

含“无限薄”石墨烯界面目标电磁特性分析的 FDTD 方法*

王飞[†] 魏兵 李林茜

(西安电子科技大学物理学院, 西安 710071)

(2025 年 10 月 13 日收到; 2025 年 11 月 10 日收到修改稿)

应用时域有限差分 (finite-difference time-domain, FDTD) 方法分析目标电磁特性时, 需要对目标进行空间离散. 当宏观电磁目标包含“无限薄”石墨烯界面时, 该界面不能进行纵向剖分, 同时界面上存在面电流, 使界面上的切向电场不能采用常规方法计算. 对于含不可纵向剖分石墨烯界面的电磁目标, 提出一种等效源电流 (equivalent source current, ESC)-时域有限差分方法. 将石墨烯界面上的面电流等效为源体电流, 从而采用有源 Maxwell 方程, 然后通过中间变量并结合处理色散介质问题的移位算子方法, 得到石墨烯界面上切向电场的迭代计算式, 最终实现含“无限薄”石墨烯界面目标的 FDTD 计算. 多个算例的计算结果都和解析结果有很高的吻合度, 表明该方法是正确有效的. 本文方法可以推广应用用于含“无限薄”导电色散界面目标电磁特性的数值分析.

关键词: 石墨烯, 时域有限差分, 电磁特性

DOI: 10.7498/aps.75.20251387

CSTR: 32037.14.aps.75.20251387

1 引言

石墨烯是世界上最薄的半导体材料, 狭义上指由单层碳原子构成的二维六边形蜂窝晶格结构^[1]. 石墨烯具有高电子迁移率、低电阻率、高灵活性及结构稳定等特性^[2], 同时, 其光敏感特性使其在光学和光电传感等方面具有广泛应用前景^[3-11], 并非常适合于太赫兹光学设备^[12-15]. 石墨烯非常薄, 只有一个原子厚, 约为 0.34 nm, 因此在讨论含有石墨烯结构的宏观目标与电磁波 (光波) 相互作用问题时, 往往可以忽略石墨烯层的纵向结构, 将其看作是一个“无限薄”的二维“面”结构^[16], 本文称之为“石墨烯界面”. 同时由于石墨烯的导电特性, 该“界面”上还存在面电流, 这使得无论是解析方法还是数值算法, 在处理此类含石墨烯界面目标电磁问题

时都需要对原有方法或算法进行修正和推广. 本文主要研究讨论适用于含有石墨烯界面目标的时域有限差分 (finite-difference time-domain, FDTD) 算法.

FDTD 算法需要首先在空间域对目标进行正交立方体网格剖分^[17], 每个空间剖分单元, 即为 Yee 元胞. 一般的剖分原则下, Yee 元胞都是均匀介质, 所以计算域中不同介质的分界面位于 Yee 元胞表面. 也就是说, 当目标含有石墨烯界面时, FDTD 网格划分必然要将石墨烯面设置在 Yee 元胞的表面位置, 而 Yee 元胞的表面上分布有电磁场采样点, 那么此时这些位于石墨烯界面上的电磁场采样点的 FDTD 计算式就需要进行修正, 从而将界面的导电特性包括进去. 如前所述, 石墨烯界面上存在面电流分布, 该面电流使界面二侧的切向磁场不连续, 所以界面上切向电场的 FDTD 迭代计算式需要进行修正. 本文提出一种等效源电

* 国家自然科学基金 (批准号: 62371378, 62471352) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: wfei79@163.com

流 (equivalent source current, ESC) 方法, 修正石墨烯界面上切向电场的 FDTD 迭代计算式. 该方法将石墨烯表面电流等效为一种源体电流, 从而在石墨烯界面切向电场采样点应用有源 Maxwell 方程; 然后根据石墨烯表面电导率的色散特性, 在此类采样点引入中间变量并建立其与切向电场的频域关系方程; 最后对含中间变量的有源 Maxwell 方程进行时域差分离散, 对中间变量和电场频域关系方程采用移位算子 (shift operate, SO) 方法 [18-21] 处理得到离散时域关系, 最终实现石墨烯界面位置切向电场采样点的离散时域迭代计算. 应用本文方法计算了一、二、三维的几个不同算例, 计算结果和解析结果吻合度很高, 说明该方法是正确有效的. 本文时谐因子取 $\exp(j\omega t)$.

2 理论

2.1 石墨烯的表面电导率和表面电流

表面电导率 $\sigma_g(\omega, \mu_c, \Gamma, T)$ 可以表征石墨烯界面的导电特性, 其中 ω , μ_c , Γ 和 T 分别是角频率、化学势、散射率和室温. 表面电导率 σ_g 与石墨烯表面电流 J_s 和切向电场 E_τ 有关, 它们的关系如下:

$$J_s = \sigma_g E_\tau. \quad (1)$$

Kobu 公式给出表面电导率 $\sigma_g = \sigma_{\text{intra}} + \sigma_{\text{inter}}$, σ_{intra} 取决于能带内的能量, 而 σ_{inter} 取决于能带间的能量. 由于能带内的能量占能量主要部分, 一般只考虑 σ_{intra} 项, 而忽略 σ_{inter} 项. σ_{intra} 表达式为 Drude 模型 [16]:

$$\sigma_{\text{intra}}(\omega, \mu_c, \Gamma, T) = \frac{\sigma_0}{1 + j\omega\tau},$$

$$\sigma_0 = \frac{e^2 \tau k_B T}{\pi \hbar^2} \left\{ \frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left[\exp \left(-\frac{\mu_c}{k_B T} \right) + 1 \right] \right\}, \quad (2)$$

其中 σ_0 为直流电导率, e 是电子电量, k_B 是玻尔兹曼常数, $\hbar$ 是约化普朗克常量, $\tau = 1/(2\Gamma)$ 是电子弛豫时间.

2.2 石墨烯界面上切向电场 FDTD 迭代计算的等效源电流方法

如前所述, 当应用 FDTD 方法对某含有石墨烯界面的宏观目标进行计算分析时, 不可能对其中石墨烯层进行纵向剖分, 只能将其看成无限薄的面, 即在 FDTD 空间网格中石墨烯应该位于

Yee 元胞界面位置. 此时, 考虑到石墨烯的导电特性, 该界面上的切向场分量节点的 FDTD 迭代计算需要修正.

首先以一维情形为例, 说明石墨烯界面上切向电场 FDTD 迭代计算式修正的等效源电流 (ESC) 方法.

如图 1 所示, 设垂直于 z 轴的无限大石墨烯界面两侧分别为介质 1 和 2, 一维 FDTD 剖分网格 (Yee 元胞) 大小为 Δz , 石墨烯界面位于 $k = k_g$ 节点处. $k = k_g$ 节点处为切向电场 E_x 采样点, 由于石墨烯的导电性, 使得该处存在面电流 J_{sx} , 从而导致该界面两侧的磁场切向分量 H_y 不连续. 在 FDTD 采样规则中, 在 Yee 元胞界面上没有切向磁场采样点, 所以对于临近石墨烯界面、位于 $k = k_g \pm 0.5$ 磁场节点处的 H_y , 其迭代式不受石墨烯界面影响, 仍然按照无源旋度方程离散式来处理. 相反, 切向电场是位于 Yee 元胞界面上的, 该界面若为石墨烯, 则还会出现和电场同方向的切向面电流, 所以该处切向电场 E_x 的计算需要考虑面电流 J_{sx} 的影响. 通过修正 $k = k_g$ 处电场 $E_x(k_g)$ 的迭代式, 从而在 FDTD 计算中实现对含石墨烯导电界面目标的数值模拟.

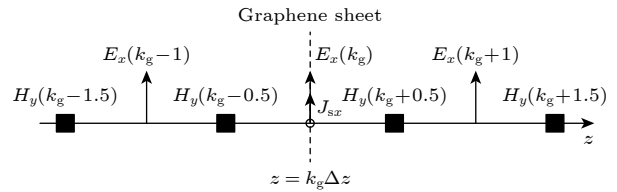


图 1 含石墨烯面的一维 Yee 元胞网格

Fig. 1. One dimensional Yee cell grid including a graphene sheet.

将 $k = k_g$ 处石墨烯界面上的面电流 J_{sx} 等效成源电流 J_{ix} , 则该处 Maxwell 方程为有源形式:

$$-\frac{\partial H_y}{\partial z} = \varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + J_{ix}. \quad (3)$$

等效源电流 J_{ix} 与石墨烯界面上的面电流 J_{sx} 关系为

$$J_{ix} = \frac{J_{sx}}{\Delta z} = \frac{\sigma E_x}{\Delta z}. \quad (4)$$

将 (2) 式和 (4) 式代入 (3) 式的频域形式, 可得

$$-\frac{\partial H_y}{\partial z} = \left[j\omega\varepsilon + \frac{\sigma_0}{(1 + j\omega\tau)\Delta z} \right] E_x = j\omega\varepsilon S_x, \quad (5)$$

其中,

$$S_x = \left[\frac{\tau(j\omega)^2 + (j\omega) + \sigma_0/\varepsilon\Delta z}{\tau(j\omega)^2 + (j\omega)} \right] E_x \quad (6)$$

为中间变量. 应用频域-时域转换关系:

$$j\omega \rightarrow \frac{\partial}{\partial t}. \quad (7)$$

将 (5) 式过渡到时域:

$$-\frac{\partial H_y}{\partial z} = \varepsilon \frac{\partial S_x}{\partial t}. \quad (8)$$

在节点 $k = k_g$ 对 (8) 式进行 FDTD 离散, 可以得到 $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{S}$ 的递推计算式:

$$S_x^{n+1}(k_g) = S_x^n(k_g) - \frac{\Delta t}{\varepsilon\Delta z} \left[H_y^{n+1/2}(k_g + 1/2) - H_y^{n+1/2}(k_g - 1/2) \right]. \quad (9)$$

将 (6) 式过渡到时域, 然后按照 SO 方法^[18-21] 处理则得到 $\mathbf{S} \rightarrow \mathbf{E}$ 的递推关系式:

$$E_x^{n+1}(k_g) = \frac{1}{b_0} \left[a_0 S_x^{n+1}(k_g) + a_1 S_x^n(k_g) + a_2 S_x^{n-1}(k_g) - b_1 E_x^n(k_g) - b_2 E_x^{n-1}(k_g) \right], \quad (10)$$

其中:

$$\begin{aligned} a_0 &= q_0 + q_1 h + q_2 h^2, \quad a_1 = 2q_0 - 2q_2 h^2, \\ a_2 &= q_0 - q_1 h + q_2 h^2, \quad b_0 = p_0 + p_1 h + p_2 h^2, \\ b_1 &= 2p_0 - 2p_2 h^2, \quad b_2 = p_0 - p_1 h + p_2 h^2, \\ p_0 &= \sigma_0/\varepsilon\Delta z, \quad p_1 = 1, \quad p_2 = \tau, \\ q_0 &= 0, \quad q_1 = 1, \quad q_2 = \tau. \quad h = 2/\Delta t. \end{aligned} \quad (11)$$

(9) 式和 (10) 式是修正后 $k = k_g$ 节点处电场 $E_x(k_g)$ 的 FDTD 迭代计算式, 用以实现该石墨烯界面节点处 $H_y^{n+1/2} \rightarrow S_x^{n+1} \rightarrow E_x^{n+1}$ 的递推计算.

考虑一般的三维情形, 石墨烯界面分布于三维 Yee 元胞的表面, 如图 2 所示. 每个 Yee 元胞有 6 个面, 将含石墨烯的 Yee 元胞面称为石墨烯

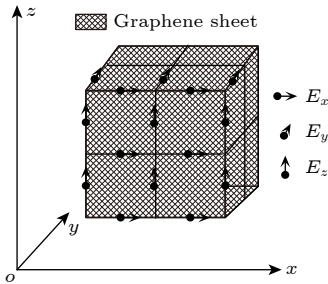


图 2 含石墨烯面的三维 Yee 元胞网格

Fig. 2. Three-dimensional Yee cell grid incorporating graphene sheets.

面元, 此时凡是位于和石墨烯面元相邻的棱边上的切向电场分量 E_x, E_y, E_z 都需要进行修正, 修正时需要引入的石墨烯面电流密度 $\mathbf{J}_s$ 的各个直角分量采样点和电场 $\mathbf{E}$ 各对应分量的 FDTD 采样点位置相同. 具体的修正方法如下 (以 E_x 为例).

有源磁场旋度方程的 x 分量为

$$(\nabla \times \mathbf{H})_x = \varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + J_{ix}, \quad (12)$$

式中 J_{ix} 为 E_x 节点处的等效源电流密度 x 分量, 与石墨烯界面上的面电流 J_{sx} 关系为

$$J_{ix} = \frac{1}{2} \frac{J_{sx}}{\Delta y \Delta z} \alpha_x = \frac{\sigma E_x}{2 \Delta y \Delta z} \alpha_x, \quad (13)$$

其中 α_x 的选择原则: 统计环绕该 E_x 节点棱边的 4 个 Yee 元胞面 (如图 3(a), (b) 所示), 有一个面为石墨烯时, 在 α_x 中记入该面的非 x 切向方向的 Yee 元胞宽度. 图 3(c) 中, 该棱边相邻只有一个 Yee 元胞面 (非 x 切向方向沿 y 或 z) 是石墨烯, α_x 取 Δy 或 Δz ; 图 3(d) 中, 该棱边相邻两个 Yee 元胞面 (非 x 切向方向都沿 y 或 z) 是石墨烯, α_x 取 $2\Delta y$ 或 $2\Delta z$; 图 3(e) 中, 该棱边相邻两个 Yee 元胞面 (非 x 切向方向分别沿 y 和 z) 是石墨烯, α_x 取 $\Delta y + \Delta z$; 此外, 还可能有 4 个 Yee 元胞面中有 3 个或 4 个石墨烯面元的情况, α_x 的取值也是依照前述原则.

上述选择原则的目的是将垂直穿过以 E_x 节点为中心的一个元胞截面 (图 3(b) 中虚线所示范围, 面积为 $\Delta y \Delta z$) 的总电流 I_{ix} 计算出来:

$$I_{ix} = \frac{\alpha_x}{2} \sigma E_x, \quad (14)$$

然后除以元胞截面 $\Delta y \Delta z$ 就得到 E_x 节点处的体电流密度 (13) 式.

采用相同的方法处理其他电场分量, 有源磁场旋度方程的 y, z 分量为

$$(\nabla \times \mathbf{H})_{y,z} = \varepsilon \frac{\partial E_{y,z}}{\partial t} + J_{iy,iz}, \quad (15)$$

其中 J_{iy}, J_{iz} 为 E_y, E_z 节点处的等效源电流密度 y, z 分量, 与石墨烯界面上的面电流 J_{sy}, J_{sz} 关系为

$$\begin{aligned} J_{iy} &= \frac{1}{2} \frac{J_{sy}}{\Delta z \Delta x} \alpha_y = \frac{\sigma E_y}{2 \Delta z \Delta x} \alpha_y, \\ J_{iz} &= \frac{1}{2} \frac{J_{sz}}{\Delta x \Delta y} \alpha_z = \frac{\sigma E_z}{2 \Delta x \Delta y} \alpha_z, \end{aligned} \quad (16)$$

其中 $\alpha_{y,z}$ 的选择原则与前述 α_x 相同.

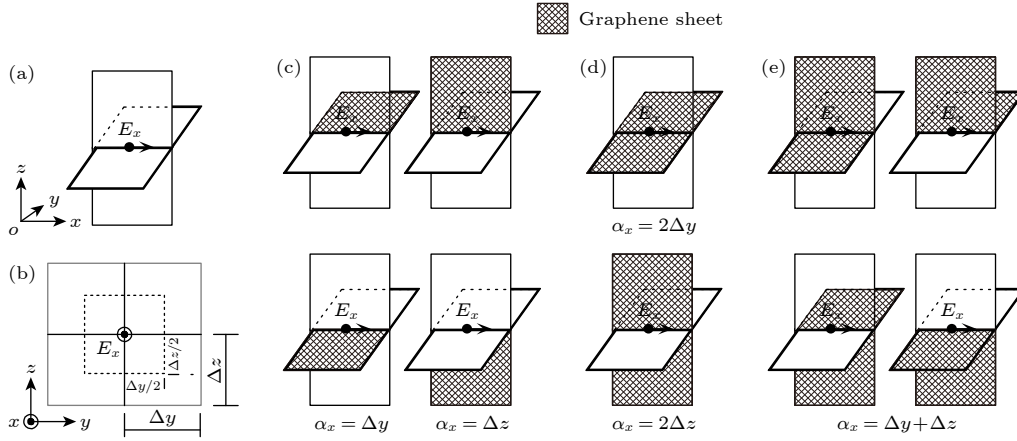


图 3 电场 E_x 节点棱边相邻的 4 个 Yee 元胞面 (a) 立体图; (b) 截面图; (c) 一个石墨烯面; (d) 两个平行石墨烯面; (e) 两个垂直石墨烯面
Fig. 3. Four Yee cell faces adjacent to the edges of the electric-field E_x nodes: (a) Stereograph; (b) sectional view; (c) one graphene surface; (d) two parallel graphene surfaces; (e) two perpendicular graphene surfaces.

将 (13) 式代入 (12) 式, (16) 式代入 (15) 式, 同时考虑表面电导率 (2) 式, 并转换到频域, 给出如下频域磁旋度方程:

$$(\nabla \times \mathbf{H})_{x,y,z} = j\omega \varepsilon S_{x,y,z}, \quad (17)$$

$$S_{x,y,z} = \left[\frac{\tau(j\omega)^2 + (j\omega) + (\sigma_0/\varepsilon)g_{x,y,z}}{\tau(j\omega)^2 + (j\omega)} \right] E_{x,y,z}, \quad g_x = \frac{\alpha_x}{2\Delta y \Delta z}, \quad g_y = \frac{\alpha_y}{2\Delta z \Delta x}, \quad g_z = \frac{\alpha_z}{2\Delta x \Delta y} \quad (18)$$

为中间变量. 应用频域-时域转换关系将 (17) 式过渡到时域:

$$(\nabla \times \mathbf{H})_{x,y,z} = \varepsilon \frac{\partial S_{x,y,z}}{\partial t}, \quad (19)$$

并对其进行 FDTD 离散就得到 $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{S}$ 递推计算式 (以 x 分量为例):

$$S_x^{n+1}(i+1/2, j, k) = S_x^n(i+1/2, j, k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left[\frac{H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k) - H_z^{n+1/2}(i+1/2, j-1/2, k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k+1/2) - H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k-1/2)}{\Delta z} \right]. \quad (20)$$

将 (18) 式过渡到时域, 然后按照 SO 方法 [18-21] 处理则得到 $\mathbf{S} \rightarrow \mathbf{E}$ 递推关系式:

$$\begin{aligned} E_x^{n+1}(i+1/2, j, k) &= \frac{a_0 S_x^{n+1}(i+1/2, j, k) + a_1 S_x^n(i+1/2, j, k) + a_2 S_x^{n-1}(i+1/2, j, k) - b_{x1} E_x^n(i+1/2, j, k) - b_{x2} E_x^{n-1}(i+1/2, j, k)}{b_{x0}}, \\ E_y^{n+1}(i, j+1/2, k) &= \frac{a_0 S_y^{n+1}(i, j+1/2, k) + a_1 S_y^n(i, j+1/2, k) + a_2 S_y^{n-1}(i, j+1/2, k) - b_{y1} E_y^n(i, j+1/2, k) - b_{y2} E_y^{n-1}(i, j+1/2, k)}{b_{y0}}, \\ E_z^{n+1}(i, j, k+1/2) &= \frac{a_0 S_z^{n+1}(i, j, k+1/2) + a_1 S_z^n(i, j, k+1/2) + a_2 S_z^{n-1}(i, j, k+1/2) - b_{z1} E_z^n(i, j, k+1/2) - b_{z2} E_z^{n-1}(i, j, k+1/2)}{b_{z0}}. \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} a_0 &= q_0 + q_1 h + q_2 h^2, \quad a_1 = 2q_0 - 2q_2 h^2, \quad a_2 = q_0 - q_1 h + q_2 h^2, \quad b_{\xi 0} = p_{\xi 0} + p_1 h + p_2 h^2, \\ b_{\xi 1} &= 2p_{\xi 0} - 2p_2 h^2, \quad b_{\xi 2} = p_{\xi 0} - p_1 h + p_2 h^2, \quad \xi = x, y, z, \quad p_{x0} = \frac{\sigma_0}{\varepsilon} \frac{\alpha_x}{2\Delta y \Delta z}, \\ p_{y0} &= \frac{\sigma_0}{\varepsilon} \frac{\alpha_y}{2\Delta z \Delta x}, \quad p_{z0} = \frac{\sigma_0}{\varepsilon} \frac{\alpha_z}{2\Delta x \Delta y}, \quad p_1 = 1, \quad p_2 = \tau, \quad q_0 = 0, \quad q_1 = 1, \quad q_2 = \tau. \end{aligned} \quad (22)$$

(20) 式和 (21) 式就是修正后的电场切向分量 FDTD 迭代计算式, 用以实现位于石墨烯界面上电场节点的 $\mathbf{H}^{n+1/2} \rightarrow \mathbf{S}^{n+1} \rightarrow \mathbf{E}^{n+1}$ 计算.

3 算例

3.1 一维算例

3.1.1 一维算例 1: 空气中石墨烯层的反射和透射

采用本文方法计算平面波垂直入射空气中一石墨烯界面的反射和透射系数, 石墨烯参数为

$$T = 300 \text{ K}, \mu_c = 0.5 \text{ eV}, \tau = 0.5 \text{ ps}. \quad (23)$$

计算结果如图 4 中实线 (反射) 和虚线 (透射) 所示, 作为对比, 图中同时给出了传播矩阵 (propagation matrix, PM) 方法计算的解析结果 [22], 二者十分吻合, 表明本文方法正确有效.

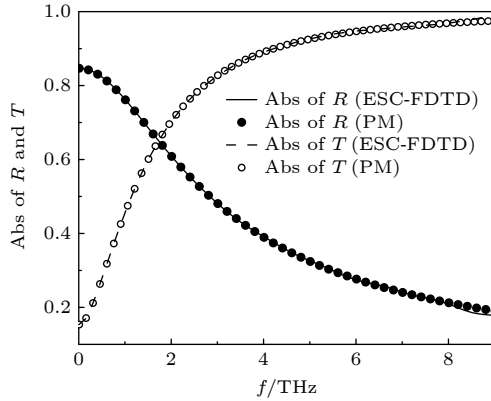


图 4 石墨烯单层的反射和透射系数模值

Fig. 4. Modulus of reflective and transmittance coefficients of a graphene sheet.

图 5(a), (b) 分别给出了 FDTD 计算时的第 500 时间步电磁场的瞬态场值快照. 从图 5 可以看到, 在石墨烯界面两侧切向磁场不连续而切向电场是连续的.

3.1.2 一维算例 2: 石墨烯涂覆含 SiO_2 缺陷层的 Si- SiO_2 周期结构型一维光子晶体的反射和透射

一含 SiO_2 缺陷层的 Si/ SiO_2 周期结构型一维光子晶体, 其上表面涂覆单层石墨烯, 如图 6 所示. 该周期结构周期数 $N = 8$, 介质 a (Si) 和介质 b (SiO_2) 参数为

$$\varepsilon_{ra} = 12, \varepsilon_{rb} = 4.5, \quad (24)$$

Si, SiO_2 层和缺陷层的厚度分别为 $d_a = 5.5 \mu\text{m}$, $d_b = 9.5 \mu\text{m}$, $d_s = 11 \mu\text{m}$.

图 7 中用实线表示采用本文方法计算的该光子晶体的反射和透射系数, 图中圆点表示传播矩阵 (PM) 方法 [22] 计算的解析结果, 二者十分吻合, 表明本文方法的正确有效性.

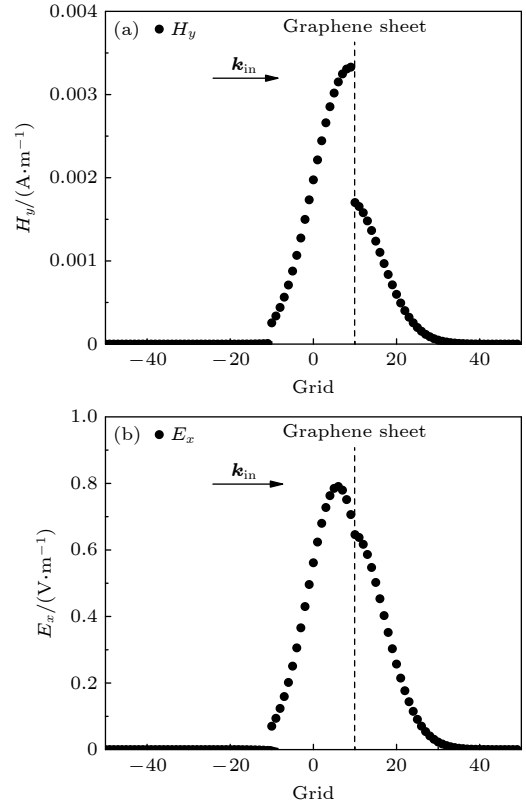


图 5 第 500 时间步时的电磁场瞬态场值 (a) H_y ; (b) E_x

Fig. 5. Transient field values of the electromagnetic field at the 500th time step: (a) H_y ; (b) E_x .

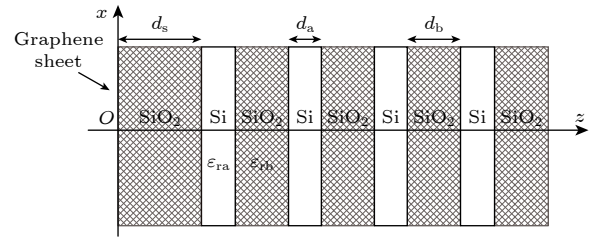


图 6 Si/ SiO_2 周期结构型一维光子晶体

Fig. 6. Si/ SiO_2 one-dimensional photonic crystal (1DPC).

3.2 二维算例: 线电流辐射在石墨烯界面上的反射和透射

设 $y = 0$ 面为无限大单层石墨烯平面, 如图 8

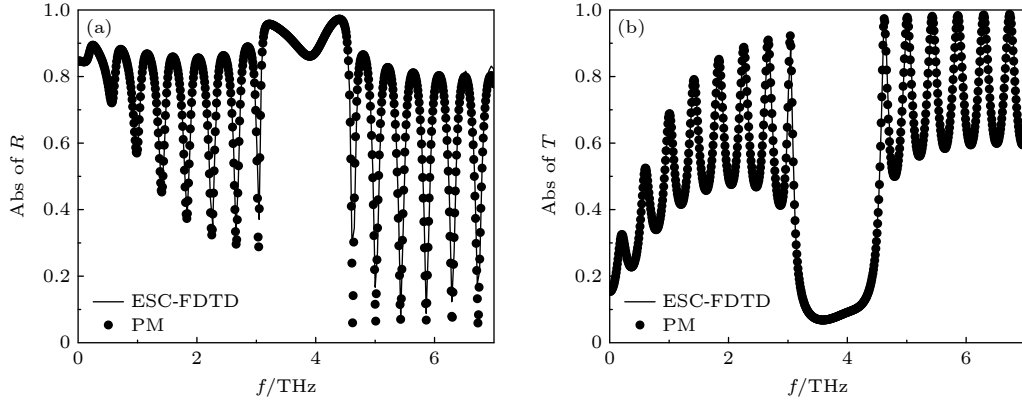

 图 7 含石墨烯涂层 Si/SiO₂ 周期结构一维光子晶体的反射和透射 (a) 反射系数; (b) 透射系数

Fig. 7. Reflection and transmission of Si/SiO₂ 1DPC containing graphene sheet: (a) Modulus of reflective coefficient; (b) modulus of transmittance coefficient.

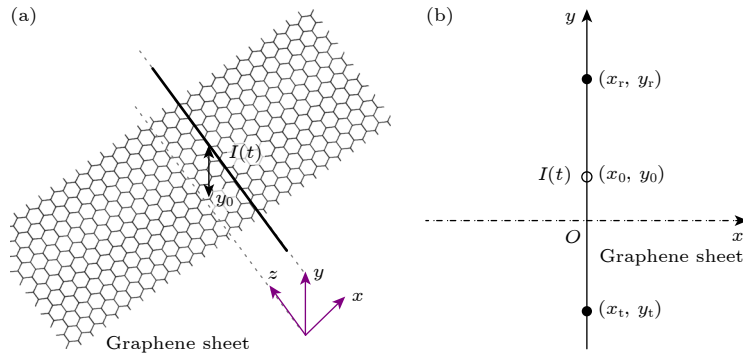


图 8 线电流源激励无限大石墨烯面 (a) 立体图; (b) 截面图

Fig. 8. Electric line-source excitation of an infinite graphene sheet: (a) Stereograph; (b) sectional view.

所示, 石墨烯参数为

$$T = 300 \text{ K}, \mu_c = 0, \tau = 1.0 \text{ ps}. \quad (25)$$

在石墨烯面上方 $x_0 = 0 \text{ mm}, y_0 = 1 \text{ mm}$ 处有一无限长线电流沿 z 方向, 电流为时域幂指数脉冲:

$$I(t) = I_0 \left(\frac{t}{t_r} \right)^n \exp \left[-n \left(\frac{t}{t_r} - 1 \right) \right] U(t),$$

$$U(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ 1, & t \geq 0, \end{cases} \quad (26)$$

其中 $U(t)$ 是时域阶跃函数, $I_0 = 1 \mu\text{A}$, $n = 16$, t_r 是脉冲上升时间.

在石墨烯界面上方 $x_r = 0 \text{ mm}, y_r = 3 \text{ mm}$ 处和下方 $x_t = 0 \text{ mm}, y_t = -2 \text{ mm}$ 处分别设置反射和透射观察点. 应用本文方法计算了时域幂指数脉冲电流辐射在石墨烯界面上的反射和透射, 图 9(a), (b) 是 $t_r = 1 \text{ ps}$ 时的反射和透射时域波形, 图 10(a), (b) 分别是 $t_r = 5, 10 \text{ ps}$ 时的反射时域波形. 图 9 和图 10 中实线为本文方法计算结果, 实心圆点为文献 [23] 方法 (二维石墨烯面时域半解析格林函数方法) 的结果, 二者吻合非常好, 证明本文方法正确有效.

3.3 三维算例: 含石墨烯涂层无耗介质球的散射

设 x 方向极化的高斯脉冲沿 z 轴正向入射半径 $r_0 = 0.3 \text{ mm}$ 的非磁性无耗介质球, 球的相对介电系数 $\epsilon_r = 2.56$. 在球表面有单层石墨烯涂层, 石墨烯参数同 (23) 式.

采用本文方法计算了该球的后向散射, 如图 11(a) 中实线所示, 图中同时用虚线描述了无石墨烯涂层时该球的后向散射波形. 可以看到, 有石墨烯涂层时, 后向散射波形的第 1 个峰大大增强, 而且散射能量主要集中在前段, 而无涂层的球的散射能量在时间上要持续得更久, 能够在较长时间探测到散射.

利用时域散射波形可以得到该球的后向 RCS, 如图 11(b) 中实线所示, 图中小圆点表示该球后向 RCS 的 Mie 级数解析解 [24], 二者吻合很好, 也说明本文方法是正确有效的. 图中可见的 FDTD 和 Mie 级数结果的稍许差别是由于 FDTD 在剖分球体时, 球表面的台阶化近似导致, 此外在高频段又因为

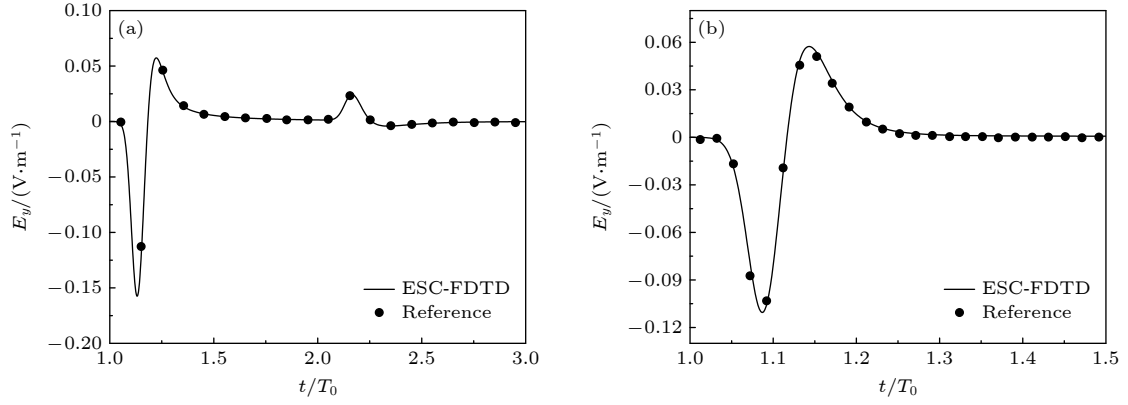


图 9 石墨烯面对线电流源激励的反射和透射 (a) 反射波形 ($T_0 = 10$ ps); (b) 透射波形 ($T_0 = 6.65$ ps)

Fig. 9. Transient electric field reflected and transmitted by a graphene sheet: (a) Reflection waveform ($T_0 = 10$ ps); (b) transmission waveform ($T_0 = 6.65$ ps).

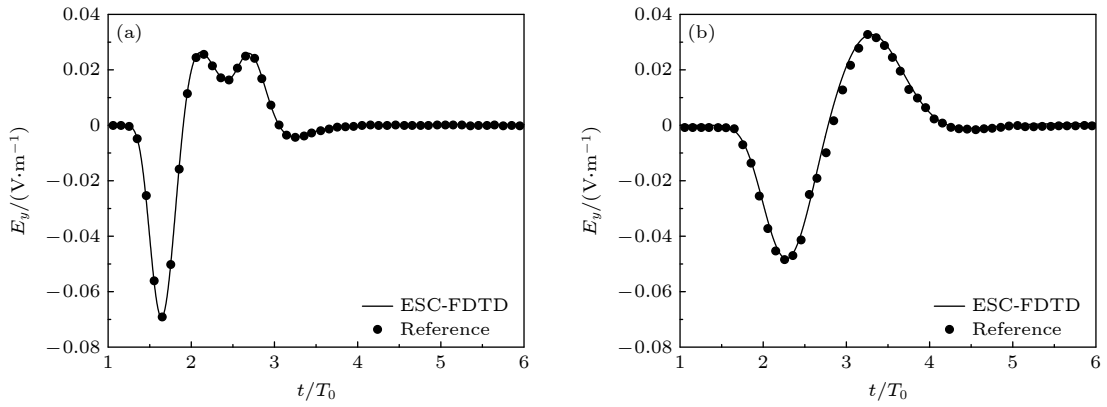


图 10 石墨烯面对线电流源激励的反射 ($T_0 = 6.65$ ps) (a) $t_r = 5$ ps; (b) $t_r = 10$ ps

Fig. 10. Transient electric field reflected by a graphene sheet ($T_0 = 6.65$ ps): (a) $t_r = 5$ ps; (b) $t_r = 10$ ps.

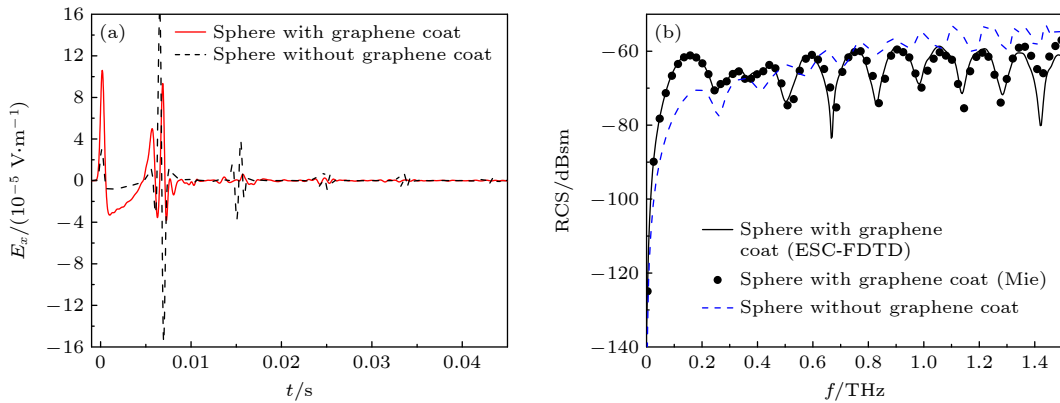


图 11 含石墨烯涂层介质球的后向散射 (a) 时域波形; (b) RCS

Fig. 11. Backscattering of a dielectric sphere with graphene coat: (a) Waveform in time-domain; (b) RCS.

FDTD 计算时采用的入射高斯信号在高频部分相对能量更弱, 使得数值误差变得明显. 图 11(b) 中虚线描述了无涂层时球的后向 RCS, 可以看到, 石墨烯涂层使得球的后向 RCS 在低频段增强, 而在高频段则略有下降.

4 结 论

应用 FDTD 方法处理含石墨烯的目标时, 由于石墨烯的厚度只有 0.34 nm, 如果应用均匀网格剖分, 石墨烯纵向网格尺度就小于 0.34 nm, 这样

一般的宏观目标就会包含大量的网格数, 非常耗费计算资源甚至无法进行; 若使用亚网格技术, 在石墨烯内部用细网格而其他空间部分为粗网格, 则又会使粗细网格比例极大, 例如本文最后一个算例, 若采用亚网格剖分, 粗细网格比将达到 10^4 — 10^5 , 在 FDTD 计算中很难保证稳定性甚至无法实现. 所以对于含有石墨烯的宏观目标, 在 FDTD 模型中将石墨烯看成“无限薄”的面结构具有物理上的合理性和数学上的简洁性. 鉴于石墨烯面结构在 FDTD 的体剖分方法中存在无法纵向离散化问题, 本文提出一种等效源电流方法, 使 FDTD 方法能够应用于含无限薄石墨烯界面目标的电磁特性分析. 该方法将石墨烯界面上的面电流等效为源体电流, 在界面处采用有源 Maxwell 方程, 通过引入中间变量并结合处理色散介质问题的 SO 算法, 得到石墨烯界面上切向电场的 FDTD 迭代计算式, 实现了含无限薄石墨烯界面目标的 FDTD 计算. 算例计算结果和解析解具有很高的吻合度, 充分表明了该方法的正确有效性. 本文所提出方法框架可推广应用于含面电流分布的“零厚度”色散界面 (金属膜、二维过渡金属硫化物等), 可以很便捷地对含导电色散界面结构的电磁特性进行数值分析.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsova A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Geim A K 2009 *Science* **324** 1530
- [3] Cheng Y X, Xu H, Yu H F, Huang L Q, Gu Z C, Chen Y F, He L H, Chen Z Q, Hou H L 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 067801 (in Chinese) [成昱轩, 许辉, 于鸿飞, 黄林琴, 谷志超, 陈玉峰, 贺龙辉, 陈智全, 侯海良 2025 物理学报 **74** 067801]
- [4] Liu J T, Huang J H, Xiao W B, Hu A R, Wang J H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 177202 (in Chinese) [刘江涛, 黄接辉, 肖文波, 胡爱荣, 王建辉 2012 物理学报 **61** 177202]
- [5] Liang S J, Sun S, Ang L K 2013 *Carbon* **61** 294
- [6] Song Y, Wu H C 2013 *J. Phys. Condens. Matter* **25** 355301
- [7] Eric S M, Luis E F F T 2012 *Phys. Rev. B* **86** 125449
- [8] Hu S N, Li D Q, Zhan J, Gao E D, Wang Q, Liu N L, Nie G Z 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 097801 (in Chinese) [胡树南, 李德琼, 詹杰, 高恩多, 王琦, 刘南柳, 聂国政 2025 物理学报 **74** 097801]
- [9] Kim H, Kim Y D, Wu T, Cao Q, Herman I P, Hone J, Guo J, Shepard K L 2022 *Sci. Adv.* **8** eabj1742
- [10] Pomar J L G, Alexey Y N, Luis M M 2013 *ACS Nano* **7** 4988
- [11] Limosani F, Tessore F, Forni A, Lembo A, Di Carlo G, Albanese C, Bellucci S, Tagliatesta P 2023 *Materials* **16** 5427
- [12] Fu M X, Zhang Y 2013 *J. Electron. Sci. Technol.* **11** 352
- [13] Rodriguez B S, Yan R, Kelly M M, Fang T, Tahy K, Hwang W S, Jena D, Liu L, Xing H G 2012 *Nat. Commun.* **3** 780
- [14] Zuo Z G, Wang P, Ling F R, Liu J S, Yao J Q 2013 *Chin. Phys. B* **22** 097304
- [15] 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]
- [16] Lovat G 2012 *IEEE Trans. Electromagn. Compat.* **54** 101
- [17] Ge D B, Yan Y B 2011 *Finite-Difference Time-Domain Method for Electromagnetic Waves* (3rd Ed.) (Xi'an: Xidian University Press) p13 (in Chinese) [葛德彪, 闫玉波 2011 电磁波时域有限差分法 (第三版) (西安: 西安电子科技大学出版社) 第 13 页]
- [18] Ge D B, Wu Y L, Zhu X Q 2003 *Chin. J. Radio Sci.* **18** 359. (in Chinese) [葛德彪, 吴跃丽, 朱湘琴 2003 电波科学学报 **18** 359]
- [19] Wei B, Ge D B, Wang F 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6290 (in Chinese) [魏兵, 葛德彪, 王飞 2008 物理学报 **57** 6290]
- [20] Wang F, Ge D B, Wei B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6356 (in Chinese) [魏兵, 葛德彪, 王飞 2009 物理学报 **58** 6356]
- [21] Li L Q, Shi Y X, Wang F, Wei B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 125201 [李林茜, 石雁祥, 王飞, 魏兵 2012 物理学报 **61** 125201]
- [22] Wang F, Wei B 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 244101 (in Chinese) [王飞, 魏兵 2019 物理学报 **68** 244101]
- [23] Giampiero L, Rodolfo A 2015 *IEEE Trans. Nanotechnol.* **14** 681
- [24] Zhuang W Z, Li R X, Liang J R, Jia Y J 2021 *Appl. Opt.* **60** 1903

FDTD method for analyzing electromagnetic properties of graphene interfaces with “infinitely thin” target^{*}

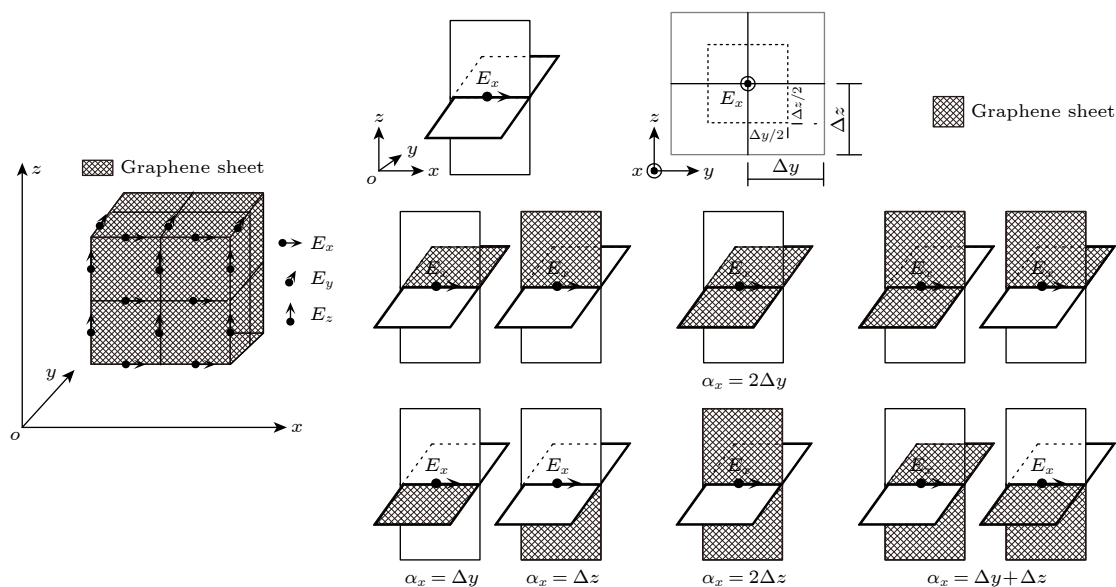
WANG Fei[†] WEI Bing LI Linqian

(School of Physics, Xidian University, Xi'an 710071, China)

(Received 13 October 2025; revised manuscript received 10 November 2025)

Abstract

Modeling targets with infinitely thin graphene sheets by using the finite-difference time-domain (FDTD) poses a challenge, arising from the presence of surface currents and the difficulty in implementing longitudinal discretization. When analyzing the electromagnetic properties of targets via the FDTD method, spatial discretization of the target is essential. In the case of macroscopic electromagnetic targets that combine “infinitely thin” graphene interfaces, this interface cannot be longitudinally partitioned. Moreover, a surface current exists at the interface, rendering the traditional calculation methods for the tangential electric field on the interface inapplicable. To address this issue, we put forward a novel equivalent source current (ESC) approach. The proposed method enables the graphene sheet to retain a two-dimensional structure and be positioned on the surface of the Yee cell during the spatial discretization of the FDTD method. Subsequently, the surface current on the graphene sheet is approximated as a source volume current. Then, the active Maxwell’s equations are discretized at the tangential electric-field nodes on the graphene surface, thereby obtaining a modified formula for the electric-field. By introducing intermediate variables and using the shift operator (SO) method, which is employed to handle the issues related to dispersive media and to process the correction formula, an FDTD iterative formula for calculating the tangential electric field at the graphene interface is derived. This ultimately enables the FDTD calculations for targets with “infinitely thin” graphene sheets. Excellent agreement between our FDTD results and analytical solutions in several numerical examples validates the proposed method. The methodological framework proposed in this study can be generalized and applied to the “zero-thickness” dispersive interfaces featuring surface current distributions, such as metallic films and two-dimensional transition metal sulfides. This enables convenient numerical analysis of the electromagnetic properties of structures that include conductive dispersive interfaces.



Keywords: graphene, finite-difference time-domain, electromagnetic property

DOI: [10.7498/aps.75.20251387](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251387)

CSTR: 32037.14.aps.75.20251387

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62371378, 62471352).

† Corresponding author. E-mail: wfei79@163.com

含“无限薄”石墨烯界面目标电磁特性分析的FDTD方法

王飞 魏兵 李林茜

FDTD method for analyzing electromagnetic properties of graphene interfaces with “infinitely thin” target

WANG Fei WEI Bing LI Linqian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 030402 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251387

CSTR: 32037.14.aps.75.20251387

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251387>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于石墨烯纳米条波导边耦合矩形腔的等离子体诱导透明效应

Plasmon induced transparency effect based on graphene nanoribbon waveguide side-coupled with rectangle cavities system

物理学报. 2022, 71(2): 024201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211397>

基于四盘形谐振腔耦合波导的三波段等离子体诱导透明效应

Three-band plasmon induced transparency effect based on four-disk resonator coupled waveguide system

物理学报. 2022, 71(24): 244201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221397>

悬浮石墨烯摩擦特性

Friction properties of suspended graphene

物理学报. 2021, 70(8): 086801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201796>

二维有限元方法研究石墨烯环中磁等离子激元

Study of magnetoplasmons in graphene rings with two-dimensional finite element method

物理学报. 2023, 72(8): 087301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222467>

氮掺杂对石墨烯摩擦学特性影响的分子动力学模拟

Effect of N-doping on tribological properties of graphene by molecular dynamics simulation

物理学报. 2022, 71(14): 146801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212309>

石墨烯的形貌特征对其场发射性能的影响

Influence of morphological characteristics of graphene on its field emission properties

物理学报. 2024, 73(8): 086101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231784>