

全新的电导率特征矩阵方法及其在石墨烯 THz 频率光学特性上的应用

邓新华 刘江涛 袁吉仁 王同标

A new characteristics matrix method based on conductivity and its application in the optical properties of graphene in THz frequency range

Deng Xin-Hua Liu Jiang-Tao Yuan Ji-Ren Wang Tong-Biao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 057801 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.057801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.057801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I5>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

覆盖 X 和 Ku 波段的低雷达散射截面人工磁导体反射屏

[A low radar crosssection artificial magnetic conductor reflection screen covering X and Ku band](#)

物理学报.2015, 64(2): 024219 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.024219>

双层石墨烯位于 $1800\text{--}2150\text{ cm}^{-1}$ 频率范围内的和频拉曼模

[The second-order combination Raman modes of bilayer graphene in the range of \$1800\text{--}2150\text{ cm}^{-1}\$](#)

物理学报.2014, 63(14): 147802 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.147802>

光子晶体增强石墨烯 THz 吸收

[Terahertz absorption of graphene enhanced by one-dimensional photonic crystal](#)

物理学报.2014, 63(5): 057803 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.057803>

掺杂石墨烯系统电场调控的非线性太赫兹光学特性研究

[Electrically-controlled nonlinear terahertz optical properties of graphene](#)

物理学报 2013, 62(23): 237804 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.237804>

基于倏逝场耦合的石墨烯波导光传输相位特性仿真与实验研究

[Simulation and experimental research of phase transmission features based on evanescent field coupled graphene waveguide](#)

物理学报.2013, 62(23): 237805 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.237805>

全新的电导率特征矩阵方法及其在石墨烯THz频率光学特性上的应用^{*}

邓新华^{1)2)†} 刘江涛¹⁾ 袁吉仁¹⁾ 王同标¹⁾

1)(南昌大学理学院, 南昌 330031)

2)(东南大学毫米波国家重点实验室, 南京 210096)

(2014年8月29日收到; 2014年9月30日收到修改稿)

基于麦克斯韦方程组所要求的电磁场边界条件首次从理论上严格推导得到超薄导体及其复合多层介质结构光学特性的一般计算方法及其特征矩阵公式, 其优点在于只要借助于导体的电导率而无需知道其介电常数和磁导率即可计算得到反射、透射和吸收等光学特性, 克服了传统的传输矩阵方法必需知道组成材料的介电常数和磁导率才能获得其光学性质的问题, 并利用此方法获得了石墨烯及其复合多层结构在THz频率范围内反射、透射和吸收等光学行为.

关键词: 电导率特征矩阵, 石墨烯, 太赫兹

PACS: 78.67.Wj, 42.70.Qs, 95.85.Fm

DOI: 10.7498/aps.64.057801

1 引言

THz频率范围光谱(主要0.1—10 THz范围内)由于具有特殊的性质, 在无损检测、医疗成像、雷达探测、通信等领域具有很广泛的应用^[1–6], 石墨烯与THz光波的相互作用已成为目前石墨烯光学特性研究的热点之一^[7–13]. 然而, 石墨烯与光波的相互作用在可见光波段和THz光谱范围由于光子的能量不同, 导致石墨烯在可见光波段和THz频率范围的光学性质有很大的不同, 不能用研究石墨烯在可见光频率范围的传统方法来研究其在THz波段的光学特性. 石墨烯在可见光范围, 由于光子的能量较大, 足以使电子在带间发生跃迁, 而发生带间跃迁时, 石墨烯电导率是一个相对固定的常数, 可以得到决定其光学性质的介电常数和磁导率, 并已经从实验上得到了可见光范围石墨烯的折射率^[14]. 然而石墨烯在THz频率范围内, 因其光子的能量较小, 不足以使电子发生带间跃迁, 电子仅能在带内

发生相互作用, 而发生带内相互作用时, 石墨烯电导率是随光的频率发生变化的非线性函数^[15], 其介电常数也随光的频率发生变化, 无法从实验直接得到整个THz频率范围的介电常数, 也就无法利用传统方法来计算得到其光学性质, 其原因在于, 传统方法要计算获得材料的光学性质, 就必须知道组成材料的介电常数和磁导率. 对于超薄的导体(如单层石墨烯, 其厚度只有0.34 nm)在仅仅知道其电导率情况下, 当然其电导率往往是入射光频率的函数, 用传统方法计算来获取其光学性质遇到困难. 为此, 迫切需要解决这个问题, 期望只需借助于材料的电导率而无需知道其介电常数和磁导率即可直接计算获得材料的光学特性.

为了解决上述问题, 本文基于麦克斯韦方程组所要求的电磁场边界条件从理论上严格推导得到超薄导体及其复合多层介质结构光学特性的一般计算方法及其计算公式, 能够只要借助于导体的电导率而无需知道其介电常数和磁导率即可直

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 11364033, 61464007和11264029)、江西省自然科学基金(批准号: 20122BAB202002)、毫米波国家重点实验室开放课题(批准号: K201216)和江西省博士后科学基金(批准号: 2014KY32)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: dengxinhua@ncu.edu.cn

接计算获得其光学特性. 克服了传统常规方法必须知道组成材料的介电常数和磁导率才能计算得到其光学性质的问题. 并利用此方法计算了石墨烯及其复合多层结构在 THz 频率范围内反射、透射和吸收等光学行为, 发现单层裸露石墨烯与石墨烯复合介质周期结构具有完全不同的光学行为. 本文所提出的一般计算方法及其计算公式, 对研究超薄导电体的光学行为具有重要的意义.

2 理论模型与计算方法

为便于理论推导, 我们画出了处于介质层中电导率为 σ 的二维超薄导电体光学行为的理论模型, 如图 1 所示. 光从空气中以入射角为 θ_0 入射到含电导率为 σ 二维超薄导电体的多层介质上.

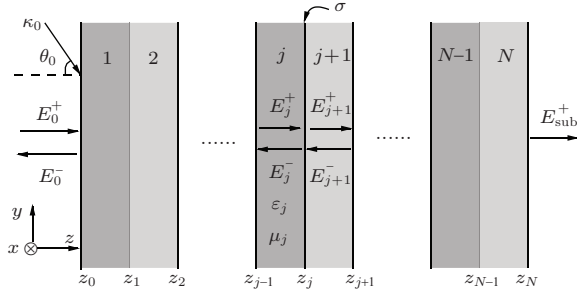


图 1 电导率为 σ 的二维超薄导电体处于介质层中光学行为的理论模型

二维超薄导电体位于介质 j 和介质 $j+1$ 的分界面 z_j 处, 其电导率 σ 不为零, 如图 1 所示, 则在分界面 z_j 处遵循下面的电磁场边界条件:

$$\hat{n} \times (\mathbf{E}_j - \mathbf{E}_{j+1}) = 0, \quad (1)$$

$$\hat{n} \times (\mathbf{H}_j - \mathbf{H}_{j+1}) = \sigma \mathbf{E}_{j+1}. \quad (2)$$

由介质 j 层电场:

$$\mathbf{E}_j = (E_j^+ e^{ik_{j,z}z} + E_j^- e^{-ik_{j,z}z}) \hat{e}_x, \quad (3)$$

并利用电场与磁场的关系可以得到介质 j 层磁场

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_j &= \frac{1}{i\omega\mu_0\mu_j} \nabla \times \mathbf{E}_j \\ &= \frac{k_{j,z}}{\mu_0\mu_j\omega} (E_j^+ e^{ik_{j,z}z} - E_j^- e^{-ik_{j,z}z}) \hat{e}_y. \end{aligned} \quad (4)$$

则利用方程 (3) 和 (4) 式代入 (1) 和 (2) 式得到

$$E_j^+ + E_j^- = E_{j+1}^+ + E_{j+1}^-, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{k_{j,z}}{\mu_j} (E_j^+ - E_j^-) &= \left(\frac{k_{j+1,z}}{\mu_{j+1}} + \mu_0\omega\sigma \right) E_{j+1}^+ \\ &\quad - \left(\frac{k_{j+1,z}}{\mu_{j+1}} - \mu_0\omega\sigma \right) E_{j+1}^-. \end{aligned} \quad (6)$$

联立 (5) 式和 (6) 式求解可得到位于分界面 z_j 两侧第 j 层介质与第 $j+1$ 层介质场强之间的关系:

$$\begin{pmatrix} E_j^+ \\ E_j^- \end{pmatrix} = \left(D_{j,j+1} + \frac{\mu_0\mu_j\omega\sigma}{2k_{j,z}} J \right) \begin{pmatrix} E_{j+1}^+ \\ E_{j+1}^- \end{pmatrix}, \quad (7)$$

其中

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$D_{j,j+1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_{j+1,z}\mu_j}{k_{j,z}\mu_{j+1}} & 1 - \frac{k_{j+1,z}\mu_j}{k_{j,z}\mu_{j+1}} \\ 1 - \frac{k_{j+1,z}\mu_j}{k_{j,z}\mu_{j+1}} & 1 + \frac{k_{j+1,z}\mu_j}{k_{j,z}\mu_{j+1}} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$k_{j,z} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_j \mu_j} \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta_0}{\varepsilon_j \mu_j}}, \quad (10)$$

这里 ε_j 和 μ_j 分别为第 j 层介质的介电常数和磁导率. 而对于一般电介质材料, 电磁波在两种不同介质分界面传播时, 其场强有一突变, 电磁波从第 j 介质向第 $j+1$ 层介质传播时, 由于电介质材料的电导率 $\sigma=0$, 在界面处场强的计算, 由 (7) 式简化为

$$\begin{pmatrix} E_j^+ \\ E_j^- \end{pmatrix} = D_{j,j+1} \begin{pmatrix} E_{j+1}^+ \\ E_{j+1}^- \end{pmatrix}. \quad (11)$$

而对于波在第 j 层介质内部传播 d_j 距离时, 波的传播仅仅改变相位大小, 可以由一个传播矩阵 p_j 来表示

$$P_j = \begin{pmatrix} e^{-ik_{j,z}d_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_{j,z}d_j} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

则入射电磁波空间和出射电磁波空间的场强由一个总的传输矩阵来联系:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{pmatrix} &= T_{\text{tal}} \begin{pmatrix} E_{\text{sub}}^+ \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\text{sub}}^+ \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (13)$$

这里

$$\begin{aligned} T_{\text{tal}} &= D_{0,1} P_1 \dots P_j \left(D_{j,j+1} + \frac{\mu_0\mu_j\omega\sigma}{2k_{j,z}} J \right) \\ &\quad \times P_{j+1} \dots P_{N-1,N} P_N D_{N,\text{sub}}. \end{aligned} \quad (14)$$

特别要提出的是当超薄导体裸露在空气中时,

$$T_{\text{tal}} = 1 + \frac{\mu_0\omega\sigma}{2k_{0,z}} J. \quad (15)$$

由(13)式可得透射波场强和反射波场强分别与入射波场强的关系:

$$E_{\text{sub}} = \frac{1}{T_{11}} E_0^+, \quad (16)$$

$$E_0^- = \frac{T_{21}}{T_{11}} E_0^+. \quad (17)$$

进而便可得到整个材料对电磁波的反射率和透射率

$$R = \left| \frac{E_0^-}{E_0^+} \right|^2 = \left| \frac{T_{21}}{T_{11}} \right|^2, \quad (18)$$

$$T = \frac{q_{\text{sub}}}{q_0} \left| \frac{E_{\text{sub}}^+}{E_0^+} \right|^2 = \frac{q_{\text{sub}}}{q_0} \left| \frac{1}{T_{11}} \right|^2. \quad (19)$$

对于入射空间和透射空间(衬底)均为空气时, $q_0 = q_{\text{sub}} = \cos \theta_0$, 否则可利用公式

$$q = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta_0}{\varepsilon \mu}} \quad (20)$$

来分别计算入射空间 q_0 和衬底的 q_{sub} .

材料对电磁波的吸收率也由反射率和透射率来获得

$$A = 1 - T - R. \quad (21)$$

3 计算结果及分析

下面以石墨烯及其复合结构为例, 应用上述理论公式对其在 THz 频率范围内光学反射、透射和吸收等行为进行数值研究. 石墨烯在 THz 频率范围内, 单层石墨烯的电导率是一个随频率变化的 Drude 函数^[15]

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2}{\pi \hbar^2} \frac{E_f}{\Gamma - i\omega}, \quad (22)$$

这里 E_f 是对应于狄拉克点的费米能级, 能够通过外加电场来调节其高低, Γ 是电子弛豫率, ω 为光波频率, 电导率 $\sigma(\omega)$ 决定了石墨烯在 THz 频率范围内光学行为.

首先, 我们研究了单层石墨烯裸露在空气中光学行为, 在图2中我们画出了费米能级 $E_f = 0.2$ eV 及电子弛豫率 $\Gamma = 2.5$ meV/h 时单层裸露石墨烯透射率、反射率和吸收率在 THz 频率范围随入射光频率变化的光谱图. 从图中我们可以看到, 当入射光频率从 0.1 THz 增大到 10 THz 时, 单层裸露石墨烯的透射率从 0.16 增大到 0.98, 反射率从 0.35 减小到 0.008, 吸收率从 0.48 减小到 0.012, 图中我

们注意到当光频率为 5.34 THz 时, 吸收率为 0.034, 这个值正好是单层石墨烯在可见光频率范围固定的吸收值^[16].

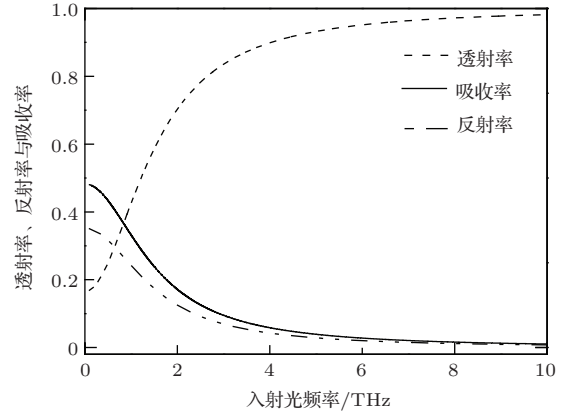


图2 裸露在空气中的单层石墨烯透射率、反射率和吸收率在 THz 频率范围随入射光频率变化的光谱图(其中, 费米能级 $E_f = 0.2$ eV, 电子弛豫率 $\Gamma = 2.5$ meV/h)

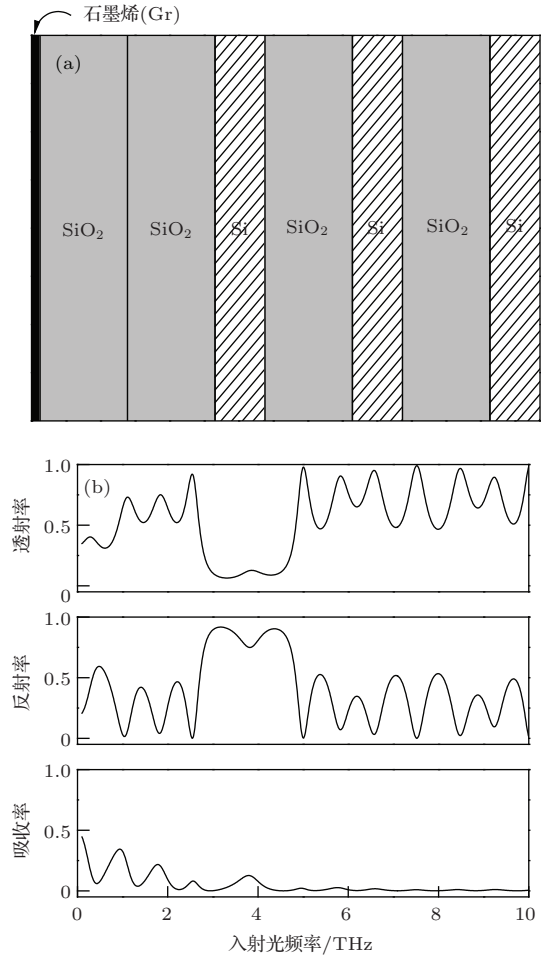


图3 (a) 石墨烯(Gr)复合多层介质结构 Gr/SiO₂/(SiO₂/Si)³ 示意图; (b) 石墨烯(Gr)复合多层介质结构 Gr/SiO₂/(SiO₂/Si)³ 的透射率、反射率和吸收率随入射光频率变化的光谱图(其中, 费米能级 $E_f = 0.25$ eV, 电子弛豫率 $\Gamma = 2.5$ meV/h)

为了进一步得到单层裸露石墨烯与石墨烯复合材料在THz频率范围光学行为到底有何不同,我们选择Si和SiO₂作为复合材料,在THz频率范围内,其介电常数分别为 $\epsilon_{\text{Si}} = 11.9$ 和 $\epsilon_{\text{SiO}_2} = 3.9$,两者均为非磁材料($\mu = 1$),厚度分别为 $d_{\text{Si}} = \lambda_0/4\sqrt{\epsilon_{\text{Si}}}$ 和 $d_{\text{SiO}_2} = \lambda_0/4\sqrt{\epsilon_{\text{SiO}_2}}$,其中 $\lambda_0 = 80 \mu\text{m}$ 为入射光的中心波长.图3(b)我们数值计算得到石墨烯复合结构Gr/SiO₂/(SiO₂/Si)³(如图3(a))在THz频率范围内透射率、反射率和吸收率的光谱图.计算中,我们选取费米能级 $E_f = 0.25 \text{ eV}$,电子弛豫率 $\Gamma = 2.5 \text{ meV}/\hbar$.从图3(b)我们能够看到石墨烯复合结构的透射率、反射率和吸收率的光学行为与裸露单层石墨烯完全不同,它不像单层裸露石墨烯谱线单调上升或单调下降,其透射谱和反射谱与常规的多层介质结构相仿,在带隙外都是周期性上下振荡,所不同的是在透射谱和反射谱的宽带隙中心附近,透射谱呈现上凸,而反射谱却呈现下凹.由于SiO₂与Si有一个较大的折射率之差,因而导致其组成的多层周期结构会出现一个较大的带隙,并且由于结构中的Gr/SiO₂充当了整个复合周期结构的一个缺陷层,因此在透射谱中能看到在带隙中出现一个上凸形状,其实这就是一个缺陷模.而反射谱下凹是由于在该处有一个较强的吸收峰引起的.吸收峰越大,则反射谱下凹就越明显.

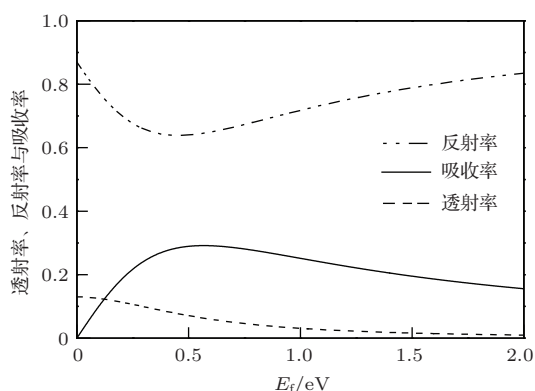


图4 石墨烯(Gr)复合多层介质结构Gr/SiO₂/(SiO₂/Si)³的透射率、反射率和吸收率在入射光频率(如图3所示吸收谱的峰值对应的频率3.79 THz)时随费米能级 E_f 变化的光谱图(其中,电子弛豫率 $\Gamma = 2.5 \text{ meV}/\hbar$)

为了能够利用外加电场来操控石墨烯的光学行为,图4中我们数值研究了石墨烯复合结构Gr/SiO₂/(SiO₂/Si)³的透射率、反射率和吸收率在光波频率为3.79 THz(如图3吸收谱的峰值对应频

率)时随费米能级 E_f 变化的光谱图.其中,电子弛豫率 $\Gamma = 2.5 \text{ meV}/\hbar$.当随费米能级 E_f 从增大到2 eV时,反射率先减小后增大,吸收率则相反,先增大后减小,而透射率一直单调减小.主要原因在于随费米能级 E_f 的变化,影响导体光学行为的电导率也随之发生改变,从而其透射、反射和吸收也相应发生变化.

4 结 论

本文基于麦克斯韦方程组所要求的电磁场边界条件从理论上严格推导得到超薄导体及其复合多层介质结构光学特性的一般计算方法及其计算公式.我们的理论计算方法优点在于只要借助于导体的电导率而无需知道其介电常数和磁导率即可直接计算获得其光学特性.克服了传统常规方法必须知道组成材料的介电常数和磁导率才能计算得到其光学性质的问题.我们利用此方法计算了石墨烯及其复合多层介质结构在THz频率范围内反射、透射和吸收等光学行为.我们发现,单层裸露石墨烯的透射率随入射光频率增大而增大,反射率和吸收率则相反,随入射光频率增大而减小,石墨烯复合介质周期结构的由于带隙和缺陷层的存在导致与裸露石墨烯完全不同的光学行为.本文提出的一般计算方法及其计算公式,对研究超薄导体的光学行为具有重要的意义.

参考文献

- [1] Jacobsen R H, Mittleman D M, Nuss M C 1996 *Opt. Lett.* **21** 2011
- [2] Shen Y C, Lo T, Taday P F, Cole B E, Tribe W R, Kemp M C 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 241116
- [3] Chen D P, Xing C F, Zhang Z, Zhang C L 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 024202 (in Chinese) [陈大鹏, 邢春飞, 张峥, 张存林 2012 物理学报 **61** 024202]
- [4] Markelz A G, Roitberg A, Heilweil E J 2000 *Chem. Phys. Lett.* **320** 42
- [5] Li Z Y, Yao J Q, Xu D G, Zhong K, Wang J L, Bing P B 2011 *Chin. Phys. B* **20** 054207
- [6] Yoneyama H, Yamashita M, Kasai S, Kawase K, Ito H, Ouchi T 2008 *Opt. Commun.* **281** 1909
- [7] Lee S H, Choi M, Kim T T, Lee S, Liu M, Yin X, Choi H K, Lee S S, Choi C G, Choi S Y, Zhang X, Min B 2012 *Nature Mater.* **11** 936
- [8] Ju L, Geng B, Horng J, Girit C, Martin M, Hao Z, Bechtel H A, Liang X A, Zettl Y, Shen R, Wang F 2011 *Nature Nanotechnol.* **6** 630

- [9] Xie L Y, Xiao W B, Huang G Q, Hu A R, Liu J T 2014 Acta Phys. Sin. 63 057803 in Chinese 2014 **63** 057803 (in Chinese) [谢凌云, 肖文波, 黄国庆, 胡爱荣, 刘江涛 2014 物理学报 **63** 057803]
- [10] Rodriguez B S, Yan R, Kelly M M, Fang T, Tahy K, Hwang W S, Jena D, Liu L, Xing H G 2012 *Nature Commun.* **3** 780
- [11] Ren L, Zhang Q, Yao J, Sun Z, R K, Zheng Y, Nanot S, Jin Z, Kawayama I, Tonouchi M, Tour J M, Kono J 2012 *Nano Lett.* **7** 3711
- [12] Zhang Y P, Zhang H Y, Yin Y H, Liu L Y, Zhang X, Gao Y, Zhang H Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 047803 (in Chinese) [张玉萍, 张洪艳, 尹贻恒, 刘陵玉, 张晓, 高营, 张会云 2012 物理学报 **61** 047803]
- [13] Zuo Z G, Wang P, Ling F R, Liu J S, Yao J Q 2013 *Chin. Phys. B* **22** 097304
- [14] Bruna M, Borinia S 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 031901
- [15] Horng J, Chen C F, Geng B, Girit C, Zhang Y, Hao Z, Bechtel H A, Martin M, Zettl A, Crommie M F, Shen Y R, Wang F 2011 *Phys. Rev. B* **83** 165113
- [16] Nair R R, Blake P, Grigorenko A N, Novoselov K S, Booth T J, Stauber T, Peres N M R, Geim A K 2008 *Science* **320** 1308

A new characteristics matrix method based on conductivity and its application in the optical properties of graphene in THz frequency range*

Deng Xin-Hua^{1)2)†} Liu Jiang-Tao¹⁾ Yuan Ji-Ren¹⁾ Wang Tong-Biao¹⁾

¹⁾ (School of Science, Nanchang University, Nanchang 330031, China)

²⁾ (State Key Laboratory of Millimeter Waves, Southeast University, Nanjing 210096, China)

(Received 29 August 2014; revised manuscript received 30 September 2014)

Abstract

A new characteristics matrix method along with the formulas based on conductivity, which can be used to calculate the optical properties of an ultra-thin conductive composite multilayer dielectric structure, is derived for the first time as far as we know based on the electromagnetic boundary conditions Maxwell's equations required. It can be used to calculate the reflection, transmission, and absorption of light, provided that the conductivity of the conductive body is known, also it can overcome the shortcoming of the traditional transfer matrix method, i.e. it is necessary to know the permittivity and permeability of the material. By using the proposed method, the optical behavior of graphene and composite multilayer structures can be obtained in the THz frequency range.

Keywords: conductivity characteristics matrix, graphene, terahertz

PACS: 78.67.Wj, 42.70.Qs, 95.85.Fm

DOI: 10.7498/aps.64.057801

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11364033, 61464007, 11264029), the Open Research Fund of State Key Laboratory of Millimeter Waves (Grant No. K201216), the Natural Science Foundation of Jiangxi Province, China (Grant No. 20122BAB202002), and the Postdoctoral Science Foundation of Jiangxi Province, China (Grant No. 2014KY32).

† Corresponding author. E-mail: dengxinhua@ncu.edu.cn