm 时的归一化的场强分布图。通过电场图可以看出: 随着圆柱纳米线的圆心在 y 轴上的高度从 50 nm 增加到 66 nm , 石墨烯表面的场强减弱, 场的分布范围逐渐扩大, 间隙区域的场强度也有所减弱, 石墨烯与电场的相互作用稍有减弱, 波导对模式的束缚减弱, 波导的损耗降低, 所以有效折射率的虚部减小。因为纳米线表面的场之间的耦合逐渐减小, 所以 MPM 计算得到的有效折射率的相对误差有所减小。

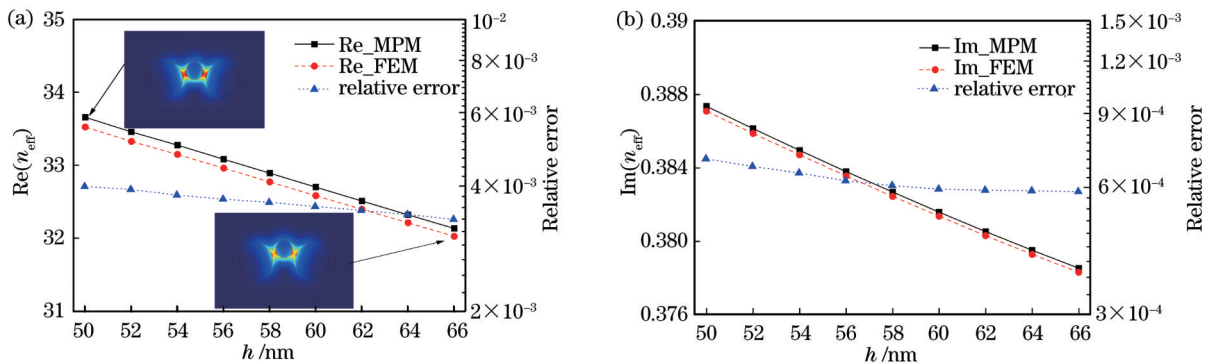


图 10 圆柱形纳米线的相对高度在 $50 \sim 66 \text{ nm}$ 范围内, MPM 计算和 FEM 计算结果的对比图。(a) 有效折射率实部及其相对误差; (b) 有效折射率虚部及其相对误差

Fig. 10 Comparison chart between results calculated by MPM and results calculated by FEM within rang of relative height of cylindrical nanowire from 50 to 66 nm . (a) Real part of effective refractive index and its relative error; (b) imag part of effective refractive index and its relative error

4 结 论

本文运用 MPM 对基于涂覆石墨烯的双椭圆和圆柱并行纳米线波导所支持的基模进行了半解析分析。结果表明:当级数展开项数、工作波长、费米能和波导的结构参数中的任意一项改变时都会对 MPM 的计算精度产生影响。当 M_{\max} 取值增大时,MPM 与 FEM 计算的有效折射率的实部和虚部的相对误差减小。当工作波长从 $8.0 \mu\text{m}$ 增大到 $10.0 \mu\text{m}$ 、费米能从 0.35 eV 增大到 0.60 eV 时,相对误差增大。当圆柱形电介质纳米线的半径从 42 nm 增加到 58 nm 、椭圆柱形纳米线的半长轴从 96 nm 增加到 104 nm ,有效折射率实部的相对误差增大、有效折射率虚部的相对误差减小。当椭圆柱形纳米线的半短轴从 91 nm 增加到 99 nm ,有效折射率实部的相对误差减小、有效折射率虚部的相对误差增大。当纳米线表面之间的横向间距从 12 nm 增加到 28 nm ,以及圆柱形纳米线的相对高度从 50 nm 增加到 66 nm 时,有效折射率的相对误差均逐渐减少。这些现象都可以通过场在空间的分布得以解释。因为本文采用的 MPM 忽略了场的非线性叠加效应,所以当纳米线表面的场之间的耦合变强时,计算得到的相对误差就会有所增大。在本文的计算范围内,相对误差均保持在 10^{-3} 量级。本文的研究方法和研究结果有望在混合型电介质并行纳米线波导的设计和制作中得到应用。

参 考 文 献

- [1] Huang C C, Chang R J, Cheng C W. Ultra-low-loss mid-infrared plasmonic waveguides based on multilayer graphene metamaterials[J]. *Nanomaterials*, 2021, 11(11): 2981.
- [2] Ye L F, Sui K H, Liu Y H, et al. Graphene-based hybrid plasmonic waveguide for highly efficient broadband mid-infrared propagation and modulation[J]. *Optics Express*, 2018, 26(12): 15935-15947.
- [3] Jafari M R, Omid M. The effect of quantum ring size on shifting the absorption coefficient from infrared region to ultraviolet region[J]. *Applied Physics A*, 2019, 125(7): 466.
- [4] Jafari M R, Ebrahimi F, Nooshirvani M. Subwavelength electromagnetic energy transport by stack of metallic nanorings [J]. *Journal of Applied Physics*, 2010, 108(5): 054313.
- [5] Geim A K. Graphene: status and prospects[J]. *Science*, 2009, 324(5934): 1530-1534.
- [6] Grigorenko A N, Polini M, Novoselov K S. Graphene plasmonics[J]. *Nature Photonics*, 2012, 6(11): 749-758.
- [7] Jablan M, Buljan H, Soljačić M. Plasmonics in graphene at infrared frequencies[J]. *Physical Review B*, 2009, 80(24): 245435.
- [8] Christensen J, Manjavacas A, Thongrattanasiri S, et al. Graphene plasmon waveguiding and hybridization in individual and paired nanoribbons[J]. *ACS Nano*, 2012, 6(1): 431-440.
- [9] Jabbarzadeh F, Habibzadeh-Sharif A. High performance dielectric loaded graphene plasmonic waveguide for refractive index sensing[J]. *Optics Communications*, 2021, 479: 126419.
- [10] Dai Y Y, Zhu X L, Mortensen N A, et al. Nanofocusing in a tapered graphene plasmonic waveguide[J]. *Journal of Optics*, 2015, 17(6): 065002.
- [11] Liu P H, Zhang X Z, Ma Z H, et al. Surface plasmon modes in graphene wedge and groove waveguides[J]. *Optics Express*, 2013, 21(26): 32432-32440.
- [12] Gonçalves P A D, Dias E J C, Xiao S S, et al. Graphene plasmons in triangular wedges and grooves[J]. *ACS Photonics*, 2016, 3(11): 2176-2183.
- [13] Zhou Y, Zhu Y Y, Zhang K, et al. Plasmonic band structures in doped graphene tubes[J]. *Optics Express*, 2017, 25(11): 12081-12089.
- [14] Xu Y, Li F, Kang Z, et al. Hybrid graphene-silicon based polarization-insensitive electro-absorption modulator with high-modulation efficiency and ultra-broad bandwidth[J]. *Nanomaterials*, 2019, 9(2): 157.
- [15] Liao B X, Guo X D, Hu H, et al. Ultra-compact graphene plasmonic filter integrated in a waveguide[J]. *Chinese Physics B*, 2018, 27(9): 094101.
- [16] 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.
- [17] Ding Y, Guan X, Zhu X, et al. Efficient electro-optic modulation in low-loss graphene-plasmonic slot waveguides[J]. *Nanoscale*, 2017, 9(40): 15576-15581.
- [18] Chen J J, Zeng Y, Xu X B, et al. Plasmonic absorption enhancement in elliptical graphene arrays[J]. *Nanomaterials*, 2018, 8(3): 175.
- [19] Jabbarzadeh F, Habibzadeh-Sharif A. Double V-groove dielectric loaded plasmonic waveguide for sensing applications [J]. *Journal of the Optical Society of America B*, 2019, 36(3): 690-696.
- [20] He S L, Zhang X Z, He Y R. Graphene nano-ribbon waveguides of record-small mode area and ultra-high effective refractive indices for future VLSI[J]. *Optics Express*, 2013, 21(25): 30664-30673.
- [21] 翟利, 薛文瑞, 杨荣章, 等. 涂覆石墨烯的电介质纳米并行线的传输特性[J]. *光学学报*, 2015, 35(11): 1123002.
- [22] Zhai L, Xue W R, Yang R C, et al. Propagation properties of nano dielectric parallel lines coated with graphene[J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(11): 1123002.
- [23] Zhao T, Hu M, Zhong R B, et al. Plasmon modes of circular cylindrical double-layer graphene[J]. *Optics Express*, 2016, 24(18): 20461-20471.
- [24] Liu J P, Zhai X, Xie F, et al. Analytical model of mid-infrared surface plasmon modes in a cylindrical long-range waveguide with double-layer graphene[J]. *Journal of Lightwave Technology*, 2017, 35(10): 1971-1979.
- [25] Cheng X, Xue W R, Wei Z Z, et al. Mode analysis of a confocal elliptical dielectric nanowire coated with double-layer graphene [J]. *Optics Communications*, 2019, 452: 467-475.
- [26] 李慧慧, 薛文瑞, 李宁, 等. 涂覆石墨烯的嵌套偏心空心圆柱的椭圆形电介质波导的模式特性[J]. *物理学报*, 2022, 71(10): 108101.
- [27] Li H H, Xue W R, Li N, et al. Mode properties of elliptical dielectric waveguide with nested eccentric hollow cylinder coated with graphene[J]. *Acta Physica Sinica*, 2022, 71(10): 108101.
- [28] 李宁, 薛文瑞, 董慧莹, 等. 基于石墨烯表面等离激元的混合型纳米并行线波导的模式分析[J]. *量子光学学报*, 2022, 28(2): 158-169.
- [29] Li N, Xue W R, Dong H Y, et al. Mode analysis of hybrid nanoparallel wire waveguides based on graphene surface plasmons[J]. *Journal of Quantum Optics*, 2022, 28(2): 158-169.
- [30] Lu H, Mao D, Zeng C, et al. Plasmonic Fano spectral response from graphene metasurfaces in the MIR region[J]. *Optical Materials Express*, 2018, 8(4): 1058-1068.
- [31] Nikitin A Y, Guinea F, Garcia-Vidal F J, et al. Fields radiated by a nanoemitter in a graphene sheet[J]. *Physical Review B*, 2011, 84(19): 195446.
- [32] Tong L M, Gattass R R, Ashcom J B, et al. Subwavelength-

- diameter silica wires for low-loss optical wave guiding[J]. *Nature*, 2003, 426(6968): 816-819.
- [30] Tong L M, Hu L L, Zhang J J, et al. Photonic nanowires directly drawn from bulk glasses[J]. *Optics Express*, 2006, 14(1): 82-87.
- [31] Zhang A Q, Zheng G F, Lieber C M. Nanowires: building blocks for nanoscience and nanotechnology[M]. Cham: Springer, 2016.
- [32] Chen K, Zhou X, Cheng X, et al. Graphene photonic crystal fibre with strong and tunable light-matter interaction[J]. *Nature Photonics*, 2019, 13(11): 754-759.
- [33] Chen B G, Meng C, Yang Z Y, et al. Graphene coated ZnO nanowire optical waveguides[J]. *Optics Express*, 2014, 22(20): 24276-24285.
- [34] Erricolo D, Carluccio G. Algorithm 934: Fortran 90 subroutines to compute Mathieu functions for complex values of the parameter[J]. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 40(1): 8.
- [35] Yeh C, Shimabukuro F I. The essence of dielectric waveguides [M]. Boston: Springer, 2008.
- [36] Lee W M. Natural mode analysis of an acoustic cavity with multiple elliptical boundaries by using the collocation multipole method[J]. *Journal of Sound and Vibration*, 2011, 330(20): 4915-4929.
- [37] Lee W M. Acoustic eigenproblems of elliptical cylindrical cavities with multiple elliptical cylinders by using the collocation multipole method[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2014, 78: 203-214.
- [38] He X Q, Ning T G, Lu S H, et al. Ultralow loss graphene-based hybrid plasmonic waveguide with deep-subwavelength confinement[J]. *Optics Express*, 2018, 26(8): 10109-10118.
- [39] Hajati M, Hajati Y. Deep subwavelength confinement of mid-infrared plasmon modes by coupling graphene-coated nanowire with a dielectric substrate[J]. *Plasmonics*, 2018, 13(2): 403-412.

Multipole Method Analysis of Waveguides Based on Graphene-Coated Double Elliptical and Cylindrical Parallel Nanowires

Du Yida¹, Li Ning¹, Xue Wenrui^{1*}, Li Huihui¹, Zhang Yue¹, Li Changyong^{1,2,3}

¹College of Physics and Electronic Engineering, Shanxi University, Taiyuan 030006, Shanxi, China;

²State Key Laboratory of Quantum Optics and Quantum Optics Devices, Institute of Laser Spectroscopy, Shanxi University, Taiyuan 030006, Shanxi, China;

³Collaborative Innovation Center of Extreme Optics, Shanxi University, Taiyuan 030006, Shanxi, China

Abstract

Objective The waveguide structure based on graphene materials has been a research hotspot in recent years. By employing the finite element method (FEM), the characteristics of the five lowest-order modes supported by the waveguide based on graphene-coated double elliptical and cylindrical parallel nanowires were reported. Since a purely numerical method is adopted in this study, it is impossible to give a clear physical image of the mode formation mechanism. To this end, we intend to employ the multipole method (MPM) to reanalyze the fundamental mode of the waveguide structure discussed before, and give a clear physical image of the mode formation mechanism. Meanwhile, the MPM correctness is verified by comparing the relative error between the results of the two calculation methods with the maximum value of the term number expanded by the MPM, the working wavelength, the Fermi energy, the semi-major and semi-minor axes of the elliptical cylindrical nanowires, the lateral spacing between the surfaces of the nanowires, and the relative height of the cylindrical nanowires.

Methods We leverage the MPM to calculate the characteristics of modes supported by the waveguide based on graphene-coated double elliptical and cylindrical parallel nanowires. First, we assume that the double elliptical cylindrical nanowires and the cylindrical nanowire exist alone and that the longitudinal components of the field are expanded into series form in their coordinate systems respectively. Then, according to the field superposition principle, the longitudinal components of the field in each region of the combined waveguide are obtained. Then, the radial and angular components of the field are obtained by the relationship between the lateral component and the longitudinal component of the field. The involved derivatives can be obtained via the gradient of the scalar field and the point product of the unit vector. Then, graphene is regarded as a conductor boundary without thickness, and a linear algebraic equation system is established by the boundary relationship and point-by-point matching method. Finally, the effective refractive index and field distribution of modes supported by the waveguide can be obtained by solving this system of linear algebraic equations.

Results and Discussions Any change in the number of series expansion terms, the operating wavelength, the Fermi energy, and the structure parameters of the waveguide will affect the MPM accuracy. The relative errors of the real and imaginary parts of the effective refractive index calculated by the MPM and the FEM decrease as the M_{\max} values increase (Fig. 3). As the working wavelength increases from 8.0 to 10.0 μm and Fermi energy increases from 0.35 to 0.60 eV,

the relative error rises (Figs. 4 and 5). When the radius of the cylindrical dielectric nanowire increases from 42 to 58 nm, the semi-major axis of the elliptic cylindrical nanowire grows from 96 to 104 nm, with the increased relative error of the real part of the effective refractive index and decreased relative error of the imaginary part of the effective refractive index (Figs. 6 and 7). When the short half axis of the elliptic cylindrical nanowire increases from 91 to 99 nm, the relative error of the real part of the effective refractive index reduces and the imaginary part of the effective refractive index rises (Fig. 8). As the transverse spacing between the nanowire surfaces increases from 12 to 28 nm, and the relative height of the cylindrical nanowire rises from 50 to 66 nm, the relative error of the effective refractive index decreases (Figs. 9 and 10). These phenomena can be explained by the field distribution in space. Since the MPM ignores the nonlinear superposition effect of the field, the relative error increases under stronger coupling between the fields on the nanowire surface.

Conclusions The results show that the larger number of series expansion terms leads to closer results of the MPM to those of the FEM, and the increasing working wavelength and Fermi energy bring about rising relative errors of the real and imaginary parts of the effective refractive index. As the radius of cylindrical dielectric nanowires and the major and semi-axial axes of elliptical cylindrical nanowires increase, the relative error of the real part of the effective refractive index rises, and that of the imaginary part of the effective refractive index decreases. Under the increasing short semi-axis of elliptical cylindrical nanowires, the relative error of the real part of the effective refractive index decreases, and that of the imaginary part of the effective refractive index rises. When the lateral spacing between the nanowire surfaces and the relative height of the cylindrical nanowires increases, the relative errors of the real and imaginary parts of the effective refractive index decrease. These phenomena can be explained by the field distribution. Within our calculation range, the relative errors are maintained on the order of 10^{-3} .

Key words graphene; nanowires; waveguides; multipole method; finite element method