ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи

ЧЕРЕПАНОВ ВЛАДИМИР ВЛАДИМИРОВИЧ

ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПЛАЗМОННЫХ УСТРОЙСТВ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА В ТГЦ И ИК ДИАПАЗОНЕ

1.3.4. Радиофизика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор Лерер А.М.

Ростов-на-Дону – 2023

СПИСОК УСЛОВНЫХ СОКРАЩЕНИЙ

ГТГ – генерация третьей гармоники

ДР – дифракционная решетка

ДРГ – дифракционная решетка на основе графена

ИГУ – импедансные граничные условия

ОИДУ – объемные интегро-дифференциальные уравнения

ППП – поверхностный плазмон-поляритон

ПП – поверхностный плазмон

ПСУ – парные сумматорные уравнения

СЛАУ – система линейных алгебраических уравнений

ТГ – третья гармоника

ЧВС – четырехволновое смешение

ЭМВ – электромагнитная волна

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность диссертационной работы. За последние два десятилетия наука и техника терагерцового (ТГц) диапазона частот значительно продвинулись вперед, и в настоящее время являются одними из самых исследуемых областей, поскольку имеют высокий потенциал практического применения. Намечен стремительный переход от научно – исследовательских работ к коммерческим приложениям.

Например, ТГц технологии открывают новые возможности для разработки безопасных неразрушающих систем дистанционного зондирования, спектроскопических систем, систем визуализации и других приложений с использованием периодических структур. Большая потребность наблюдается в телекоммуникационных системах, в которых объем передаваемых данных постоянно расчет. С этим связана необходимость перехода на сверхвысокие скорости обработки и использование материалов, способных работать на ТГц частотах и выше, где большинство обычных электронных материалов не работают. В технике сверхвысоких частот такими материалами являются благородные металлы и кремний, однако с ростом частоты их применение затруднительно из-за значительного увеличения потерь в проводящих линиях. Актуальна также тенденция перехода к полностью оптической обработке сигналов и использование технологий фотоники [1, 2]. Одним из наиболее перспективных материалов, способным работать на частотах от ТГц до оптики, является графен, который, как считают разработчики нового поколении сетей 6G, должен заменить кремниевую электронику.

Ключевыми преимуществами графена перед другими широко применяемыми материалами является высокая подвижность и «безмассовость» электронов, что приводит высокой проводимости на ТГц частотах. Отмечается, что графен обладает исключительно высокой нелинейностью, которая на сегодняшний день является самой сильной из всех электронных материалов. Проводимостью и, как следствие, нелинейностью графена можно легко управлять, прикладывая к материалу сравнительно невысокое внешнее электрическое поле, что невозможно в металлах. Помимо всего, графен способен поддерживать распространение вдоль поверхности сверхлокализованного поверхностного плазмон-поляритона (ППП) в ТГц и инфракрасном (ИК) диапазоне частот, увеличивая эффективность взаимодействия с внешним полем. Для возбуждения ППП широко применяются дифракционные решетки (ДР). При использовании ДР на основе графена (ДРГ) решаются сразу две задачи: ДРГ является замедляющей системой, обеспечивающей условие возбуждения ППП - равенство продольных составляющих волновых векторов падающей электромагнитной волны (ЭМВ) и поверхностного плазмона; элементы ДРГ являются резонаторами ППП. Таким образом, графен особо актуален в качестве функционального плазмонного материала с управляемыми свойствами для ДР, применяемых при разработке поглотителей [3 - 20], поляризаторов [21 - 27], преобразователей частот [28 - 30], модуляторов [31, 32], генераторов [33 - 36] и других устройств необходимых для развития нового поколения электроники.

Однако для графеновой электроники не работает принцип масштабируемости - проводимость графена обладает высокой частотной дисперсией и при моделировании необходимо подбирать параметры элементарной ячейки, проводя большой объем вычислений. Большинство работ, посвященным расчетам плазмонных устройств ТГц и ИК диапазонов на основе графена, использует коммерческие пакеты электродинамического моделирования, основанные на сеточном разбиении пространства дифракционной задачи (метод конечных элементов, метод конечных разностей во временной и частотной области). Их основное преимущество – универсальность, однако по мере увеличения количества элементов ДР и слоев элементарной ячейки значительно возрастают требования к вычислительной мощности компьютера и время счета. Также требуется учет нелинейности материалов в задачах исследования генерации гармонических составляющих и смешения ЭМВ.

Поэтому **актуальной** задачей является разработка численно-аналитических методов расчета, которые:

- позволяют исследовать процесс рассеяния ЭМВ в линейном режиме, эффект генерации на частоте третьей гармоники (ТГ) и комбинационных частотах в задаче смешения двух ЭМВ;

- предоставляют возможность моделирования новых линейных и нелинейных плазмонных устройств ТГц и ИК диапазона;

- являются универсальными и учитывают особенности распределения поля вблизи неоднородностей (металлических, графеновых, плазмонных материалов);

- сокращают время счета для сложных многослойных конфигураций ДРГ и позволяют проводить верификацию расчетов, выполненных другими методами.

Предметом исследования являются одномерные и двумерно-периодические многослойные ДР графеновых лент квадратной и прямоугольной формы, в том числе содержащие сплошные графеновые слои.

Целью диссертационной работы является теоретическое исследование процессов взаимодействия ЭМВ ТГц и ИК диапазона с бесконечными одномерными и двумерно-периодическими многослойными ДРГ в линейном и нелинейном режимах для моделирования плазмонных частотно-селективных поверхностей, поглотителей, генераторов ТГ и преобразователей частот.

Для достижения цели **поставлены задачи**:

- разработать и численно реализовать математические модели решения линейной и нелинейной задачи дифракции при падении одной и двух ЭМВ на ДРГ;
- исследовать радиофизические характеристики ДРГ в линейном и нелинейном режимах;

- определить способы усиления взаимодействия ЭМВ с ДРГ и увеличения генерируемой мощности на частоте ТГ и комбинационных частотах.

Научная новизна диссертационного исследования состоит в следующем**.**

1. Разработана новая математическая модель решения линейной задачи дифракции ЭМВ на одномерных и двумерно-периодических ДРГ, основанная на применении импедансных граничных условий (ИГУ) и базиса, учитывающего особенности распределения тока в тонких плазмонных лентах.

2. Получены новые результаты расчетов линейных спектров рассеяния ЭМВ в диапазоне частот от ТГц до ИК. Продемонстрирована возможность использования ДРГ в качестве широкополосных ТГц поглотители с угловой нечувствительностью в широком диапазоне углов падения ЭМВ.

3. Разработана новая математическая модель решения нелинейной задачи дифракции, основанная на методе возмущения.

4. Получены новые результаты расчетов нелинейных спектров генерации на частоте ТГ и комбинационных частотах в задаче смешения двух ЭМВ в ТГц и ИК диапазоне. Продемонстрирована возможность использования ДРГ в качестве генераторов третьей гармоники, источников и систем визуализации ТГц волн, преобразователей частот ТГц и ИК диапазонов.

5. Исследовано влияние параметров ДРГ на линейную и нелинейную дифракцию и предложены механизмы усиления взаимодействия ЭМВ с ДР и увеличения генерируемой мощности на частоте ТГ и комбинационных частотах.

Основные положения и результаты, выносимые на защиту:

1. Математическая модель решения линейной и нелинейной задачи дифракции ЭМВ для теоретического исследования радиофизических параметров бесконечных многослойных одномерных и двумерно-периодических дифракционных решеток на основе графена в ТГц и ИК диапазоне - линейных коэффициентов рассеяния падающей ЭМВ, уровня генерируемой мощности на

частоте третьей гармоники и комбинационных частотах в задаче смешения двух ЭМВ.

2. Эффект усиления линейного и нелинейного взаимодействия ЭМВ с дифракционной решеткой на резонансных частотах основной и высших мод поверхностных плазмон-поляритонов, который проявляется в увеличении коэффициента поглощения падающего поля и уровня генерации на частоте третьей гармоники и комбинационных частотах.

3. Методы усиления взаимодействия ЭМВ с дифракционной решеткой и увеличения уровня генерируемой мощности в нелинейном режиме:

- увеличение количества графеновых лент и сплошных слоев в пределах одной элементарной ячейки;

- использование эффекта стоячих волн в диэлектрических разделительных слоях;

- применение металлических и многослойных диэлектрических зеркал.

4. Результаты моделирования плазмонных устройств на основе графена в ТГц и ИК диапазоне: поглотителей, генераторов третьей гармоники и преобразователей частот с повышением и понижением частоты.

Практическая значимость. Разработанные математические модели численно реализованы в среде MS Visual Studio и позволяют моделировать процессы линейной и нелинейной дифракции ЭМВ ТГц и ИК диапазона на бесконечных решетках прямоугольной формы, содержащих графен и другие плазмонные материалы. Ключевым преимуществом разработанных программ является возможность быстрого расчета (в сравнении с коммерческими пакетами на основе сеточного разбиения пространства электродинамической задачи) параметров ДР с больших количеством элементов и слоев:

- линейных спектров рассеяния ЭМВ для разработки поглотителей и поляризаторов,

- нелинейных спектров генерации на частоте третьей гармоники и на комбинационных частотах для разработки генераторов ТГ и преобразователей частот (смесителей, устройств визуализации ТГц излучения, генераторов ТГц волн, модуляторов).

Улучшены характеристики перечисленных устройств за счет:

- выбора рабочей частоты возле резонанса ППП основной и высших мод;

- увеличения количества слоев графен – диэлектрик;

- оптимизации толщины разделительных диэлектриков и использования эффекта стоячих волн;

- применения металлических и многослойных диэлектрических зеркал (МЗ и ДЗ).

Результаты исследований использованы при выполнении государственного задания в сфере научной деятельности научного проекта № (0852-2020-0032)/(БАЗ0110/20-3-07ИФ) «Экологически чистые материалы для инновационных мультифункциональных систем: от цифрового дизайна к производственным технологиям».

Обоснованность и достоверность результатов, полученных в диссертации, заключаются в строгой постановке электродинамической задачи, а также верификацией результатов расчета в линейном режиме с использованием ИГУ сравнением с методом на основе объемных интегро-дифференциальных уравнений (ОИДУ) для двумерного и одномерного случаев ДРГ. Для нелинейной дифракции приведена оценка погрешности метода возмущения.

Личный вклад автора. В ходе диссертационного исследования автором выполнены все представленные теоретические исследования многослойных ДРГ. На их основе проведен анализ полученных результатов, выявлены закономерности влияния параметров ДРГ на линейные и нелинейные спектры и предложены способы усиления взаимодействия ЭМВ с ДРГ и увеличения генерируемой мощности на частоте ТГ и комбинационных частотах. Автор принимал непосредственное участие в создании и модификации существующих программ для расчета характеристик ДРГ в нелинейном режиме.

Диссертационная работа соответствует паспорту специальности 1.3.4 Радиофизика в результате проведенных исследований общефизического характера в следующих областях:

1. «Разработка физических основ генерации, усиления и преобразования колебаний и волн различной природы (электромагнитных, акустических, плазменных, механических), а также автоволн в неравновесных химических и биологических системах. Поиски путей создания высокоэффективных источников когерентного излучения миллиметрового, субмиллиметрового и оптического диапазонов, техническое освоение новых диапазонов частот и мощностей». В диссертационной работе исследуются процессы генерации и преобразования колебаний и волн с целью разработки новых высокоэффективных источников когерентного излучения ТГц и ИК диапазона.

2. «Изучение линейных и нелинейных процессов излучения, распространения, дифракции, рассеяния, взаимодействия и трансформации волн в естественных и искусственных средах». В диссертационной работе изучаются как линейные, так и нелинейные процессы рассеяния и взаимодействия волн в таких искусственных средах как многослойная дифракционная решетка графеновых лент с разделительными диэлектрическими слоями.

Апробация работы. Результаты диссертационного исследования были представлены и обсуждались на конференциях:

- «52nd European Microwave Conference (EuMC)», Milan, Italy, 2022;
- «8th All-Russian Microwave Conference (RMC)», Moscow, Russia, 2022;
- «2022 7th All-Russian Microwave Conference (RMC)», Moscow, Russia, 2022;
- «2022 International Conference on Actual Problems of Electron Devices Engineering (APEDE)», Saratov, Russia, 2022;
- 5th European Conference on Electrical Engineering & Computer Science (ELECS 2021) Bern, Switzerland, 2021;
- «Progress in Electromagnetics Research Symposium (PIERS)», Hangzhou, China, 2021;

- «XXV Annual Conference Saratov Fall Meeting 2021; and IX Symposium on Optics and Biophotonics», Saratov, 2021;
- «Radiation and Scattering of Electromagnetic Waves RSEMW», Divnomorskoe, Russia, 2021;
- «2020 International Conference on Actual Problems of Electron Devices Engineering (APEDE)», Saratov, Russia, 2020;
- «2020 7th All-Russian Microwave Conference (RMC)», Moscow, Russia, 2020;
- «Saratov Fall Meeting SFM'20, VIII SYMPOSIUM ON OPTICS & BIOPHOTONICS», Saratov, Russia, 2020;
- «Математическое и компьютерное моделирование естественнонаучных и социальных проблем», Пенза, Россия, 2022;
- «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование эко-систем", Ростов-на-Дону, Россия, 2022;
- «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование эко-систем", Ростов-на-Дону, Россия, 2021;
- «Математическое и компьютерное моделирование естественно-научных и социальных проблем», Пенза, Россия, 2021;
- «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование эко-систем", Ростов-на-Дону, Россия, 2020;
- «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» Севастополь, Россия, 2020;

«Аналитические и численные методы моделирования естественно-научных и социальных проблем», Пенза, Россия, 2020.

Публикации. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 24 научных работах: 5 работ в журналах из перечня ВАК, 19 работ в сборнике докладов всероссийских и международных конференций. Из них 14 индексированы в Scopus.

Структура диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Работа содержит 149 страниц, 78 рисунка, 2 таблицы и список литературы из 150 наименований.

Во введении обоснована актуальность темы исследования, представлены цели и задачи диссертации, практическая значимость и новизна работы. На основании проведенных исследований сформулированы основные положения и результаты, выносимые на защиту.

В первой главе рассматриваются оптические свойства графена, приводятся формулы для расчета проводимости в линейном и нелинейном режиме. Показаны условия существования ППП и проведен обзор плазмонных устройств на основе графена.

Во второй главе решена линейная и нелинейная задача дифракции. Проведена верификация расчетов в линейном режиме и оценка погрешности метода возмущения.

В третьей главе представлены результаты исследования спектров рассеяния в линейном и нелинейном режиме для моделирования плазмонных устройств на основе графена в ТГц и ИК диапазоне. Выявлены способы управления радиофизическими параметрами и методы повышения эффективности ДРГ.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы.

ГЛАВА 1. ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНА

Настоящая глава посвящена исследованию оптических свойств графена в линейном и нелинейном режимах в диапазоне от ТГц до оптики. Показано, что свойствами графена можно управлять перестройкой химического потенциала. Рассмотрены условия, в которых возможно существование поверхностных плазмон-поляритонов (ППП) на границе раздела графен-диэлектрик. Для легированного графена эта область может простираться вплоть ближнего ИК. Поскольку графен является двумерным материалом, то для описания его характеристик используется поверхностную проводимость. В линейном режиме свойства материала определяются поверхностной проводимостью в интегральной формулировке Кубо либо ее приближениями. Приводится выражение для проводимости в магнитном поле. При высоких интенсивностях источника поля, графен демонстрирует нелинейный отклик, который может проявляться в генерации гармоник высших порядков, частотном смешении и других нелинейных процессах. Рассмотрены существующие теоретические модели нелинейной поверхностной проводимости графена и обозначены условия их применимости. Проведен обзор существующих актуальных работ по плазмонным устройствам на основе ДРГ.

1.1 Линейная проводимость графена

Графен представляет собой двумерный материал с гексагональной решеткой и рассматривается как полуметалл. Электроны в графене ведут себя как безмассовые дираковские фермионы и обладают высокой подвижностью даже при высоких концентрациях носителей в широком диапазоне ненулевых температур [37].Однако значения подвижности зависят от метода изготовления и варьируется в среднем от 1000 см^2/Вс для химического осаждения из паровой фазы и до 100 м^2/Вс для взвешенных образцов [38].

Благодаря нулевой запрещенной зоне графен может эффективно взаимодействовать с ЭМВ в диапазоне от ТГц до оптики. При видимом цвете выглядит черным, однако благодаря одноатомной толщине пропускает до 97.7 % падающего света. Также стоит отметить его высокую теплопроводность и гибкость.

Как правило, для описания оптических свойств 2D графена используют поверхностную проводимость в интегральной формулировке Кубо. Для легированного графена при ненулевой температуре [39]

$$\sigma^{(1)}\left(\omega,\mu_c,\tau,T\right)=\frac{ie^2\left(\omega-i\tau^{-1}\right)}{\pi\hbar^2}\left[\begin{array}{r}\dfrac{1}{\left(\omega-i\tau^{-1}\right)^2}\displaystyle\int_0^\infty E\left(\frac{\partial f(E)}{\partial E}-\frac{\partial f(-E)}{\partial E}\right)dE-\\ -\displaystyle\int_0^\infty\frac{f(-E)-f(E)}{\left(\omega-i\tau^{-1}\right)^2-4(E/\hbar)^2}dE\end{array}\right],\qquad(1.1)$$

где $f(E)=\left(1+\exp\left[(E-\mu_c)/k_bT\right]\right)^{-1}$, $\tau=u\mu_c\,/\,eV_F^2$ - время релаксации (параметр рассеяния) графена, u – подвижность носителей, e - заряд электрона, μ_c - химический потенциал графена, T – температура, k_b – постоянная Больцмана, V_F - скорость Ферми, ω - частота падающей волны, $\hbar$ – приведенная постоянная Планка. Индекс (1) означает, что рассматривается линейный случай, т.е. $\vec{j}=\sigma^{(1)}\vec{E}$. Так же используются различные аппроксимации (1.1), например [40]

$$\sigma^{(1)}\left(\omega,\mu_c,\tau\right)=\frac{ie^2\mu_c}{\pi\hbar^2\left(\omega+i\tau^{-1}\right)}+\frac{e^2}{4\hbar^2}\left[\theta(\hbar\omega-2\mu_c)+\frac{i}{\pi}\log\left|\frac{\hbar\omega-2\mu_c}{\hbar\omega+2\mu_c}\right|\right],\qquad(1.2)$$

где θ - функция Хэвисайда. Из графиков на рис. 1.1а,б видно, что различие (1.1) и (1.2) имеется лишь при приближении энергии фотонов $\hbar\omega$ падающей ЭМВ к пороговому значению $2\mu_c$ ($f\sim 97$ ТГц). В нижнем (ТГц) диапазоне частот мнимая часть проводимости значительно меньше действительной, однако с ростом частоты потери значительно растут (рис. 1.1в). Параметры графена T = 300 K, μ_c = 0.2 эВ, τ = 1 пс.

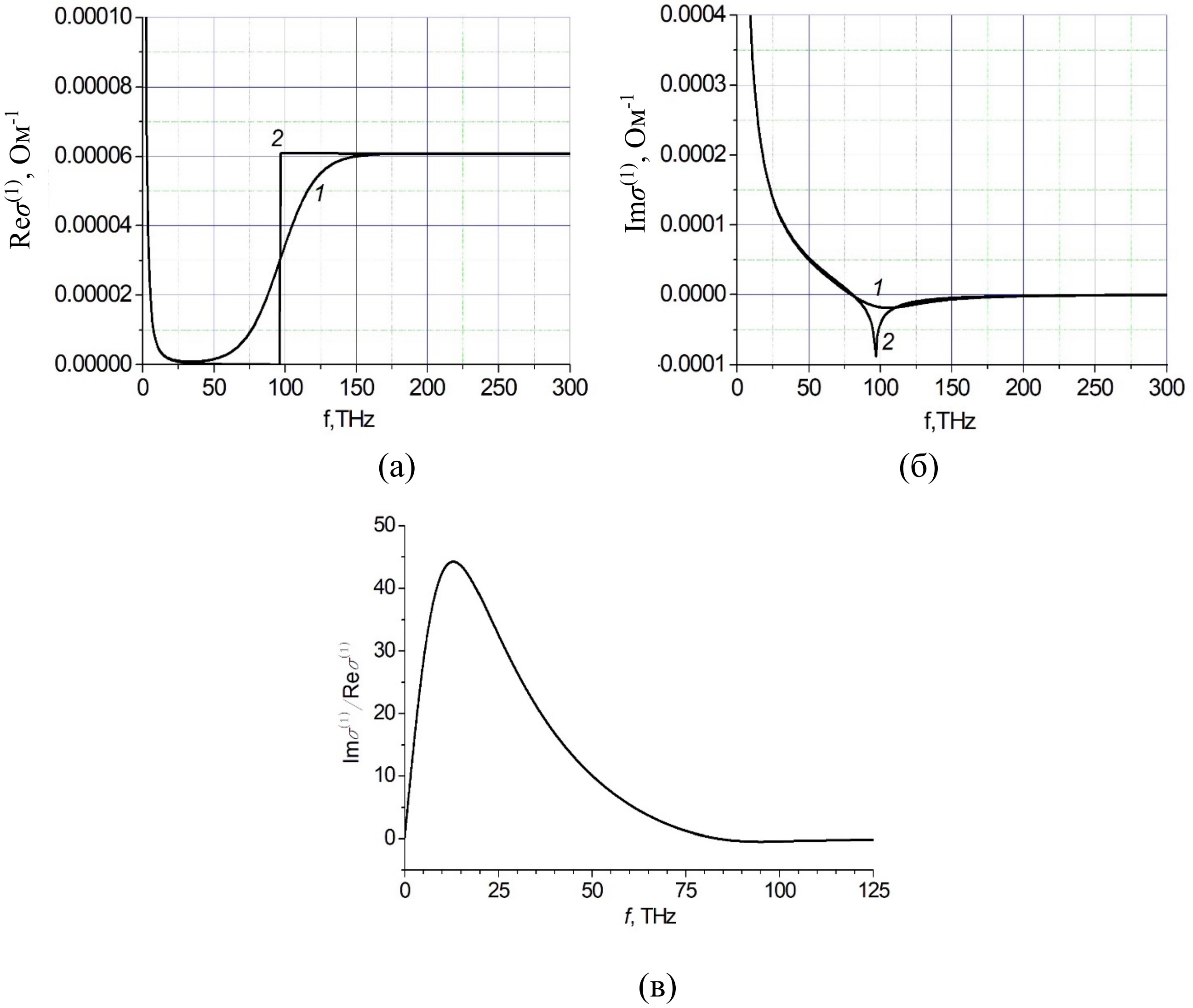
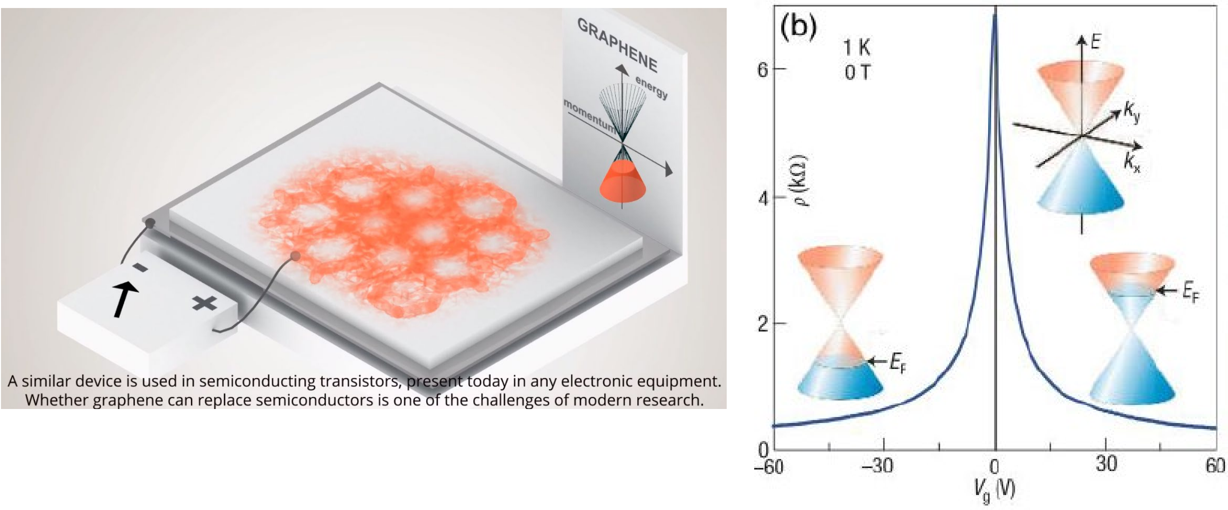


Рис. 1.1. (*1*) Проводимость графена по формуле Кубо (1.1) и (*2*) ее приближению (1.2). (а) $\mathrm{Re}\,\sigma^{(1)}$, (б) $\mathrm{Im}\,\sigma^{(1)}$, (в) $\mathrm{Im}\,\sigma^{(1)} / \mathrm{Re}\,\sigma^{(1)}$ по (1.1).

Наиболее важным свойством графена является возможность управления концентрации носителей $n = \mu_c^2 / \pi \hbar^2 V_F^2$ (отсюда и проводимостью) путем изменения химического потенциала μ_c, (энергии Ферми E_F, $\mu_c \approx E_F$ при $k_b T << |\mu_c|$). Изменение μ_c можно осуществлять химическим легированием или внешним электрическим полем (что невозможно или неэффективно в металлах). Такого рода контроль над электрическими и оптическими свойствами материалов лежит в основе современной электроники. Более удобным является электронное управление приложением внешнего электрического поля смещения (рис. 1.2а). Скорость такой электрической настройки очень высока - от МГц [41, 42] до ГГц [43], с большим динамическим диапазоном и глубиной.



(а) (б)

Рис. 1.2. Эффект амбиполярного электрического поля в графене [44], [37].

Для умеренно легированного графена ($k_bT<<|\mu_c|$) химический потенциал графена связан с управляющим напряжением V_g между графеном электродом (рис. 1.2а) как [45]

$$\mu_c = \hbar V_F \sqrt{\pi C V_g / e}$$

где $C = \varepsilon_0 \varepsilon_d / t$ - электростатическая емкость на единицу площади, ε_d и t - диэлектрическая проницаемость и толщина слоя диэлектрика, разделяющего нижний электрод и слой графена. В большинстве случаев значение химического потенциала ограничено диапазоном -1…1 эВ во избежание пробоя диэлектрика полем V_g [46]. Приложение положительного (отрицательно) напряжения индуцирует электронную (дырочную) проводимость графена [37] (рис. 1.2б).

На рисунке 1.3 представлены графики частотной зависимости проводимости диапазона 0.2…0.8 эВ химического потенциала μ_c графена. Значения нормированы на оптическую постоянную $\sigma_0 = e^2 / 4\hbar$. Увеличение μ_c приводит к значительному изменению как действительной, так и мнимой части проводимости в области ТГц-ИК частот.

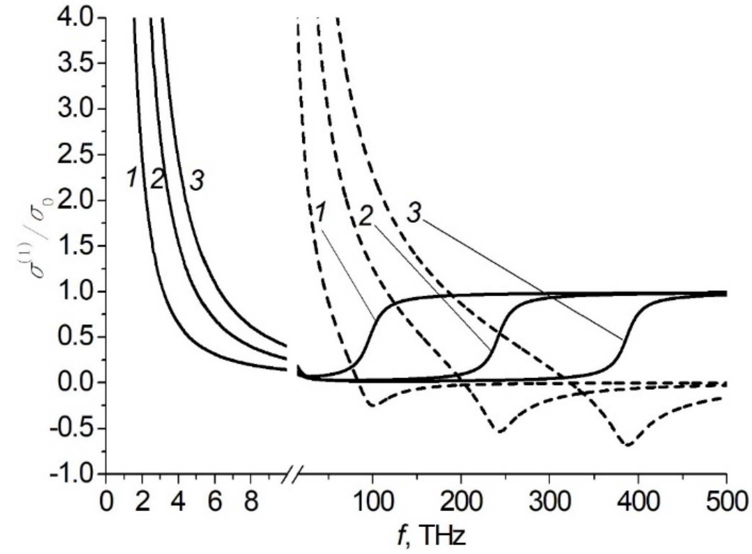


Рис. 1.3. Управляемость проводимости графена химическим потенциалом: сплошные – Re $\sigma^{(1)}/\sigma_0$, штриховые – Im $\sigma^{(1)}/\sigma_0$. Кривые (*1*) $\mu_c = 0.2$ эВ, (*2*) 0.5 эВ, (*3*) 0.8 эВ.

Проводимость графена обусловлена двумя принципиально разными механизмами электронно-дырочного возбуждения. В выражении (1.2) можно выделить два слагаемых

$$\sigma^{(1)} = \sigma^{(1)}_{intra} + \sigma^{(1)}_{inter},$$

где первое соответствует внутризонной

$$\sigma^{(1)}_{intra} = \frac{e^2}{4\hbar^2}\left[\theta(\hbar\omega - 2\mu_c) + \frac{i}{\pi}\log\left|\frac{\hbar\omega - 2\mu_c}{\hbar\omega + 2\mu_c}\right|\right],$$

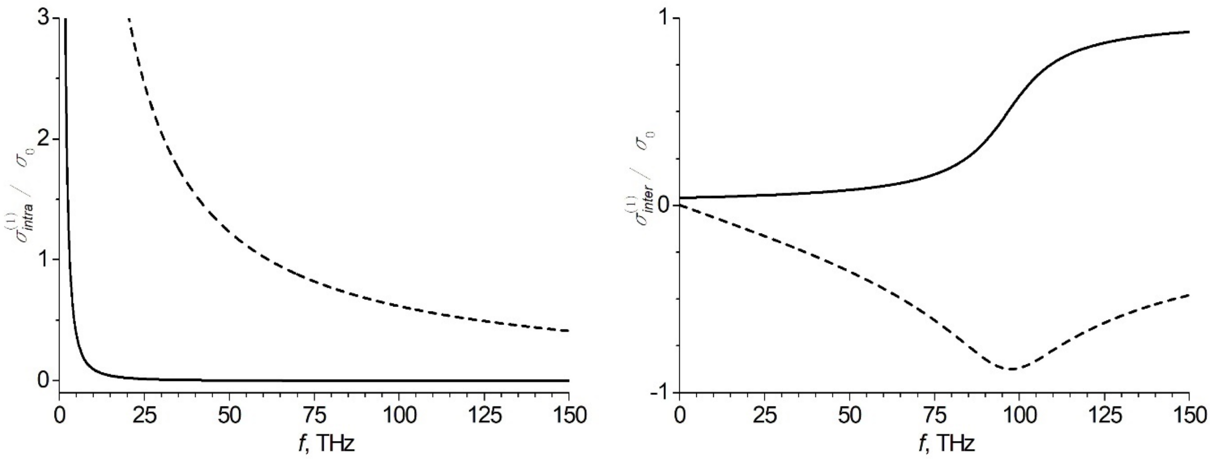
второе - межзонной проводимости

$$\sigma^{(1)}_{inter} = \frac{ie^2\mu_c}{\pi\hbar^2\left(\omega + i\tau^{-1}\right)}.$$

Для нелегированного графена существует только один вид электронно-дырочного возбуждения (межзонный переход), в то время как для легированного графена уровень Ферми будет находиться вдали от точки Дирака, что взывает другой вид электронно-дырочного возбуждения - внутризонный переход.

Межзонная проводимость обусловлена переходами носителей из валентной в зону проводимости, когда энергия фотонов падающего поля превышает $2\mu_c$ ($\hbar\omega \geq 2\mu_c$). При этом $\sigma^{(1)}_{inter}$ (рис. 1.4б) имеет основной вклад. При значительном росте частоты ($\hbar\omega \gg 2\mu_c$) проводимость становится чисто действительной и стремится к оптической постоянной $\sigma_0 = e^2/4\hbar$ (сплошная кривая рис. 1.4б и 1.5б).

Для низких энергий фотонов ($\hbar\omega < 2\mu_c$, ТГц-ИК частоты или высоких значений μ_c) преобладает вклад внутризонной проводимости $\sigma_{intra}^{(1)}$ (рис. 1.4а).



(а) (б)

Рис. 1.4. Проводимость графена в ТГц-ИК диапазоне: сплошные кривые - Re, штриховые – Im. (а) $\sigma_{intra}^{(1)} / \sigma_0$, (б) $\sigma_{inter}^{(1)} / \sigma_0$.

Как видно из графика на рис. 1.5 в ТГц диапазоне с ростом химического потенциала наблюдается значительное увеличение мнимой части проводимости (рис. 1.5а). С ростом частоты, когда энергия фотонов фотонов $\hbar\omega$ порядка $2\mu_c$ происходит скачок действительной и мнимой части, обусловленный резонансными явлениями (рис. 1.5б).

Проводимость графена зависит также от температуры. На рис. 1.6 представлены графики частотной зависимости проводимости при различных температурах графена. Наибольший температурный эффект заметен в области резонансов $\hbar\omega \sim 2\mu_c$. При повышении температуры скачкообразное (резонансное) поведение действительной (мнимой) части проводимости становится слабо выраженным.

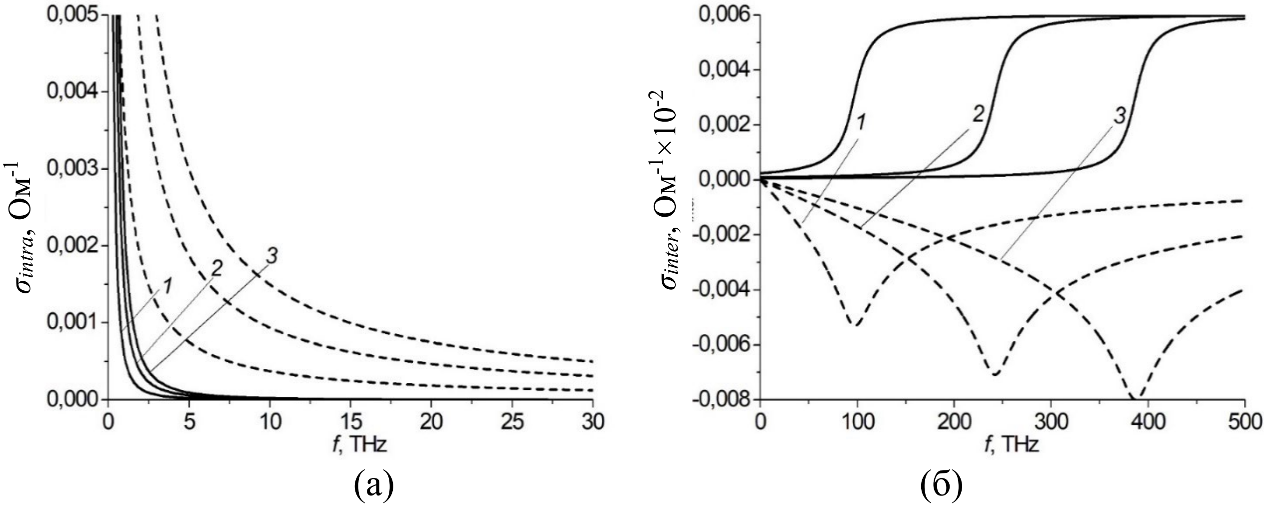


Рис. 1.5. Управляемость (а) внутризонной $\sigma_{intra}^{(1)}$ и (б) межзонной $\sigma_{inter}^{(1)}$ проводимости графена химическим потенциалом: сплошные - Re, штриховые – Im. Кривые (*1*) – μ_c = 0.2 эВ, (*2*) – 0.5 эВ, (*3*) – 0.8 эВ.

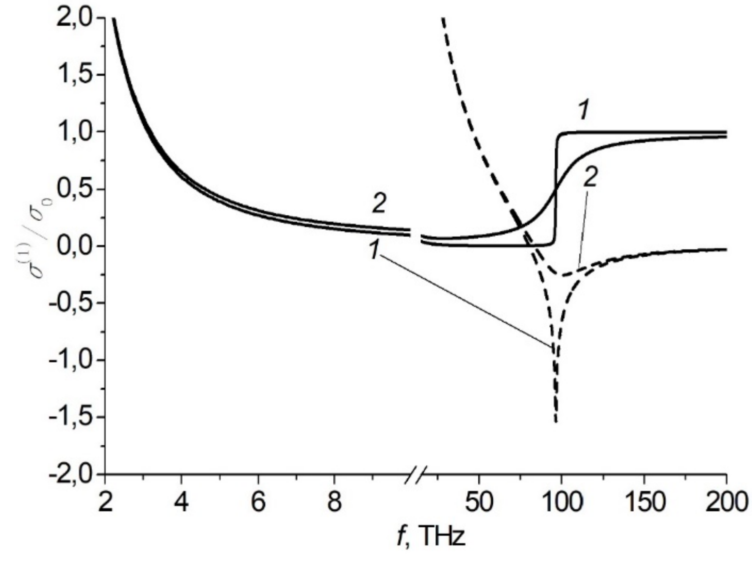


Рис. 1.6. Влияние температуры на проводимость графена: сплошные – Re$\sigma^{(1)}/\sigma_0$, штриховые – Im $\sigma^{(1)}/\sigma_0$. Кривые (*1*) – T = 5 K, (*2*) – 300 K, μ_c = 0.2 эВ, τ = 1 пс.

Для графена вводится также параметра рассеяния носителей заряда, поскольку в реальном веществе часто имеются примеси, шероховатости на поверхности, что приводит к снижению подвижности носителей и влияет на проводимость графена. Параметр рассеяния графена (время релаксации) определяется как

$$\tau = \frac{u\mu_c}{eV_F^2},$$

где u – подвижность носителей, e - заряд электрона, μ_c - химический потенциал, V_F - скорость Ферми. На рис. 1.7 представлена частотная зависимость нормированной поверхностной проводимости на ТГц частотах характерных значений τ ~ 0.5…1 пс в этом диапазоне. Наибольшее влияние рассеяние проявляется в том случае, когда время релаксации порядка периода падающей ЭМВ и с ростом частоты им можно пренебречь ($f > 0.5$ ТГц).

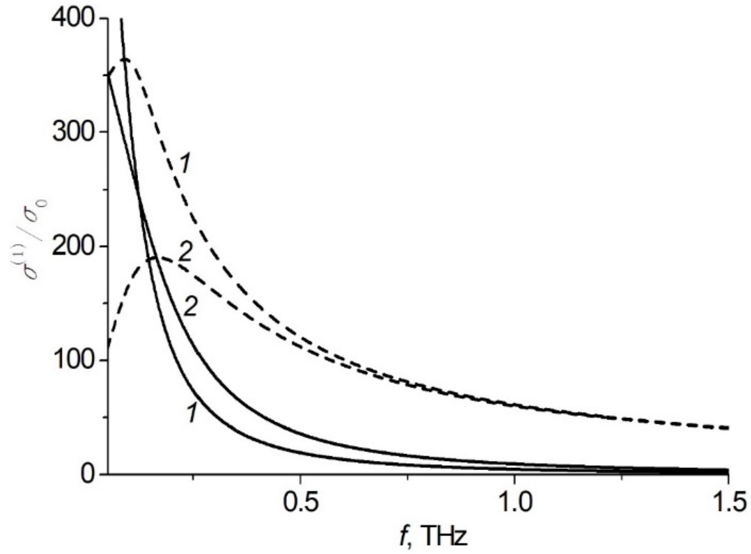


Рис. 1.7. Влияние рассеяния носителей на проводимость графена в ТГц диапазоне: сплошные – Re $\sigma^{(1)}/\sigma_0$, штриховые – Im$\sigma^{(1)}/\sigma_0$. Кривые (*1*) – τ = 0.5 пс, (*2*) – 1 пс, $T = 300$ K, $\mu_c = 0.2$ эВ.

Поверхностная проводимость графена в магнитном поле - анизотропная [47]

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix}, \tag{1.3}$$

где $\sigma_{xx} = -\frac{2D}{\pi} i \frac{\omega + i/\tau}{\omega_B^2 - \left(\omega + i/\tau\right)^2}$, $\sigma_{xy} = -\frac{2D}{\pi} \frac{\omega_B}{\omega_B^2 - \left(\omega + i/\tau\right)^2}$, τ - время релаксации, $D = \frac{2\sigma_0 \mu_c}{\hbar}$, $\sigma_0 = 6.08 \times 10^{-5}$ С, μ_c - химический потенциал графена, $\hbar$ - приведенная постоянная Планка, $\omega_B = \frac{eBv_F^2}{\mu_c}$ - циклотронная частота, $v_F = 10^6$ м/с - скорость Ферми, B - магнитная индукция. В рамках данной диссертации свойства графена в магнитном поле подробно не исследуются и выражение (1.3) применяется при верификации результатов расчета в главе 2.

1.2 Поверхностные плазмоны

Известно, что структуры, поддерживающие существование поверхностных плазмонов (ПП) широко применяются в оптике, фотонике для создания высокоэффективных устройств оптической спектроскопии, биосенсорики, нелинейной оптики и других применений. Благодаря высокой локализации ПП и эффекта усиления ближнего поля удается значительно усилить взаимодействие внешнего поля с устройством, что может быть весьма полезным при разработке устройств на основе графена, однако необходимо определить условия их существования.

1.2.1 Плазмоны в металле

ПП впервые наблюдались и исследовались на металл-диэлектрических структурах [48, 49], а в качестве наиболее подходящего плазмонного материала выступали благородные металлы, поскольку были популярны благодаря своей высокой проводимости. Основная особенность ПП заключается в том, что они могут существовать только в области непрозрачности материала (при отрицательной действительной части диэлектрической проницаемости) и существуют вблизи граница раздела, т.е. сильно локализованы [50]. Благодаря высокой локализации поля, ПП позволяют получить значительное усиление напряженности поля падающей ЭМВ в этой области (до 10^2–10^3 раз) [51].

При использовании уравнений Максвелла и граничных условий для компонент поля, можно получить дисперсионные соотношения для продольной $k_{ПП}^{\parallel}$ и поперечной $k_{ПП}^{\perp}$ компонент волнового вектора ПП [52]:

$$k_{ПП}^{\parallel} = k_0\sqrt{\frac{\varepsilon_m(\omega)\varepsilon_d(\omega)}{\varepsilon_m(\omega)+\varepsilon_d(\omega)}},\ k_{ПП,j}^{\perp} = k_0\sqrt{\frac{\varepsilon_j^2(\omega)}{\varepsilon_m(\omega)+\varepsilon_d(\omega)}},\ j = m,d \qquad (1.4)$$

где ε_m, ε_d – диэлектрические проницаемости металла и диэлектрика, k_0 – волновое число ПП в вакууме. Из (1.4) понятно, что для распространения ПП вдоль границы раздела необходимо, чтобы продольная компонента $k_{ПП}^{\parallel}$ была действительной (хотя, на самом деле, в реальности имеется мнимая часть, о чем будет сказано ниже). С другой стороны, ограничение поля (затухание) в направлении, перпендикулярном к границе раздела сред может быть достигнуто лишь для чисто мнимой нормальной компоненты волнового вектора $k_{ПП}^{\perp}$. Одновременное выполнение этих двух условий возможно, если

$$\begin{cases} \varepsilon_m(\omega)\varepsilon_d(\omega) < 0, \\ \varepsilon_m(\omega)+\varepsilon_d(\omega) < 0. \end{cases}$$

Таким образом, необходимо чтобы диэлектрическая проницаемость одного из материалов была отрицательная и по модулю превосходила другую. Диэлектрическая проницаемость металлов на оптических частотах в соответствии с дисперсионной моделью Друде определяется как

$$\varepsilon_m(\omega) = 1 - \frac{\omega_{пл}^2}{\omega^2 + i\omega/\tau}, \qquad (1.5)$$

где $\omega_{пл} = \sqrt{ne^2/\varepsilon_0 m}$ – плазменная частота свободных электронов, τ – время релаксации; e, m, n – заряд, масса и число электронов в единице объема. У хороших проводников (Ag, Au, Pt, Al, Cu) плазменная частота находится в ультрафиолетовой области спектра. Выражение (1.5) становится отрицательным на частотах $\omega < \omega_{пл}$. С учетом (1.4) получим условие распространения ПП на границе металл-диэлектрик (без учета рассеяния)

$$\omega < \frac{\omega_{пл}}{\sqrt{\varepsilon_d + 1}}.$$

ПП могут возбуждаться или соединяться с различными квантованными энергиями - фотонами, электронами и фононами [50]. При особых условиях взаимодействия ПП с фотонами падающей ЭМВ могут возникать составными квазичастицы, называемые поверхностные плазмон-поляритоны (ППП).

Как видно из рисунка 1.8, при одинаковой частоте волновой вектор ПП больше, чем у фотона в вакууме, откуда следует, что для возбуждения ППП требуется пересечение дисперсионных кривых света (фотонов) и ПП - необходимо добиться равенства продольных составляющих волновых векторов. Поэтому требуется применение особых схем, одной из которых является дифракционная решетка, с помощью которых можно как возбуждать, так и детектировать ППП [53]. При варьировании угла падения, либо периода дифракционной решетки можно добиться равенства продольных составляющих волновых векторов падающей ЭМВ и ПП.

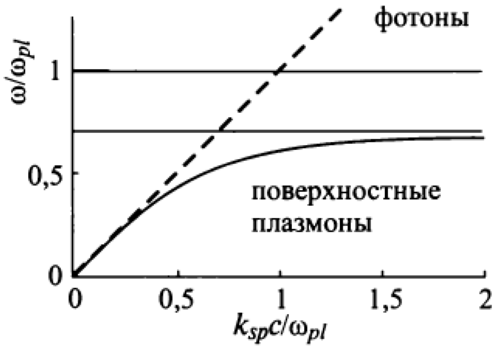


Рис. 1.8. Закон дисперсии плазмонных колебаний. Сплошная кривая - в структуре металл-диэлектрик, штриховая - дисперсия света [54].

До недавнего времени такие металлы как Au, Ag, Cu, Cr, Al, Mg считались лучшими плазмонными материалами, однако они имеют большие потери (омические и потери на излучение) и их плазменная частота находится в УФ диапазоне длин волн. Поэтому применение перечисленных металлов в ТГц и ИК диапазонах в качестве плазмонных материалов затруднительно. Одним из претендентов на роль лучшего плазмонного материала в этом диапазоне частот может стать графен.

1.2.2 Плазмоны в графене

Рассмотрим условия, при которых на границе раздела графен-диэлектрик могут существовать ППП. Электронная плотность графена и, следовательно, его плазменная частота намного ниже, чем у объемных благородных металлов, следовательно графен способен поддерживать ППП на более низких по сравнению с металлами частотах - в ИК диапазоне и даже на ТГц. Благодаря 2D природе, ППП, возбуждаемые в графене, ограничены еще сильнее, чем в обычных благородных металлах. Как и для металла, из уравнений Максвелла и граничных условий можно получить дисперсионные соотношения для продольной $k_{ПП}^{\|}$ компоненты ТМ моды волнового вектора ППП на границе графен-диэлектрик [55]

$$k_{ПП}^{\|} = k_0 n_{эфф} \ , \ n_{эфф} = \sqrt{1 - \left(\frac{2c\varepsilon_0 \varepsilon_d}{\sigma^{(1)}} \right)^2} \ , \qquad (1.6)$$

где k_0 - волнового вектор ЭМВ в вакууме, ε_d, ε_0 – диэлектрическая проницаемость диэлектрика и вакуума, c – скорость света в вакууме, $\sigma^{(1)}$ – линейная проводимость графена. В сравнении с благородными металлам, где волновой вектор ППП немного больше волнового вектора в вакууме (рис. 1.8), в графене увеличение может достигать нескольких порядков (рис. 1.9).

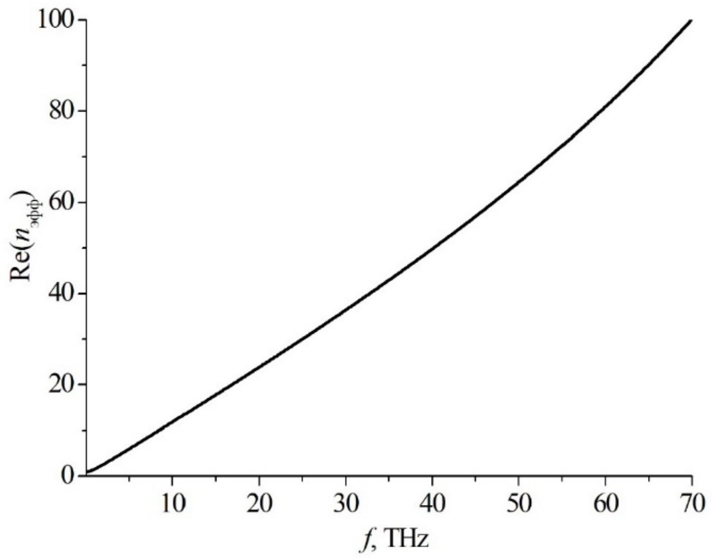


Рис. 1.9. Дисперсия действительной части эффективного показателя преломления структуры графен-диэлектрик в ТГц-ИК диапазоне. Параметры графена $T = 300$ K, $\mu_c = 0.35$ эВ, $\tau = 1$ пс.

Как было сказано выше, распространение ППП возможно на границе раздела двух сред с разными знаками диэлектрической проницаемости. Для границы графен - диэлектрик, полагаем что действительная часть диэлектрической проницаемости диэлектрика положительна. Для распространения ППП необходимо, чтобы графен имел отрицательную действительную часть проницаемости, т.е. $\mathrm{Re}\,\varepsilon_{gr} < 0$. Вводится эквивалентная диэлектрическая проницаемость графена

$$\varepsilon_{gr} = 1 + i\frac{\sigma^{(1)}}{\omega\varepsilon_0 d_{gr}},$$

где d_{gr} - толщина графена (как правило 0.33…1 нм), $\sigma^{(1)}$ – линейная проводимость графена (в общем случае определяемая выражением (1.1) или его приближениями).

На рис. 1.10 представлены графики частотной зависимости эквивалентной диэлектрической проницаемости графена при различных значениях химического потенциала. Максимальная частота $fmax_{ППП}$, при которой может существовать ППП является линейной функцией химического потенциала μ_c (вставка рис. 1.10). Таким образом, для допустимых значений химического потенциала графена ($|\mu_c|$ может достигать 1 эВ и более) область существования ППП простирается вплоть до ближнего ИК диапазона.

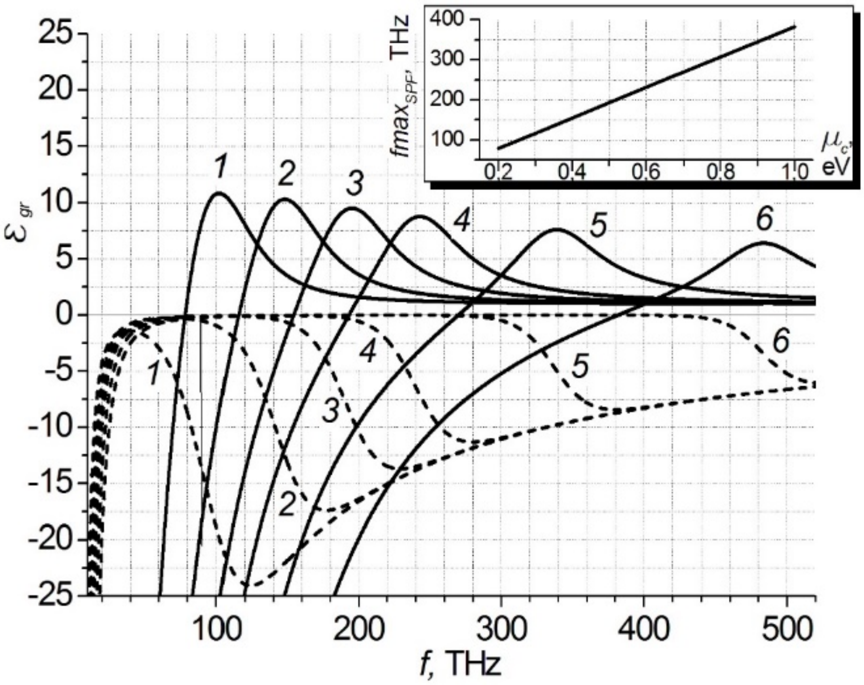


Рис. 1.10. Частотная зависимость эквивалентной диэлектрической проницаемости графена ε_{gr}: сплошные – Re, штриховые – Im. Кривая (*1*) μ_c = 0.2 эВ, (*2*) 0.3, (*3*) 0.4, (*4*) 0.5 эВ, (*5*) 0.7 эВ, (*6*) 1 эВ. Параметры графена T = 300 K, τ = 1 пс, d_{gr} = 0.33 нм.

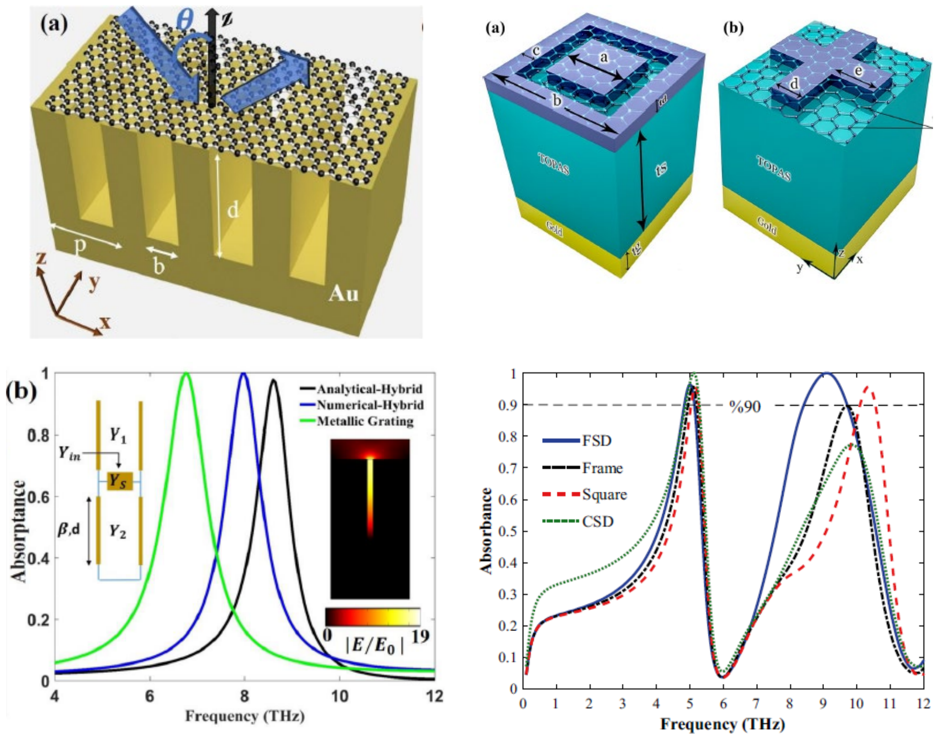
1.2.3 Поглотители на основе графена

С развитием технологий производства графена химическим осаждением из паровой фазы, механическим отслоением и другими способами [56 – 60], стало возможным изготовление элементов с разнообразной геометрией - сплошных слоев, одиночных и периодически нанесенных элементов или отверстий, представляющих собой ДР [61 - 66]. Наиболее популярны конфигурации в форме прямоугольных лент и дисков, которые могут использоваться в качестве базы для разработки новых функциональных материалов и периодических структур на основе графена [3, 33 - 36, 68 - 70].

Как было сказано выше при описании свойств графена, способность поддерживать ППП в ТГц и ИК диапазоне крайне важна для усиления взаимодействия с полем падающей ЭМВ [71, 72]. В дополнении к этому, наличие механизма перестройки ППП, который управляется с помощью электрического поля или химического легирования, стимулировало бурный рост исследований, направленных на разработку высокоэффективных плазмонных устройств ТГц и ИК диапазона.

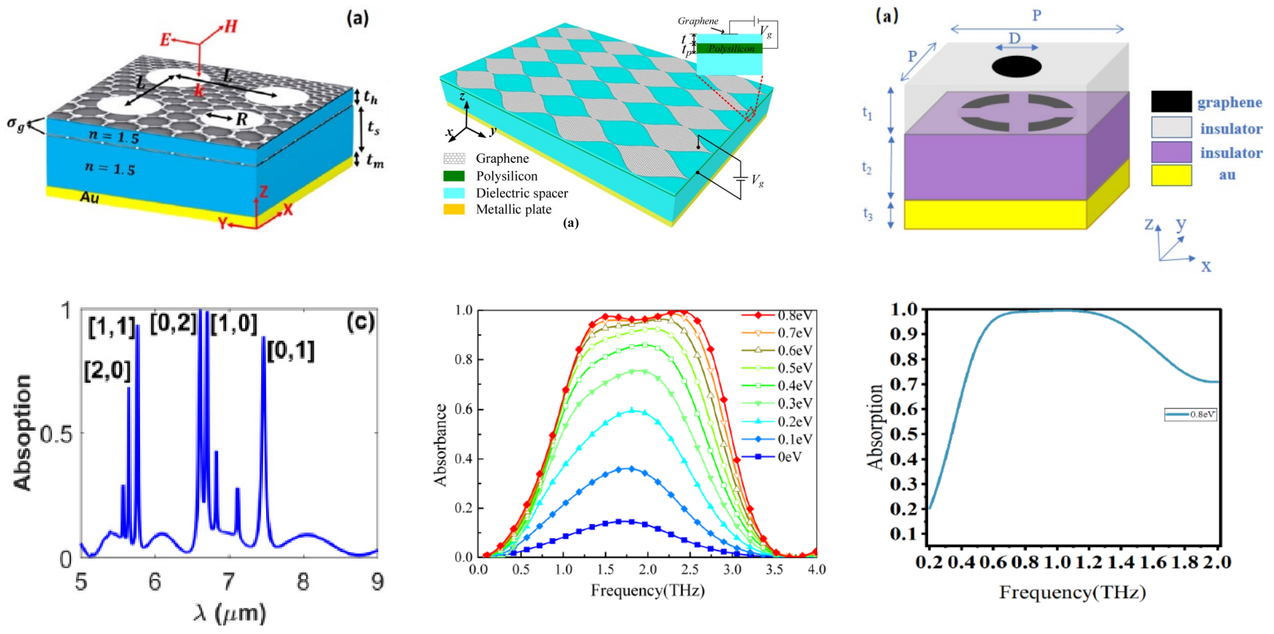
Важную роль в приложениях визуализации, зондировании и обнаружении играют поглотители. Поскольку они являются одними из самых востребованных компонентов в ТГц диапазоне, их стоит рассмотреть отдельно. Большую популярность имеют резонансные поглотители на основе благородных металлов [73 - 75]. Их основной недостаток – сложность управления электрическими и магнитными свойствами. Помимо этого, на ТГц частотах в металлах высокие потери, в видимом диапазоне они непрозрачны, а плазмонный резонанс наблюдается в ультрафиолетовой области частот, что приводит к значительному ограничению области применимости. Для преодоления этих сложностей в поглотители на основе благородных металлов вводят графен, проводимость которого легко управляется внешним полем.

Как правило, плазмонные поглотители представляют собой многослойные конструкции, содержащие ДР металлических, графеновых или диэлектрических лент, дисков, отверстий и других включений различной формы [1 – 20, 29 - 36, 74, 75, 77 - 80]. Среди них часто встречаются структуры, состоящие из: сплошного листа графена, совмещенного с металлической или диэлектрической ДР (рис. 1.11); графеновой ДР отверстий или включений простых и сложных форм (рис. 1.12); графеновой ДР из лент (рис. 1.13); комбинации перечисленных структур (рис. 1.14). На рис. 1.11-1.14 под структурой поглотителей расположены соответствующие спектры поглощения Absorptance = $1 - R - T$ (R, T – коэффициенты отражения и прохождения)



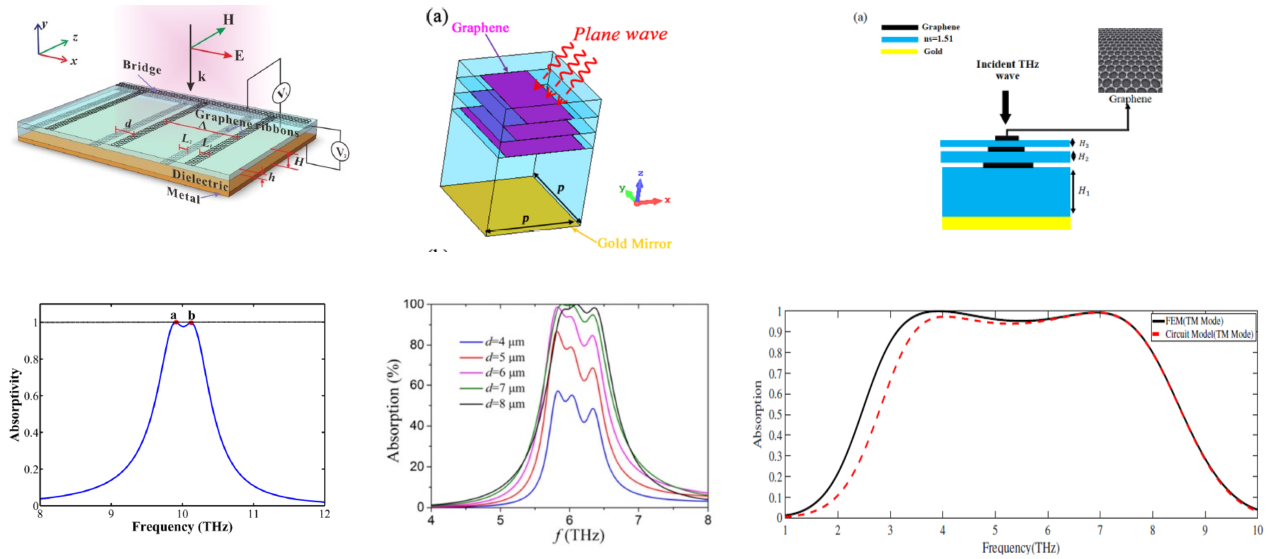
(а) (б) (в)

Рис. 1.11. Плазмонные поглотители на основе сплошного листа графена, совмещенного с металлической (а) [13] и диэлектрической ДР (б) [16].



(а) (б) (в)

Рис. 1.12. Плазмонные поглотители на основе графеновой ДР отверстий или включений простых и сложных форм: (а) [3], (б) [6], (в) [9].



(а) (б) (в)

Рис. 1.13. Плазмонные поглотители на основе графеновой ДР из лент: (а) [8], (б) [7], (в) [19].

В большинстве случаев нижний слой представляет собой металлический отражатель (пленка из золота или серебра), который обеспечивает с одной стороны нулевой коэффициент отражения падающей ЭМВ, с другой стороны может являться электродом для подключения внешнего источника напряжения и управления химическим потенциалом графена и радиофизическими параметрами устройства.

Реже исследуются конфигурации без отражательного слоя (рис. 1.14), однако интересные тем, что, поглощая энергию в заданном диапазоне частот, они, между тем, могут быть прозрачны вне полосы максимального поглощения.

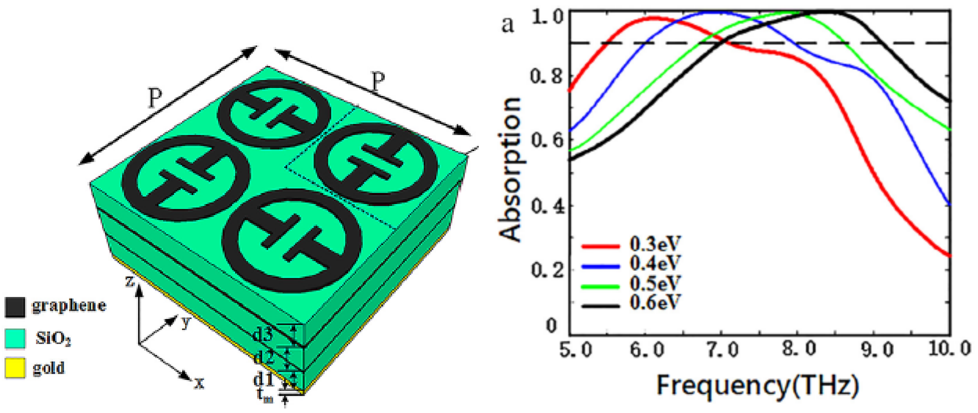
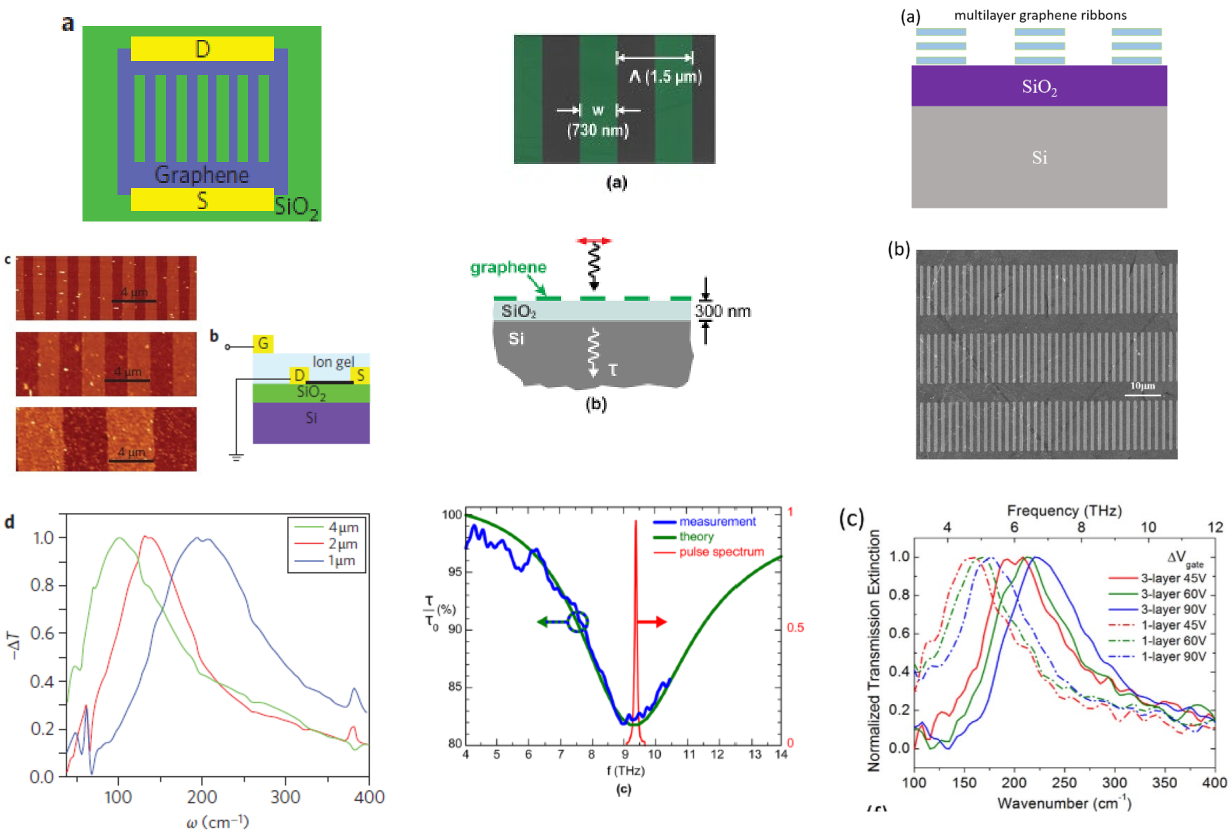


Рис. 1.14. Комбинированный плазмонный поглотитель [4].

Проведенный анализ существующих результатов моделирования линейных спектров (рис. 1.11-1.14) различных конфигураций плазмонных поглотителей показал, что при использовании графена достижимо практически полное поглощение в диапазоне от нескольких сотен ГГц до десятка ТГц (границы дальнего и среднего ИК). Узкополосные пики поглощения обеспечиваются простыми конфигурациями решеток из отверстий и лент (рис. 1.12а, 1.13а). Расширение полосы максимального поглощения может быть достигнуто усложнением формы элемента ДР (рис. 1.12а,б, 1.14), увеличением количества слоев сплошного графена (рис. 1.14), увеличением количества лент в элементарной ячейке (рис. 1.13), а также комбинацией всех перечисленных способов. При этом стоит понимать, что значительное усложнение структуры поглотителя может бы связано с проблемой реализуемости. Поэтому в первую очередь практический интерес представляют простые модели, в частности на основе лент, что подтверждается представленными на рис. 1.15 результатами экспериментов - спектрами прохождения ЭМВ через плазмонные поглотителей на основе ДРГ из лент. Как видно из графиков на рис. 1.11б, 1.14, 1.15в величина поглощения и частотная перестройка поглотителей на основе ДРГ эффективно управляются изменением химического потенциала графена (внешним электрическим полем).



(а) (б) (в)

Рис. 1.15. Спектры плазмонных поглотителей на основе ДРГ из лент (а) [81], (б) [13], (в) [83].

1.3 Нелинейная проводимость графена

Теоретически предсказано [84, 85] и экспериментально подтверждено, что благодаря свойству линейности энергетического спектра, графен способен проявлять выраженный нелинейный отклик [86 - 100].

Рассмотрим движение зарядов в графене под действием внешнего гармонического поля падающей ЭМВ. В соответствии со вторым законом Ньютона, уравнение движение электрона во внешнем поле $\vec{E} = \vec{E}_0 \cos \omega t$ имеет вид

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = e\vec{E}_0 \cos \omega t,$$

где $\vec{p}$, e – импульс и заряд частицы, ω, E_0 – частота и амплитуда ЭМВ. Отсюда следует, что импульс электрона проявляет гармонические колебания вида

$$\vec{p} = \frac{e\vec{E}_0}{\omega} \sin \omega t \cdot$$

Однако в графене скорость электрона и, следовательно, другие наблюдаемые величины, такие как, например, электрический ток, дипольный момент или испускаемое излучение, проявляют выаженное ангармоническое поведение [84]. Поскольку электроны в графене являются безмассовым, то абсолютное значение скорости фиксировано (равно скорости Ферми V_F), а ее направление определяется направлением импульса, тогда [84]

$$\vec{V} = \pm V \frac{\vec{p}}{\left|\vec{p}\right|} = \pm V \frac{e\vec{E}_0}{\left|e\vec{E}_0\right|} sign\left(\sin \omega t\right).$$

Раскладывая $sign\left(\sin \omega t\right)$ в ряд Фурье, получим

$$\vec{V} = \pm V \frac{e\vec{E}_0}{\left|e\vec{E}_0\right|} \frac{4}{\pi}\left(\sin \omega t + \frac{1}{3}\sin 3\omega t + \frac{1}{5}\sin 5\omega t + \ldots\right),$$

здесь знаки + и – соответствуют электрону в зоне проводимости и валентной, соответственно. Таким образом, в спектре электрического тока графена будут составляющие всех нечетных порядков. Оценки для графена с μ_c = 0.1 эВ показывают, что нелинейный отклик можно наблюдать уже при полях порядка $10^2 \ldots 10^3$ В/см [101], что на несколько порядков меньше, чем в других средах. Такое нелинейное поведение открывает ряд возможностей для моделирования нелинейных устройств на основе графена.

Запишем выражение для тока возбуждаемого в графене полем внешней плоской линейно-поляризованной монохроматической ЭМВ. Считаем амплитуду электрического поля достаточно большой и графен проявляет нелинейное поведение. Раскладывая ток по степеням падающего поля $\vec{E}$ [102], получим

$$\vec{j} = \sigma_{ab}^{(1)} \vec{E} + \sigma_{abc}^{(2)} \left|\vec{E}\right| \vec{E} + \sigma_{abcd}^{(3)} \left|\vec{E}\right|^2 \vec{E} + \ldots \qquad (1.7)$$

где $\sigma^{(n)}$ в общем случае - тензоры поверхностной проводимости (n + 1) ранга. В большинстве практических случаев $\sigma^{(3)}_{xxxx} \equiv \sigma^{(3)}_{yyyy}$ и $\sigma^{(3)}_{xxyy} \equiv \sigma^{(3)}_{xyxy} \equiv \sigma^{(3)}_{xyyx}$ [103], где индексы x,y связаны с осями декартовой прямоугольной системой координат. Далее считаем графен лежит в плоскости параллельной xoy и вектор напряженности электрического поля направлен вдоль одной из осей координат, поэтому индексы $xxxx$, $yyyy$ можно опустить. Поскольку графен имеет центрально-симметричную структуру, слагаемые с четными индексами в (1.7) не учитываются, тогда

$$\vec{j} = \sigma^{(1)} \vec{E} + \sigma^{(3)} \left|\vec{E}\right|^2 \vec{E}\,, \tag{1.8}$$

где $\sigma^{(1)}$ – линейная проводимость (определяемая интегральной формулой Кубо или ее приближениями), $\sigma^{(3)}$ - нелинейная проводимость графена третьего порядка. Слагаемые пятого, седьмого и других порядков (ответственные за генерацию высших гармоник) в выражении (1.7) опущены и не рассматриваются вследствие малости.

Нелинейность графена позволяет исследовать ряд параметрических процессов, возникающих в ответ на воздействие полем одной или нескольких ЭМВ, а именно - генерацию гармонических составляющих, четырехволновое смешение (ЧВС), параметрическое усиление.

ЧВС является распространенной техникой изучения и получения гармонических и комбинационных составляющих на основе нелинейности третьего порядка. В этом случае на нелинейный материал воздействуют тремя источниками ЭМВ с частотами ω_1, ω_2, ω_3. В результате генерируется новая (четвертая) комбинационная частота $\omega_4=\pm\omega_1\pm\omega_2\pm\omega_3$. При воздействии на материал одним или двумя источниками ЭМВ ($\vec{E} = \vec{E}_{01}\cos(\omega_1 t + \varphi_1)$ или $\vec{E} = \vec{E}_{01}\cos(\omega_1 t + \varphi_1) + \vec{E}_{02}\cos(\omega_2 t + \varphi_2)$), ЧВС является вырожденным и описывает ряд нелинейных процессов, среди которых генерация на частоте ТГ $\omega_4=\omega_1+\omega_1+\omega_1=3\omega_1$; генерация на комбинационных (суммарных и разностных) частотах $\omega_4=\omega_1+\omega_1\pm\omega_2=2\omega_1\pm\omega_2$. В рамках данной диссертации будут рассматриваться именно эти случаи.

Нелинейная проводимость третьего порядка $\sigma^{(3)}$ может быть описана различными моделями. При этом выбор конкретной определяется параметрами графена (например, значением химического потенциала) и частотой возбуждающей ЭМВ. Модели, построенные на основе квантовой теории, являются широкополосными и учитывают как внутризонную, так и межзонную проводимость. Более простые модели, как правило, описывают только один вид переходов и ограничены определенным диапазоном частот и (или) параметрами графена. Далее представлены основные модели нелинейной проводимости третьего порядка, обозначены области их применимости и приведены экспериментальные подтверждения нелинейности графена.

1.3.1 Модель на основе кинетической теории Больцмана

Первая теоретическая модель, описывающая нелинейный отклик графена была представлена Михайловым [84, 85] в 2007 году, через 3 года после открытия графена. Она основана на кинетической теории Больцмана и описывает нелинейную проводимость третьего порядка графена в области ТГц частот и среднего ИК (хотя для высоких значений химического потенциала может быть использована вплоть до границы ближнего ИК). Рассмотрено бесстолкновительное приближение (частота внешнего возмущающего поля ω много больше частоты соударений с ионами кристаллической решетки, примесями, другими электронами, т. е. $\omega >> \tau^{-1}$, где τ – время релаксации). В [84, 85] приводится выражение для поверхностного тока графена при воздействии одним источником монохроматического излучения (напряженность электрического поля имеет одну составляющую вдоль оси x)

$$j_x(\mathrm{t})=\left\{\frac{\mu_c e^2}{\pi\hbar^2\omega}E_0\sin\omega t-\frac{3}{32}\frac{e^4V_\mathrm{F}^2}{\pi\hbar^2\omega^3\mu_c}E_0^3\sin\omega t+\frac{1}{32}\frac{e^4V_\mathrm{F}^2}{\pi\hbar^2\omega^3\mu_c}E_0^3\sin 3\omega t\right\}, \qquad (1.9)$$

где e - заряд электрона, μ_c - химический потенциал, $V_F = 10^6$ м/с - скорость Ферми, ω и E_0 – частота и амплитуда падающего поля, $\hbar$ - приведенная постоянная Планка. Первое слагаемое соответствует току на частоте падающего поля, второе – самовоздействию, последнее - току на утроенной частоте.

Стоит отметить, что анализ источников, ссылающихся на модель Михайлова [84, 85], приводит к разным числовым коэффициентам K проводимости $\sigma^{(3)}$, полученной из (2.6)

$$\sigma^{(3)} = -i\frac{e^4 V_F^2}{\omega^3 \hbar^2 \mu_c} K \quad , \tag{1.10}$$

Так, например, в [104 - 106] $K = 3/32$, в [107] $K = 1/8\pi$, в [108] $K = 3/8\pi$, в [109] $K = 3/32\pi$, однако различие влияет лишь на уровень ГТГ. Зависимости от частоты и химическое потенциала такие же.

Выражение (1.10) справедливо для энергии фотонов падающего поля $\hbar\omega < 2|\mu_c|$ (допускаются лишь внутризонные переходы). При приближении энергии к значениям порядка $2|\mu_c|$ необходим учет межзонных переходов, что в рамках данной модели не предусматривается. Другое ограничение связано с температурой графена. Модель справедлива при $T << \mu_c / k_b$, где k_b – постоянная Больцмана. При повышении температуры образца, может возникнуть ситуация, когда носителям заряда будет достаточно тепловой энергии для осуществления межзонных переходов, что снова выходит за рамки [84, 84]. Проэтому, при T = 300 К должно выполняться условие $\mu_c >>$ 0.026 эВ.

Таким образом, формула (1.10) справедлива при выполнении $k_b T << \hbar\omega < 2|\mu_c|$. Для ненулевых значениий химического потенциала выражение (1.10) применимо от ТГц до границы среднего - ближнего ИК.

1.3.2 Модели на основе квантовой теории

Модель Михайлова для оптики. Позже, не основе квантовой теории, Михайловым получено выражение для нелинейного тока в графене при воздействии двумя источниками волн оптического диапазона [87]. При этом проводимость является чисто межзонной. Из [87] можно получить выражение для проводимости, описывающей процесс генерации комбинационной (разностной) частоты

$$\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_1, -\omega_2) = -i\frac{3}{32}\frac{e^4 V_\mathrm{F}^2}{\hbar^3}\frac{2\omega_1^2 + 2\omega_1\omega_2 - \omega_2^2}{\omega_1^3\omega_2^2(2\omega_1 - \omega_2)}, \tag{1.11}$$

или полагая $\omega_1=\omega_2$, можно получить формулу, описывающую ГТГ на высоких частотах

$$\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_1, \omega_1) = -i\frac{9}{32}\frac{e^4 V_\mathrm{F}^2}{\hbar^3\omega^4} \tag{1.12}$$

Формулы справедливы при выполнении $k_bT<<|\mu_c|<<\hbar\omega$ и применимы в оптике.

Модель Cheng. Представленные выше модели применимы в ограниченном диапазоне частот и не описывают поведение в резонансных областях поглощения (явления многофотонного поглощения). По мере увеличения частоты падающей ЭМВ наступает состояние, требующее одновременного учета вклада от внутризонных и межзонных переходов. Задача является довольно трудной, что отразилось в значительной сложности математической модели $\sigma^{(3)}$. Впервые такая модель была предложена Cheng. Для легированного графена [110]

$$\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) = \sigma_0\left|\frac{1\,\text{эВ}}{\mu_c}\right|^4 S^{dabc}\left(w_1, w_2, w_3\right). \tag{1.13}$$

где $\sigma_0 = e^2/4\hbar$, $w_i = \hbar\omega_i/|\mu_c|$, графики коэффициента S^{dabc} представлены на рис. 2.7 (выражение S^{dabc} достаточно громоздкое, его полное описание можно найти в [110]). Из (1.13) получено выражение для ГТГ [110]

$$\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_1, \omega_1) = i\frac{V_\mathrm{F}^2 e^4}{192\pi\hbar^3\omega_1^4}\left(17G(\hbar\omega_1/2|\mu_c|) - 64G(2\hbar\omega_1/2|\mu_c|) + 45G(3\hbar\omega_1/2|\mu_c|)\right), \tag{1.14}$$

где $G(x) = \ln\left((1+x)/(1-x)\right) + i\pi\theta(|x|-1)$, θ - функция Хэвисайда. Выражение (1.14) может использоваться в широком диапазоне частот от ТГц вплоть до границы УФ диапазона. Для ТГЦ-ИК можно получить еще более простое выражение [111]

$$\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_1, \omega_1) \simeq i\frac{e^4 V_F^2}{8\pi\hbar^2\omega_1^3|\mu_c|}. \quad (1.15).$$

Стоит отметить, что аналитическое выражение (1.15) полностью совпадает с внутризонной проводимостью Михайлова (1.11) с коэффициентом $K = 1/8\pi$.

Стоит сказать об областях сингулярного поведения $\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_1, \omega_1)$ на рис. 1.16. Резонансы соответствуют эффектам однофотонного (Ω=2 или $\hbar\omega_2 = 2|\mu_c|$), двухфотонного (Ω=1 или $2\hbar\omega_2 = 2|\mu_c|$) и трехфотонного поглощения (Ω=2/3 или $3\hbar\omega_2 = 2|\mu_c|$).

Cheng [111] было исследовано и описано влияние эффектов рассеяния и конечной температуры. Полная формула для проводимости $\sigma^{(3)}$ здесь не приводится ввиду громоздкости, однако имеются некоторые приближенные выражения, например Soavi для ГТГ [93]

$$\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_1, \omega_1) \approx i\frac{e^2}{4\hbar}\left\{\frac{17G(m,a) - 64G(m,b) + 45G(m,c)}{24(\hbar\omega_1)^4} + \frac{\hbar\tau^{-1}}{6(\hbar\omega_1)^4}\left[\frac{17}{m+c} + \frac{17}{m-c} - \frac{8}{m+b} - -\frac{8}{m-b} + \frac{3\hbar\omega}{(m+c)^2} - \frac{3\hbar\omega}{(m-c)^2}\right]\right\}, \quad (1.16)$$

где $G(m,a) = \ln\left|\frac{m+a}{m-a}\right|$, $m = 2|\mu_c|$, $a = \hbar(\omega_1 + i\tau^{-1})$, $b = \hbar(2\omega_1 + i\tau^{-1})$, $c = \hbar(3\omega_1 + i\tau^{-1})$.

Область применимости – ТГц-оптика при $\omega \gg \tau^{-1}$.

На рис. 1.17 представлены спектры поверхностной проводимости $\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_1, \omega_1)$ по формуле (1.16) для различных времен релаксации. На низких ТГц частотах - зависимость от частоты f, в области резонансов - от параметра $\Omega = \hbar\omega / |\mu_c|$.

Влияние τ проявляется лишь в резонансных областях одно- (вставка рис. 1.17. а), двух- (вставка рис. 1.17б) и трехфотонного (рис. 1.17б) поглощения. Несмотря на отмеченное выше ограничение $\omega_1 \gg \tau^{-1}$, на частотах выше 1 ТГц влияние рассеяния слабое (рис. 1.17а).

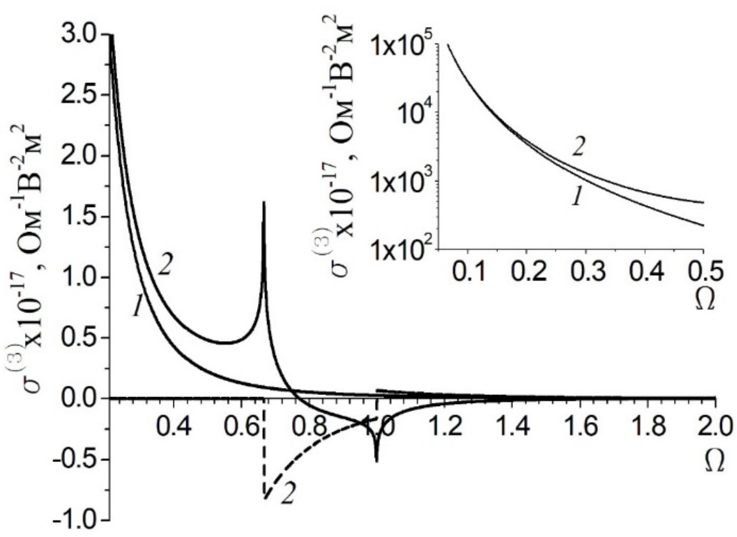
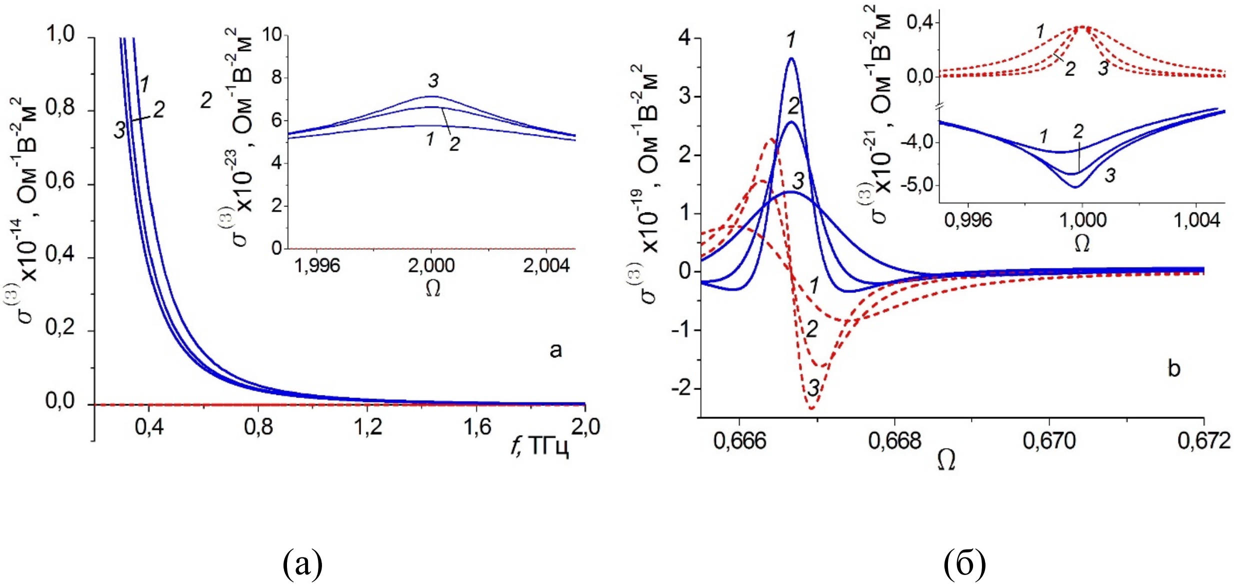


Рис. 1.16. Нелинейная проводимость $\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_1, \omega_1)$. Модель Cheng, формула (1.16). Кривые (*1*) – формула (1.16), (*2*) - (1.10). Сплошные кривые – $\mathrm{Im}\,\sigma^{(3)}$, штриховые - $\mathrm{Re}\,\sigma^{(3)}$.



(а) (б)

Рис. 1.17. Влияние рассеяния. Модель Cheng, формула (1.16). Кривые (*1*) - τ = 0.5 пс, (*2*) - 1 пс, (*3*) - 1.5 пс. Сплошные кривые – $\mathrm{Im}\sigma^{(3)}$, штриховые - $\mathrm{Re}\sigma^{(3)}$, μ_c = 0.35 эВ.

Модели Михайлова. Приблизительно в одно время с Cheng [110], Михайловым также была предложена широкополосная модель на основе квантовой теории, описывающая эффекты ГТГ [112], насыщенного поглощения, генерации второй гармоники, индуцированной постоянным током и других нелинейных процессов третьего порядка [113] с учетом рассеяния.

Для ГТГ

$$\sigma^{(3)}(\Omega_1,\Omega_1,\Omega_1)=i\frac{e^4V_F^2\hbar}{4\pi\mu_c^4}\left(S^{(3/0)}+S^{(2/1)}+S^{(1/2)}+S^{(0/3)}\right), \tag{1.17}$$

$$S^{(3/0)}=i\frac{1}{2\left(\Omega_1+i\Gamma\right)^3},$$

$$S^{(2/1)}=i\frac{1}{2\left(\Omega_1+i\Gamma\right)^2}\left[\frac{1}{\left[1-\left(\Omega_1+i\Gamma\right)/2\right]^2}-\frac{1}{\left[1+\left(\Omega_1+i\Gamma\right)/2\right]^2}-\frac{3}{8}\frac{\left(\Omega_1+i\Gamma\right)}{\left[1+\left(\Omega_1+i\Gamma\right)/2\right]^2}-\frac{3}{8}\frac{\left(\Omega_1+i\Gamma\right)}{\left[1-\left(\Omega_1+i\Gamma\right)/2\right]^2}\right],$$

$$S^{(1/2)}=i\frac{1}{8\left(\Omega_1+i\Gamma\right)^2}\left[\frac{1}{1+\left(\Omega_1+i\Gamma\right)/2}-\frac{1}{1-\left(\Omega_1+i\Gamma\right)/2}\right],$$

$$S^{(0/3)}=i\frac{1}{2\left(\Omega_1+i\Gamma\right)^3}\left[1+\frac{9}{8\left(\Omega_1+i\Gamma\right)}\left(\ln\frac{2-(\Omega_1+i\Gamma)}{2+(\Omega_1+i\Gamma)}-\frac{1}{27}\ln\frac{2-3(\Omega_1+i\Gamma)}{2+3(\Omega_1+i\Gamma)}\right)\right],$$

где $\Omega=\hbar\omega/|\mu_c|$ - параметр частоты, $\Gamma=\hbar/\tau|\mu_c|$ - параметр рассеяния.

Для генерации на комбинационных частотах

$$\sigma^{(3)}(\Omega_1,\Omega_1,\pm\Omega_2)=i\frac{e^4V_F^2\hbar}{4\pi\mu_c^4}\left(S^{(3/0)}+S^{(2/1)}+S^{(1/2)}+S^{(0/3)}\right), \tag{1.18}$$

$$S^{(3/0)}=i\frac{1}{2\left(\Omega_1+i\Gamma\right)^2\left(\pm\Omega_2+i\Gamma\right)},$$

$$S^{(2/1)}=i\frac{1}{2\left(\Omega_1+i\Gamma\right)^2}\left[\begin{array}{l}\dfrac{1}{\left[1-\left(\pm\Omega_2+i\Gamma\right)/2\right]^2}-\dfrac{1}{\left[1+\left(\pm\Omega_2+i\Gamma\right)/2\right]^2}-\\-\dfrac{3}{4}\dfrac{\left(\pm\Omega_2+i\Gamma\right)/2}{\left[1+\left(\pm\Omega_2+i\Gamma\right)/2\right]^2}-\dfrac{3}{4}\dfrac{\left(\pm\Omega_2+i\Gamma\right)/2}{\left[1-\left(\pm\Omega_2+i\Gamma\right)/2\right]^2}\end{array}\right],$$

$$S^{(1/2)}=i\frac{1}{4\left(\Omega_1+i\Gamma\right)\left(\Omega_1\pm\Omega_2+2i\Gamma\right)}\left[\frac{1}{1+\left(\Omega_1+i\Gamma\right)/2}-\frac{1}{1-\left(\Omega_1+i\Gamma\right)/2}\right],$$

$$S^{(0/3)}=i3\left[\frac{(2\Omega_1\pm\Omega_2+3i\Gamma)K(\Omega_1+i\Gamma)-(\Omega_1+i\Gamma)K(2\Omega_1\pm\Omega_2+3i\Gamma)}{(2\Omega_1+2i\Gamma)(3\Omega_1\pm\Omega_2+4i\Gamma)(\Omega_1\pm\Omega_2+2i\Gamma)}\right],$$

где $K(\Omega+i\Gamma)=\dfrac{1}{\left(\Omega+i\Gamma\right)^2}\left[\ln\dfrac{2-(\Omega+i\Gamma)}{2+(\Omega+i\Gamma)}+(\Omega+i\Gamma)\right]$.

В выражениях (1.17), (1.18) слагаемое $S^{(3/0)}$ описывает вклад от внутризонных переходов; $S^{(2/1)}$, $S^{(1/2)}$ содержат как межзонный, так и внутризонный вклад; $S^{(0/3)}$ описывает вклад от межзонных переходов. Максимальный вклад в общую проводимость имеет $S^{(3/0)}$, каждый последующий $S^{(3/0)}\rightarrow S^{(2/1)}\rightarrow S^{(1/2)}\rightarrow S^{(0/3)}$ на порядок меньше, чем предыдущий, поэтому в нижнем диапазоне частот можно получить высокий уровень нелинейных эффектов. Формулы (1.17), (1.18) могут применяться на ТГц частотах и в оптике.

Полезными также являются выражения для предельных случаев (таблица 1). Результат (1.19) для ТГц-ИК проводимости в точности совпал с приближением Cheng (1.15).

На рис. 1.18 представлены спектры поверхностной проводимости для ГТГ графена по формуле (1.17) при различных параметрах рассеяния τ. На низких ТГц частотах - зависимость от частоты f, в области резонансов - от параметра $\Omega = \hbar\omega / |\mu_c|$.

Таблица 1. Предельные случаи для выражения (1.18).

Условие применимости	Формула $\sigma^{(3)}$
ТГц- средний ИК, $\hbar\omega/\lvert\mu_c\rvert + i\hbar/\tau\lvert\mu_c\rvert \ll 1$	$\sigma^{(3)} = \frac{e^4 V_\mathrm{F}^2}{8\pi\mu_\mathrm{c}\hbar^2(\omega_1 + i\tau^{-1})^3}$ - ГТГ, $\sigma^{(3)} = \frac{e^4 V_\mathrm{F}^2}{8\pi\mu_\mathrm{c}\hbar^2(\omega_1 + i\tau^{-1})^2(\pm\omega_2 + i\tau^{-1})}$ - преобразование частот (1.19)
Область резонанса	$\sigma^{(3)} \simeq i\frac{e^4 V_\mathrm{F}^2}{8\pi\mu_c^2\hbar\omega_1^2(1-(\hbar\omega_1/\mu_c + i\hbar/\tau\mu_c)/2)^2}$, (1.20)
Область резонанса	$\sigma^{(3)} \simeq -i\frac{e^4\hbar V_\mathrm{F}^2}{4\pi\mu_c^4}\frac{27}{256}\left(16 - 25\ln 2 - \ln\left[2 - 3\left(\frac{\hbar\omega_1}{\mu_c} + i\frac{\hbar}{\tau\mu_c}\right)\right]\right)$, (1.21)
Оптика, $\hbar\omega \gg 2\lvert\mu_c\rvert$, $\omega \gg \tau^{-1}$	$\sigma^{(3)} \simeq \frac{13}{96}\frac{e^4 V_\mathrm{F}^2}{\hbar^3\omega_1^4}$. (1.22)

В области трехфотонного поглощения рис. 1.18б резонансное поведение проявляется слабо и практически не зависит от времени релаксации. В области однофотонного поглощения (вставка рис. 1.18а) нелинейная проводимость снижается при уменьшении времени релаксации (увеличении эффекта рассеяния). В нижнем ТГц диапазоне (рис. 1.18а) на частотах менее 0.5 ТГц влияние особенно сильное, поскольку здесь рассеяние является определяющим фактором.

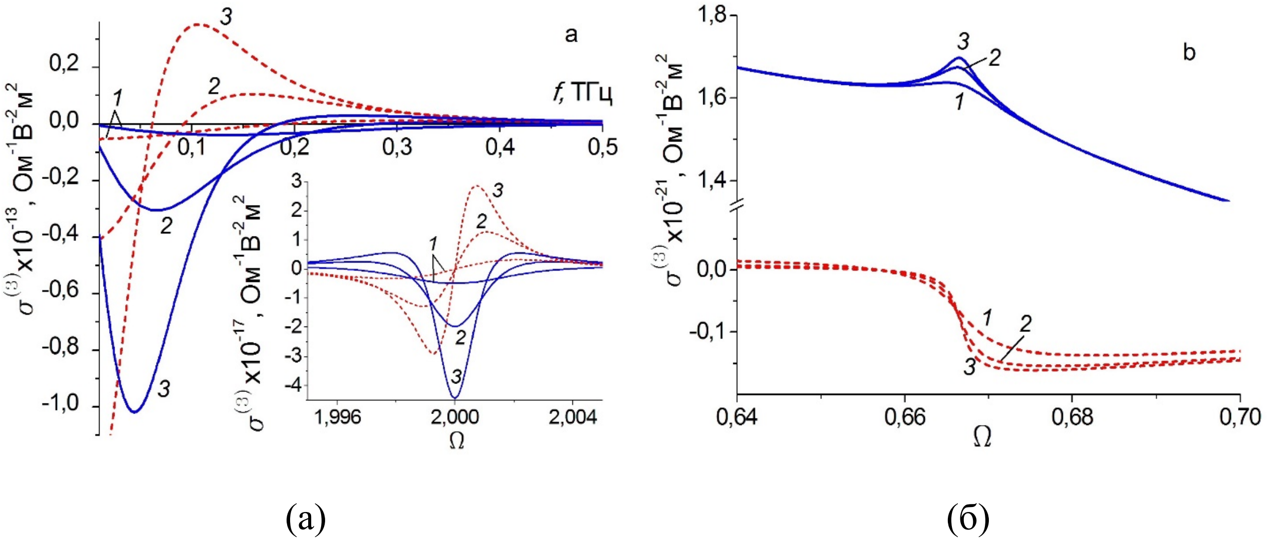
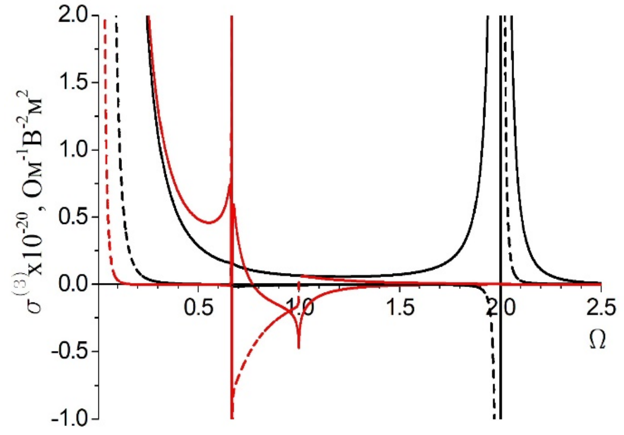
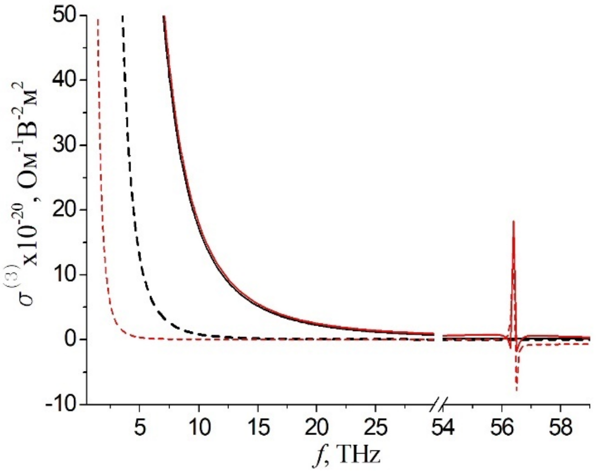


Рис. 1.18. Влияние рассеяния. Модель Михайлова, формула (1.17). Кривые (*1*) - τ = 0.5 пс, (*2*) - 1 пс, (*3*) - 1.5 пс. Сплошные кривые – Re$\sigma^{(3)}$, штриховые - Im$\sigma^{(3)}$, μ_c = 0.35 эВ.

Сравнение моделей Михайлова и Cheng. На рис. 1.19 на одном графике представлены спектры широкополосных моделей $\sigma^{(3)}(\omega_1,\omega_1,\omega_1)$ графена при фиксированных параметрах графена μ_c = 0.35 эВ, τ = 1 пс.

В интересующей нас области, где графен поддерживает существование ППП, мнимые части $\sigma^{(3)}$ обеих моделей (сплошные кривые рис. 1.19б) показывают хорошее соответствие. На ТГц частотах совпадение полное. Кардинально отличаются оценки в области Ω = 2/3, Ω = 1 и Ω = 2. Наибольшую нелинейность имеет область трехфотонного поглощения модели Cheng, что кардинально отличается от модели Михайлова. В диапазоне частот Ω = 2/3…2 мнимая часть проводимости модели Cheng меняет знак, в то время как в модели Михайлова она положительна и монотонно убывает с ростом частоты. Как отмечают сами авторы, объяснить расхождение затруднительно ввиду сложности математических моделей [110].

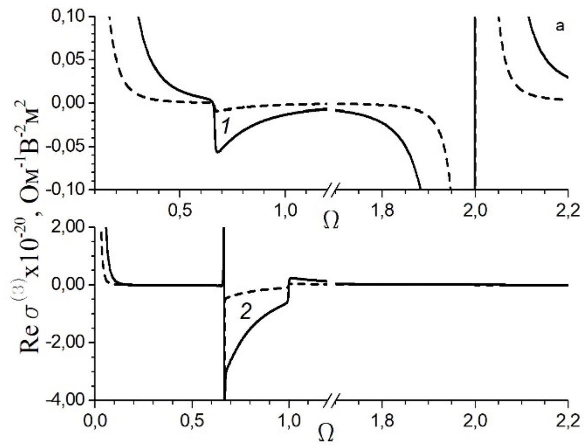


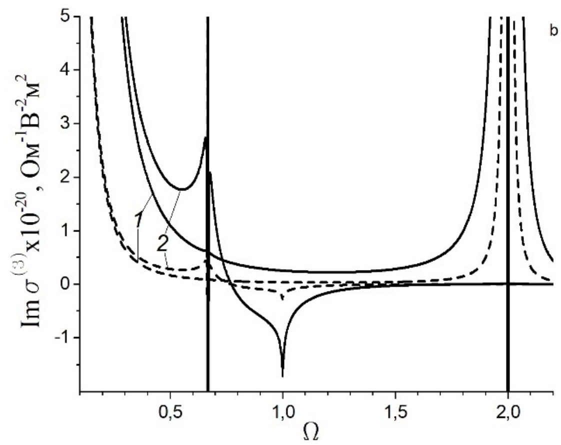


(а) (б)

Рис. 1.19. Сравнение спектров моделей Cheng (красные кривые, приближение Soavi, формула (1.16)) и Михайлова (черные кривые, формула (1.17)). (а) средний ИК -оптика, (б) ТГц-Средний ИК. Сплошные кривые – Im$\sigma^{(3)}$, штриховые - Re$\sigma^{(3)}$.

На рис 1.20 представлены графики проводимостей (1.16), (1.17) при различных значениях химического потенциала. При уменьшении химического потенциала резонансное поведение в областях **Ω** = 2/3, **Ω** = 1 и **Ω** = 2 проявляется меньше (кривые *1* рис. 1.20).





(а) (б)

Рис. 1.20. Проводимость $\sigma^{(3)}(\omega_1,\omega_1,\omega_1)$ при различных значениях химического потенциала: сплошные кривые - μ_c = 0.25 эВ, штриховые - 0.4 эВ. (a) Re$\sigma^{(3)}$ (b) Im$\sigma^{(3)}$. Кривые (*1*) - модель Cheng, формула (1.16); (*2*) - модель Михайлова (1.17).

Влияние температуры. В представленных выше формулах для нелинейной проводимости не фигурирует параметр температуры, однако в некоторых случаях ее влияние необходимо учитывать. Так, например, в [107] показано, что при низком уровне легирования ($\mu_c \sim 0.1$ эВ) нелинейный ток при температуре 300 К более чем в три раза превышает значение тока при 0 К.

Эффектом конечной температуры пренебрегать нельзя, когда энергия теплового движения носителей k_bT порядка энергии, достаточной для возбуждения межзонных переходов. Таким образом, формулы для ТГц-ИК диапазона, учитывающие только внутризонные переходы, например, (1.10) справедливы для $T = 0$ К. Несмотря на этот факт, их можно применять и при конечной температуре путем выбора значения химического потенциала таким, что $|\mu_c| >> k_bT$.

В области резонансных переходов $\Omega = 2/3$, $\Omega = 1$, $\Omega = 2$ температура оказывает существенное влияние на установление первоначального распределения электронов по значениям собственной энергии и на параметры релаксации. В таких случаях проводимость при конечной температуре может быть получена усреднением по химическому потенциалу значений при нулевой температуре в энергетическом окне шириной порядка энергии теплового движения [93, 111]

$$\sigma^{(3)}\left(\omega,\mu_c,T\right)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\sigma^{(3)}\left(\omega,x,0\right)}{\cosh^2\left(\dfrac{x-\mu_c}{2k_bT}\right)}dx\,,$$

или

$$\sigma^{(3)}\left(\omega,\mu_c,T\right)\approx\int\limits_{-4k_bT}^{4k_bT}\frac{\sigma^{(3)}\left(\omega,x+\mu_c,0\right)}{\cosh^2\left(\dfrac{x}{2k_bT}\right)}dx\,. \qquad (1.23)$$

На рис. 1.21 представлен спектр проводимости широкополосной модели Cheng по формуле (1.14) с учетом температуры по (1.23). При увеличении температуры логарифмические сингулярности мнимой части (1.14) в резонансах размываются, что приводит к их расширению и снижению проводимости (рис. 1.21a). Действительная часть $\sigma^{(3)}$, отвечающая за потери ведет себя подобным образом [111]. Вдали от резонансов на низких ТГц частотах (рис. 1.21b) и в ближнем ИК диапазоне (рис. 1.21c) при комнатной температуре нелинейная проводимость близка к значению при $T = 0$ K. При $k_b T << 2|\mu_c|$ в этих областях можно полагать $|\mu| \to \sqrt{\mu^2 + (k_b T)^2}$ [111], хотя поправка будет незначительной.

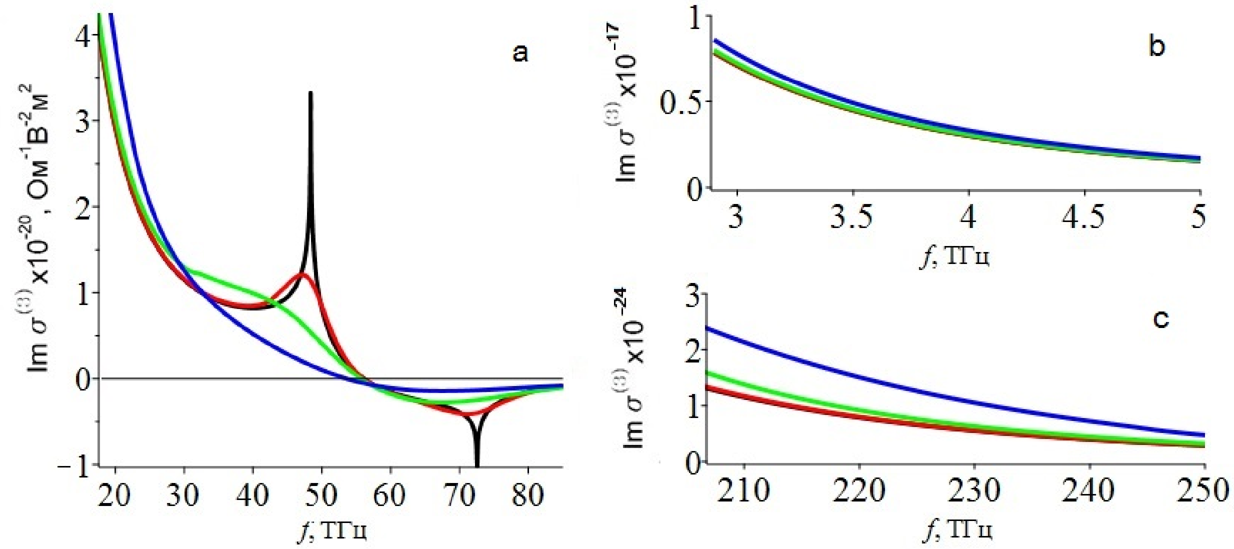


Рис. 1.21. Влияние температуры. Модель Cheng, формула (3.12). Черные кривые соответствуют $T = 1$ K, красные – 100 K, зеленые – 300 K, синие – 600 K; $\mu_c = 0.3$ эВ.

Стоит отметить, что при комнатной температуре в резонансной области трехфотонного поглощения $\Omega = 2/3$ оценка $\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_1, \omega_1)$ по (1.16) и (1.17) дает значения одного порядка. Таким образом, в ТГц-ИК диапазоне при комнатной температуре модели Cheng и Михайлова дают близкие результаты.

Экспериментальные подтверждения нелинейности графена. Нелинейный отклик графена, описанный представленными выше теоретическими моделями был многократно подтвержден экспериментально. Благодаря наличию мощных источников лазерного излучения, а также большому выбору детекторов, первая оценка нелинейности была проведена в области ближнего ИК и оптике [87, 89, 90].

В зависимости от методики и техники измерения экспериментальные данные представлены виде нелинейной восприимчивости третьего порядка $\chi^{(3)}$ или нелинейной части показателя преломления n_2. Обе величины - характеристики объемных тел. Поскольку свойства графен является двумерным и его нелинейные свойства описываются проводимостью $\sigma^{(3)}$, для перехода к эквивалентным величинам используется связь

$$\chi^{(3)} = \frac{i\sigma^{(3)}(\omega_1, \omega_1, \pm\omega_2)}{\omega_3 \varepsilon_0 d} \tag{1.24}$$

где d – толщина графена, ε_0 - диэлектрическая проницаемость вакуума, $\omega_3 = 3\omega_1$ для ГТГ или $\omega_3 = 2\omega_1 - \omega_2$ в экспериментах вырожденного ЧВС. В некоторых экспериментах $\chi^{(3)}$ приводят в системе СГСЭ в электростатических единицах [esu]. Связь $\chi^{(3)}$ в системах СИ и СГСЭ [102]

$$\chi^{(3)}\left[\mathrm{esu}\right] = \frac{(3\times 10^4)^2}{4\pi}\chi^{(3)}\left[\frac{\mathrm{м}^2}{\mathrm{В}^2}\right]. \tag{1.25}$$

Для теоретической оценки $\chi^{(3)}$ по формулам, приведенным выше, с учетом (1.24), (1.25), требуется знать значение химического потенциала и времени релаксации. В экспериментах, где эти данные не приводятся оценка будет проводиться для μ_c ~ 0.2 эВ, $\tau = 1$ пс. Такое значение μ_c является типичным для графена, нанесенного на стеклянные или кремниевые подложки [100]. Все данные сведены в таблице 1 и где это возможно дана теоретическая оценка действительной части $\chi^{(3)}$ (соответствует мнимой части $\sigma^{(3)}$) с использованием моделей Михайлова.

Ближний ИК и оптика. В указанном частотном диапазоне $\hbar\omega > 2|\mu_c|$ и основной вклад имеет межзонная проводимость. Впервые нелинейность графена была измерена при использовании техники вырожденного ЧВС, при облучении графеновых хлопьев лучами двух лазеров ближнего ИК [87]. Фиксировалась интенсивность излучения системы на комбинационной частоте $2\omega_1$-ω_2 (в диапазоне длин волн 0.76…0.84 мкм). Вычисление $|\chi^{(3)}|$ графена проведено сравнением с интенсивностью излучения тонкими пленками золота, для которых $|\chi^{(3)}_{gold}| \sim 4\times 10^{-9}$ esu заранее известна [114]. С учетом толщины графена и золота, значение нелинейной восприимчивость составило $|\chi^{(3)}| \sim 1.5\times10^{-7}$ esu, что на два порядка превысило результаты [114] и подтвердило исключительную нелинейность графена. Однако в [110] сообщается о том, что проведенная теоретическая оценка является ошибочной вследствие пропущенного коэффициента $(2\pi)^5$ и результат должен быть на самом деле $|\chi^{(3)}| \sim 10^{-11}$ esu, т.е на 4 порядка ниже. Так же ставится под сомнение правильность сравнения с восприимчивостью золота, поскольку в [114] облучающий лазер имел длину волны 532 нм при длительности 36 пс, а в текущем опыте длины волн лазеров превышали 670 нм при длительностях порядка 6 пс. Известно, что эффективность нелинейного отклика зависит от длины волны и длительности импульсов источника [115]. Оценка по формулам (1.11) и (1.18) приводит к $|\chi^{(3)}|$ порядка 10^{-10} и 10^{-9} esu, соответственно при $\lambda_1 = 0.958$ мкм, $\lambda_2 = 1.196$ мкм.

При исследовании эффекта ГТГ в ближнем ИК диапазоне (λ_1=1.7204 мкм) на однослойном и многослойном графене (до 6 слоев) получено значение $|\chi^{(3)}| = 7.2\times10^{-9}$ esu [63], что более чем на два порядка ниже результата [87]. Оценка по формулам (1.16) и (3.18) приводит к $|\chi^{(3)}|$ порядка 10^{-11} и 10^{-12} esu, соответственно.

Значительное усиление нелинейных эффектов получено за счет возбуждения ППП в графеновых лентах [96]. При использовании мощного CO_2 лазера $\lambda_1 = 10.6$ мкм и перестраиваемого зондирующего лазера $\lambda_2 = 1.52\ldots1.63$ мкм на основе вырожденного ЧВС получено значение нелинейной восприимчивости $|\chi^{(3)}| \sim 4.5\times10^{-6}$ esu, что более чем на порядок выше значения для сплошного графена [87]. Сравнение с теоретической оценкой здесь некорректно, поскольку в эксперименте использовано дополнительное усиление нелинейных эффектов.

ТГц частоты и средний ИК. В среднем ИК диапазоне при облучении графена, находящегося в постоянном магнитном поле, двумя лазерами с длиной волны 15.9 мкм (18.86 ТГц) [116] на основе вырожденного ЧВС измерена $\chi^{(3)}$ многослойного образца (около 50 слоев). В пересчете на один слой графена эквивалентная восприимчивость $|\chi^{(3)}|$ составила значение 0.5×10^{-5} esu.

На ТГц частотах в [117] исследован монослой графена с μ_c = 0.17 эВ. Полученное значение нелинейности третьего порядка (при облучении источником частотой 0.68 ТГц) составило $|\chi^{(3)}|$ ~ 0.1 esu.

Можно заметить (таблица 2), что результаты экспериментов и теоретическая оценка в некоторых случаях отличаются друг от друга на несколько порядков. Помимо этого, авторы отмечают, что эксперименты имеют большое количество переменных стартовых составляющих [95, 118, 119]: качество графена, метод изготовления образцов, количество слоев (толщина), материал подложки, длительность воздействия поля (или импульса лазера) на образец, химический потенциал, техника измерения и другие параметры.

Таблица 2. Экспериментальные данные о нелинейности графена.

Источник	Измеренное значение $\chi^{(3)}$, esu	Длина волны, мкм	Методика эксперимента	Теоретическая оценка Re$\chi^{(3)}$ с учетом (1.24), (1.25), esu
[87]	1.5×10^{-7}, с учетом замечаний [39] ~10^{-11}	0.67…0.98 (λ_1); 1.13…1.45 (λ_2)	ЧВС	10^{-9} по (1.18)
[91]	7.2×10^{-9}	1.7204	ГТГ	10^{-11} по (1.16) 10^{-12} по (1.18)
[69]	4.5×10^{-6}	10.6 (λ_1); 1.52…1.63 (λ_2)	ЧВС	-
[116]	0.5×10^{-5}	15.9 (λ_1, λ_2)	ЧВС	10^{-5} по (1.16)
[117]	0.1	440.87 (0.68 ТГц)	ГТГ	1.5 по (1.18)

Известно, что измерение нелинейности графена двумя различными методами может дать различие на порядок величины [93]. К тому же, материалы подложки сами по себе обладают нелинейностью (кремний, золото) [118], что затрудняет количественный анализ нелинейности графена.

Несмотря на различия, отмечается общая тенденция снижения нелинейности графена, предсказываемого теорией и близкие значения с экспериментом на ТГц и ИК частотах.

1.3.3 Генераторы третьей гармоники и преобразователи частот на основе графена

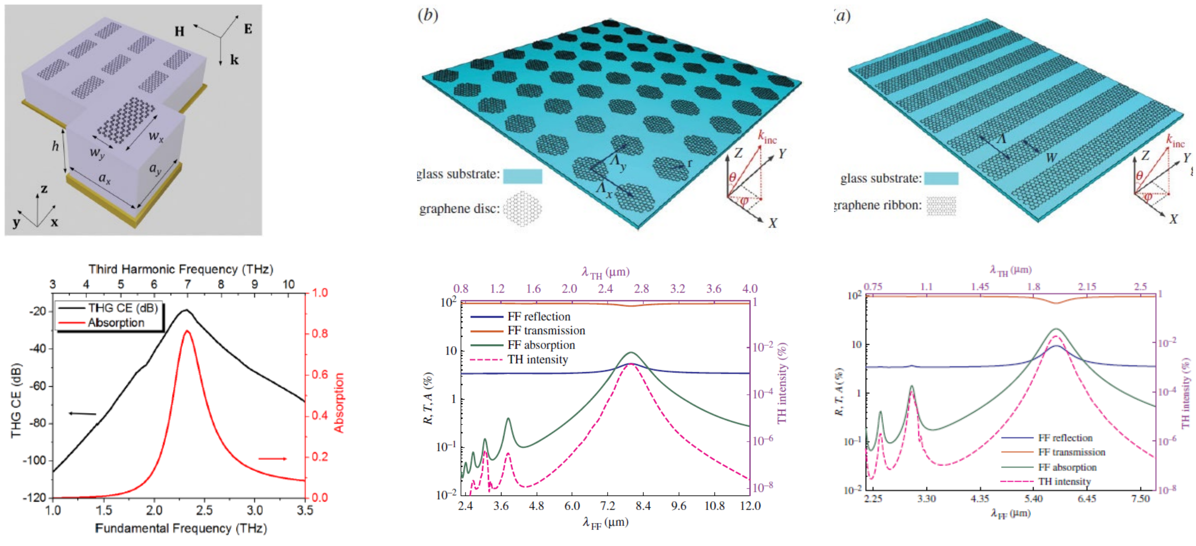
Описанный теоретически и измеренный экспериментально нелинейный отклик графена вызвал большой интерес исследователей в области функциональных материалов для проектирования новых нелинейных устройств, в частности преобразователей частот (смесителей) и генераторов гармонических составляющих.

Усиление взаимодействия между графеном и падающей ЭМВ важно не только для линейной, но и для нелинейной оптики, особенно в ТГц-ИК диапазонах, где нелинейные эффекты слабы. Существуют различные подходы для усиления этого взаимодействия, однако наиболее эффективным является возбуждение ППП, как и для поглотителей, рассмотренных ранее. Поэтому ДРГ также широко используются для моделирования генераторов ТГ и преобразователей частот с повышенной эффективностью преобразования.

На рис. 1.22а плазмонная двумерная ДРГ из прямоугольных лент демонстрирует значительное увеличение эффективности преобразования CE (увеличение уровня генерации ТГ) при резонансе ППП в графеновых лентах, которое проявляется также в увеличении поглощения падающей ЭМВ ТГц диапазона.

Аналогичный результат показывают и двумерные решетки с произвольной (шестиугольной) формой элементов и одномерные из лент (рис. 1.22б,в) – значительное усиление нелинейных эффектов на резонансных частотах ППП.

Используются также ДРГ, где элементами решетки выступают металлические ленты (рис. 1.23). В такой конфигурации металлические ленты ступают в качестве резонансной системы для ППП, а сплошной лист графена обеспечивает динамическую управляемость перестройкой химического потенциала.



(а) (б) (в)

Рис. 1.22. Плазмонные генераторы ТГ на основе ДРГ: (а) [70]; (б), (в) [35].

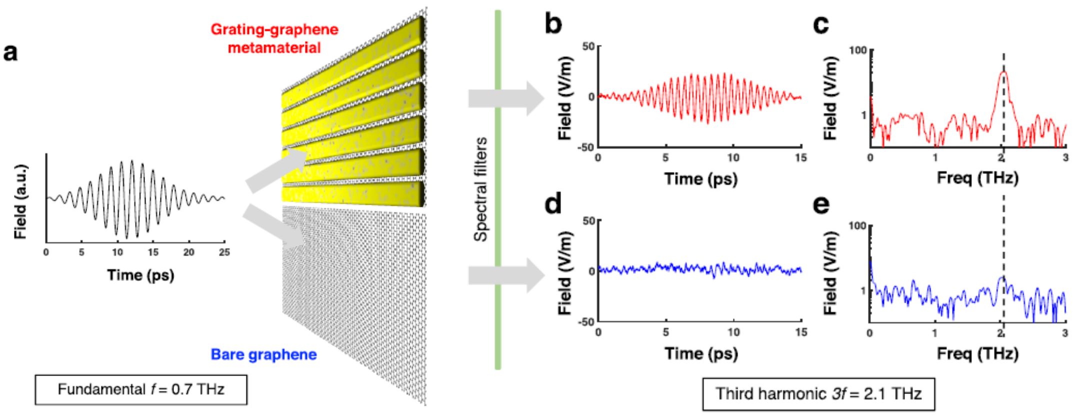
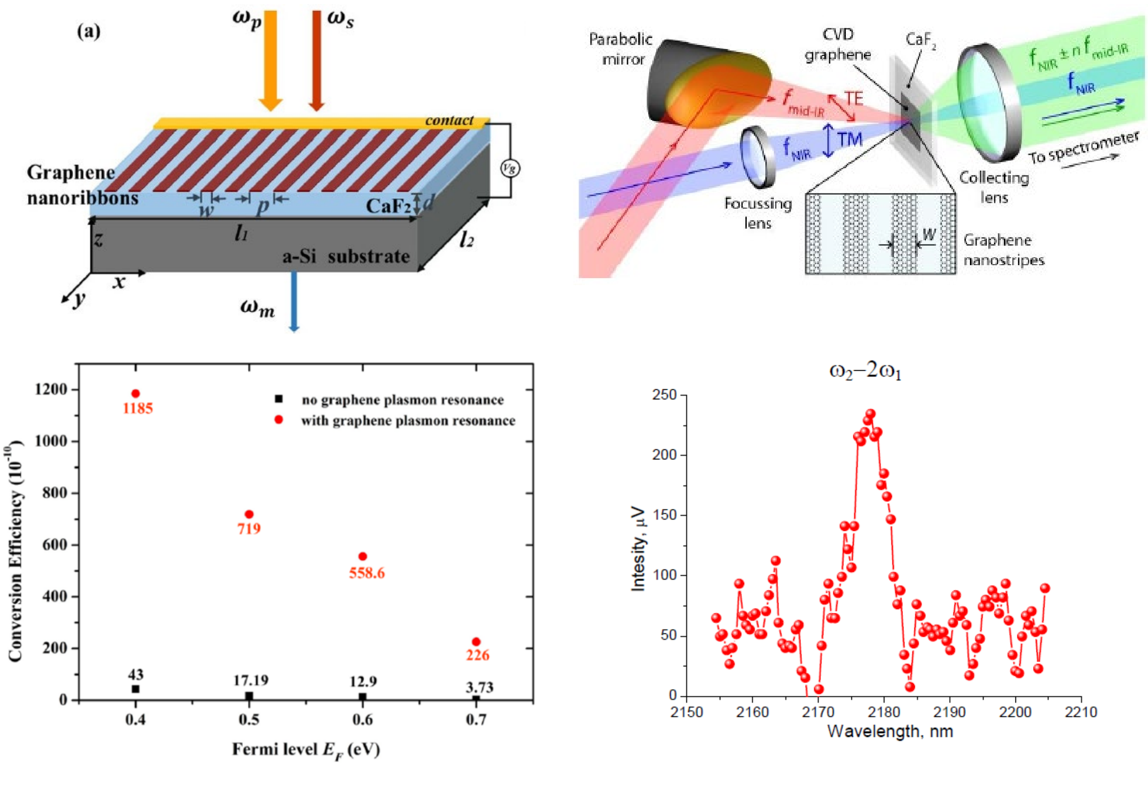


Рис. 1.23. Плазмонные генераторы ТГ на основе ДР из металлических лент и сплошного графена [121].

Продемонстрировано также, что плазмонные ДРГ могут быть также эффективно использованы для повышения эффективности преобразователей частот при смешении двух волн. В этом случае одна из частот падающих ЭМВ (сигнала или накачки) настраивается на резонансную частоту ДРГ (рис. 1.24).

На рис. 1.24а представлена модель преобразователя частот с повышением частоты. В результате нелинейного смешения волны накачки ω_1 (длиной волны 10.6 мкм) и сигнала ω_2 генерируется ЭМВ на суммарной комбинационной частоте $\omega_3 = \omega_1 + 2\omega_2$. Для четырех значений химического потенциала (0.4, 0.5, 0.6 и 0.7 эВ), который управляет резонансной частотой ППП (соответствует длине волны 4.055, 3.63, 3.31 и 3.07 мкм), получено значительное повышение эффективности преобразования на суммарной частоте (длине волны 1.70, 1.55, 1.43 и 1.34 мкм), когда частота сигнала настроена на резонансную частоту решетки.



(а) (б)

Рис. 1.24. Преобразователи частот на основе графеновой ДРГ: (а) [68], (б) [30, 96].

Экспериментально решена и обратная задача - нелинейное преобразование с понижением частоты при использовании ДРГ на основе лент (рис. 1.24б). В качестве лазера накачки в эксперименте используется CO_2 лазер с такой же длиной волны (10.6 мкм). При перестройке сигнальной ЭМВ в пределах 1.52…1.63 мкм получено усиление эффективности преобразования на частоту $\omega_3 = \omega_2 - 2\omega_1$.

Выводы

В представленной главе рассмотрены оптические свойства графена в линейном и нелинейном режимах. Благодаря безмассовым свойствам носителей, графен обладает высокой подвижностью зарядов и, как следствие, высокой проводимостью. Показано, что концентрацией носителей в широких пределах можно управлять перестройкой химического потенциала, которая может осуществляться как допированием, так и электрическим управлением приложением внешнего стационарного электрического поля смещения. При уменьшении химического потенциала можно значительно увеличить проводимость материала и, таким образом, управлять амплитудно-частотными характеристиками устройств на основе графена. Проведенный анализ спектров проводимости показал, что наибольшие значения проводимости наблюдаются в области ТГц частот, делая графен кандидатом для разработки высокоэффективных поглотителей в нижней части ТГц диапазона.

Далее показано, что на поверхности графена и диэлектрика может распространяться локализованный ППП. В отличии от металлов, где плазменная частота находится на границе с УФ диапазоном, возбуждение ППП графене возможно на ТГц и ИК частотах, где действительная часть эквивалентной диэлектрической проницаемости отрицательна. В сравнении с благородными металлам, где продольная компонента волнового вектор ППП немного больше волнового вектора в вакууме, в графене увеличение может достигать нескольких порядков и при высоких значениях химического потенциала возможно существование ППП на границе ближнего и среднего ИК.

Благодаря свойству линейности энергетического спектра, графен проявляет выраженный нелинейный отклик, который считается максимальным среди всех известных на данный момент материалов. Представлены модели для оценки нелинейной проводимости третьего порядка графена. Несмотря на одинаковые стартовые соотношения модели разных авторов предсказывают разное поведение в области резонанасных переходов и на частотах выше ближнего ИК. Различие как по значению, так и по знаку.

Несмотря на указанные несоответствия на высоких частотах, для легированного графена в интересующей нас области ТГц и ИК частот модели дают близкую оценку с точностью до постоянной. Представленные значения, измеренные в результате экспериментов, подтвердили общую тенденцию снижения нелинейности графена, предсказываемого теорией, а на ТГц и ИК показано хорошее соответствие. Дополнительно исследовано влияние температуры и параметра релаксации. Показано, что учет этих параметров необходим только на низких ТГц частотах и в области резонансных переходов.

Перечисленные уникальные свойства графена делают его платформой для разработки новых плазмонных устройств для современной электроники. Проведенный обзор существующих решений плазмонных устройств на основе графена показал, что весьма популярны конструкции на основе многослойных дифракционных решеток, которые помогают решить проблему возбуждения ППП, являясь одновременно замедляющей системой и резонаторами. Анализ актуальных научных исследований показал, что при использовании многослойных плазмонных структур на основе ДРГ можно получить поглотители с 100% эффективностью в ТГц диапазоне частот. При этом работ, посвященных моделированию нелинейных устройств (генераторов ТГ и преобразователей частот) и исследованию их характеристик значительно меньше, что подтверждает актуальность диссертационного исследования.

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ НА МНОГОСЛОЙНОЙ ГРАФЕНОВОЙ РЕШЕТКЕ

В настоящей главе представлена математическая модель решения нелинейной задачи дифракции ЭМВ на бесконечной многослойной графеновой решетке. В основе модели лежат два метода – использование импедансных граничных условий (ИГУ) для тангенциальных компонент электрического поля вблизи графеновых лент и метод возмущения для нахождения поля на утроенной и комбинационных частотах в задаче смешения.

2.1 Решение линейной краевой задачи дифракции

В основе теоретического исследования ДРГ лежит метод, использующий ИГУ для тонких плазмонных структур [122]. Основная особенность заключается в использовании формулы Кубо для линейной проводимости графеновых лент. Поле внутри тел (лент), образующих дифракционную решетку, не рассматривается.

2.1.1 Постановка задачи

Рассмотрим падение плоской монохроматической ЭМВ на бесконечную ДРГ, образованную прямоугольными графеновыми лентами (ширины $2l_x$ и длины $2l_y$) и чередующимися диэлектрическими слоями. Структура элементарной ячейки представлена на рис. 2.1. Ось z перпендикулярна границам раздела сред. Количество слоев, включая полубесконечную подложку N+1. Нумерация слоев сверху, $n = 1, 2, \ldots, N+1$. Число M определяет количество лент в элементарной ячейке. Разделительные диэлектрики могут иметь потери. В этом случае потери описываются мнимой частью показателя преломления.

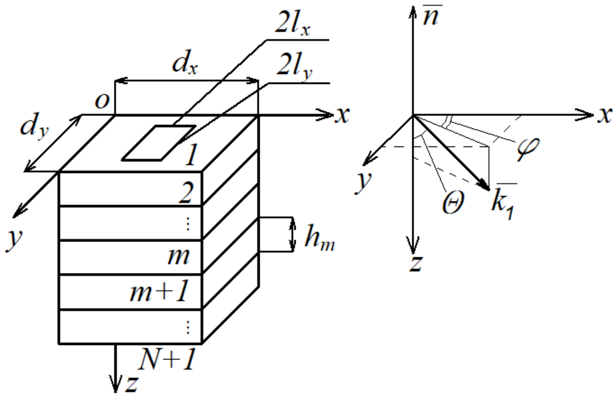


Рис. 2.1 Структура элементарной ячейки ДРГ.

2.1.2 Нахождение внешнего поля

Рассмотрим падение плоской ЭМВ $\vec{V}^{\,пад}$ с волновым вектором $\bar{k}_1$ образующим угол θ с осью z и ϕ - угол между проекцией k_1 на плоскость xoy и осью x (рис. 2.1)

$$\vec{V}^{\,пад} = e^{-ik_x x - ik_y y - ik_z z}$$

где $k_x = k_1 \cos\phi \sin\theta$, $k_y = k_1 \sin\phi \sin\theta$, $k_z = k_1 \cos\theta$, $k_1 = k\sqrt{\varepsilon_1}$, ε_1 - диэлектрическая проницаемость верхнего (первого) слоя, k - волновое число ЭМВ в вакууме. Задачу отражения ЭМВ от многослойного диэлектрика без графеновых полосок (нахождения внешнего поля) решим для двух вариантов поляризации.

При $p(H)$ – поляризации вектор напряженности электрического поля E падающей ЭМВ параллелен (лежит) плоскости падения, магнитного поля H – параллелен плоскости xoy и в общем случае имеет две составляющие $(H_x, H_y, 0)$.

Решение запишем в виде

$$\begin{aligned} H_x^{внеш} &= U(z) e^{-ik_x x - ik_y y} \sin\phi, \\ H_y^{внеш} &= -U(z) e^{-ik_x x - ik_y y} \cos\phi, \end{aligned} \tag{2.1}$$

где функцию $U(z)$ назовем потенциалом. Тогда из

$$\overrightarrow{E}^{внеш}=\frac{Z_0}{ik\varepsilon\left(z\right)}\mathrm{rot}\overrightarrow{H}=\frac{Z_0}{ik\varepsilon\left(z\right)}\begin{vmatrix}\vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z\\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z}\\ H_x & H_y & 0\end{vmatrix}$$

получим

$$\begin{aligned}E_x^{внеш}&=-\frac{Z_0}{ik\varepsilon\left(z\right)}\frac{\partial H_y}{\partial z}=\frac{Z_0}{ik\varepsilon\left(z\right)}\frac{dU}{dz}e^{-ik_xx-ik_yy}\cos\phi,\\ E_y^{внеш}&=\frac{Z_0}{ik\varepsilon\left(z\right)}\frac{\partial H_x}{\partial z}=\frac{Z_0}{ik\varepsilon\left(z\right)}\frac{dU}{dz}e^{-ik_xx-ik_yy}\sin\phi.\end{aligned} \tag{2.2}$$

Для $s(E)$ - поляризации (вектор напряженности электрического поля E лежит в плоскости, параллельной xoy):

$$\begin{aligned}E_x^{внеш}&=U\left(z\right)e^{-ik_xx-ik_yy}\sin\phi,\\ E_y^{внеш}&=-U\left(z\right)e^{-ik_xx-ik_yy}\cos\phi,\end{aligned} \tag{2.3}$$

тогда из

$$\overrightarrow{H}^{внеш}=\frac{1}{-ikZ_0}rot\overrightarrow{E}=\frac{1}{-ikZ_0}\begin{vmatrix}\vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z\\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z}\\ E_x & E_y & 0\end{vmatrix},$$

получим

$$\begin{aligned}H_x^{внеш}&=\frac{1}{ikZ_0}\frac{\partial E_y}{\partial z}=-\frac{1}{ikZ_0}\frac{dU}{dz}e^{-ik_xx-ik_yy}\cos\phi,\\ H_y^{внеш}&=-\frac{1}{ikZ_0}\frac{\partial E_x}{\partial z}=-\frac{1}{ikZ_0}\frac{dU}{dz}e^{-ik_xx-ik_yy}\sin\phi.\end{aligned} \tag{2.4}$$

Компоненты поля должны удовлетворять уравнению Гельмгольца $\triangle f+k^2f=0$. После подстановки и простых преобразований, получим

$$\frac{\partial^2U}{\partial x^2}+\frac{\partial^2U}{\partial y^2}+\frac{\partial^2U}{\partial z^2}+k^2U=0,$$

Полагая, что потенциал $U\left(z\right)$ имеет единичную амплитуду, решение ищем в виде

$$U\left(z\right)=\begin{cases} e^{-ik_1 z}+R\,\mathrm{e}^{ik_1 z}, z\le 0, k_1=\sqrt{k^2\varepsilon_1-k_x{}^2-k_y{}^2} \\ TU_-\left(z\right), z\ge 0, \end{cases}$$

где R – коэффициент отражения. Потребуем $U_-\left(0\right)=1$, тогда T – коэффициент прохождения.

Из условий непрерывности U_- и $\xi\dfrac{dU_-}{dz}$ (далее для краткости $\xi U'_-$) получим

$$\begin{aligned} &1+R=T, \\ &-i\zeta_1 k_1\left(1-R\right)=T\zeta_2 U'\left(0\right), \end{aligned}$$

где $\zeta_{1,2}=\{1/\varepsilon_{1,2},1/\mu_{1,2}\}$ для p- и s-поляризации падающего поля, соответственно. Индексам соответствует номер слоя. Решая систему относительно R и T, получим

$$R=\frac{1-\eta}{1+\eta},\ T=\frac{2}{1+\eta}, \eta=-\frac{\zeta_2 U'\left(0\right)}{i\zeta_1 k_1}.$$

Потенциал представим в виде

$$\left.\begin{aligned} &U_{-,m}\left(z\right)=\frac{\left[A_m\sin k_m\left(z-h_{m-1}\right)+B_m\sin k_m\left(h_m-z\right)\right]}{\sin k_m h_m}; \text{ в слое } (m=2...N), \\ &U_{-,m}\left(z\right)=Ce^{-ik_m\left(z-h_{m-1}\right)}; \qquad \text{в подложке } (m=N+1), \end{aligned}\right\}$$

где $h_m=z_m-z_{m+1}$ - толщина m -го слоя.

Из условия непрерывности потенциала на границе слоев m и m+1

$$U_{-,m}\left(h_m\right)=U_{-,m+1}\left(h_m\right),$$

получим $B_{m+1}=A_m; C=A_N$.

Итак, потенциал

$$\left.\begin{array}{ll} U_{-,m}(z) = \dfrac{\left[B_{m+1}\sin k_m\left(z-h_{m-1}\right) + B_m \sin k_m\left(h_m - z\right)\right]}{\sin k_m h_m}; & \text{в слое } (m = 2...N), \\ U_{-,m}(z) = B_m e^{-ik_m\left(z-h_{m-1}\right)}; & \text{в подложке } (m = N+1). \end{array}\right\} \quad (2.5)$$

Найдем производные $\zeta U'_-$. Для слоя m

$$\left.\begin{array}{l} \zeta_m U'_{-,m}(z) = \dfrac{k_m}{\sin k_m h_m}\left[B_{m+1}\cos k_m\left(z-h_{m-1}\right) - B_m \cos k_m\left(h_m - z\right)\right], m = 2...N, B_2 = 1, \\ \zeta_m U'_{-,m}(z) = -ik_m B_m e^{-ik_m\left(z-h_{m-1}\right)}, \ m = N+1. \end{array}\right\}$$

Для слоя $m+1$.

$$\zeta_{m+1} U'_{-,m+1}(z) = \frac{k_{m+1}}{\sin_{m+1} h_{m+1}}\left[B_{m+2}\cos k_{m+1}\left(z-h_m\right) - B_{m+1}\cos k_{m+1}\left(h_{m+1} - z\right)\right].$$

Из условия непрерывности производных потенциала на границе слоев m и m+1

$$\zeta_m U'_{-,m}\left(h_m\right) = \zeta_{m+1} U'_{-,m+1}\left(h_m\right)$$

следует

$$\left.\begin{array}{l} \dfrac{k_m}{\sin k_m h_m}\left[B_{m+1}\cos k_m h_m - B_m\right] = \dfrac{k_{m+1}}{\sin k_{m+1} h_{m+1}}\left[B_{m+2} - B_{m+1}\cos k_{m+1} h_{m+1}\right], m = 2...N-1 \\ \dfrac{k_m}{\sin k_m h_m}\left[B_{m+1}\cos k_m h_m - B_m\right] = -ik_{m+1} B_{m+1}; m = N \end{array}\right\}$$

Обозначая

$$S_m = \frac{k_m}{\sin k_m h_m}, C_m = k_m \mathrm{ctg} k_m h_m, C_{N+1} = ik_{N+1} \ ,$$

получим

$$B_{m+1} C_m - B_m S_m = B_{m+2} S_{m+1} - B_{m+1} C_{m+1}.,$$

Рекуррентная схема

$$B_m = \frac{1}{S_m}\left[B_{m+1}\left(C_m + C_{m+1}\right) - B_{m+2} S_{m+1}\right], m = N...2; B_{N+2} = 0.$$

Полагаем

$$B_m = \overline{B}_m B_{N+1},$$

где

$$\overline{B}_m = \frac{1}{S_m}\left[\overline{B}_{m+1}\left(C_m + C_{m+1}\right) - \overline{B}_{m+2} S_{m+1}\right], m = N...2;$$

Из условия $U_{-,2}(0) = U_{-,2}(h_1) = 1$ следует $B_2 = 1$, тогда $B_{N+1} = \frac{1}{\overline{B}_2}$.

Таким образом, зная $\overline{B}_{N+2} = 0, \overline{B}_{N+1} = 1$, находим все коэффициенты $\overline{B}_m$, а затем B_m ($B_{N+2} = 0$, $B_{N+1} = \frac{1}{\overline{B}_2}$).

Подставляя (2.5), в (2.1) - (2.4) находим компоненты поля $E_{x,y}^{внеш}(x, y, z)$, $H_{x,y}^{внеш}(x, y, z)$.

2.1.3 Нахождение тензорной функции Грина и компонент поля, рассеянного лентой, лежащей на поверхности m-го слоя

Задачу нахождения рассеянного графеновой лентой поля будем решать через векторы Герца P^E, P^M (электрический и магнитный), для которых известна z – компонента (перпендикулярная поверхности ДРГ). Через нее легко найти компоненты электромагнитного поля

$$\begin{gathered}
E_x = \frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial^2 P^E}{\partial z \partial x} + ikZ_0 \frac{\partial P^M}{\partial y},\ E_y = \frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial^2 P^E}{\partial z \partial y} - ikZ_0 \frac{\partial P^M}{\partial x}, \\
H_x = \frac{1}{\mu}\frac{\partial^2 P^M}{\partial z \partial x} - i\frac{k}{Z_0}\frac{\partial P^E}{\partial y},\ H_y = \frac{1}{\mu}\frac{\partial^2 P^M}{\partial z \partial y} + i\frac{k}{Z_0}\frac{\partial P^E}{\partial x},
\end{gathered} \tag{2.6}$$

Пусть на поверхности слоя с координатой z_m расположена графеновая лента с индексом m. Плотность тока на ней определяется скачком тангенциальной составляющей напряженности магнитного поля

$$\begin{gathered}
j_{x,m}(x, y) = H_y^+(x, y, z_m + 0) - H_y^-(x, y, z_m - 0), \\
j_{y,m}(x, y) = -\left[H_x^+(x, y, z_m + 0) - H_x^-(x, y, z_m - 0)\right]
\end{gathered}, \qquad (2.7),$$

где индексами «±» обозначены компоненты поля, соответственно, сверху и снизу ленты.

Поскольку функции $P_m^{M,E}(x,y,z)$ периодичны с периодами d_x и d_y, их можно разложить в ряд Флоке по пространственным гармоникам [123]

$$P_m^{M,E}(x,y,z)=\sum_{p,q=-\infty}^{\infty}\tilde{P}_{m,pq}^{M,E}(z)e^{-i\chi_{pq}(x,y)}, \tag{2.8}$$

где $\chi_{pq}(x,y)=\alpha_p x+\beta_q y$ - волновые числа пространственных гармоник, $\alpha_p=2p\pi/d_x+k_x$, $\beta_q=2q\pi/d_y+k_y$,k_x, k_y проекции волнового вектора падающей волны, $\tilde{P}_{m,pq}^{M,E}(z)$ - неизвестные коэффициенты ряда. Представим $\tilde{P}_{m,pq}^{M,E}(z)$ в виде

$$\begin{gathered}
\tilde{P}_{m,pq}^{M}(z)=A_{m,pq}^{M}M_{m,pq}(z)=A_{m,pq}^{M}\begin{cases}M_{m,pq}^{+}(z)/M_{m,pq}^{+}(z_m), z\ge z_m;\\ M_{m,pq}^{-}(z)/M_{m,pq}^{-}(z_m), z\le z_m;\end{cases}\\
\tilde{P}_{m,pq}^{E}(z)=A_{m,pq}^{E}\mathrm{E}_{m,pq}(z)=A_{m,pq}^{E}\begin{cases}\mathrm{E}_{m,pq}^{+}(z)/\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{+}(z_m), z\ge z_m;\\ \mathrm{E}_{m,pq}^{-}(z)/\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{-}(z_m), z\le z_m;\end{cases}
\end{gathered} \tag{2.9}$$

где $A_{m,pq}^{M}$,$A_{m,pq}^{E}$ - неизвестные коэффициенты, функции $M_{m,pq}^{\pm}(z),\mathrm{E}_{m,pq}^{\pm}(z)$ имеют вид

$$\left.\begin{aligned}
\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{+}&=\frac{1}{\varepsilon_{m-1}}\frac{d\mathrm{E}_{m,pq}^{+}}{dz}, & \hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{-}&=\frac{1}{\varepsilon_{m}}\frac{d\mathrm{E}_{m,pq}^{-}}{dz},\\
\hat{M}_{m,pq}^{+}&=\frac{1}{\mu_{m-1}}\frac{dM_{m,pq}^{+}}{dz}, & \hat{M}_{m,pq}^{-}&=\frac{1}{\mu_{m}}\frac{dM_{m,pq}^{-}}{dz}
\end{aligned}\right\} \tag{2.10}$$

и являются решениями волнового уравнения Гельмгольца для каждого диэлектрического слоя m с проницаемостью ε_m,μ_m.

Функции $M_{m,pq}^{\pm}(z),\mathrm{E}_{m,pq}^{\pm}(z)$, выбраны таким образом, что для $\tilde{P}_{m,pq}^{M,E}(z)$ выполняется условия непрерывности для $H_{x,y}$ на границах слоев кроме слоя $z = z_m$ и $E_{x,y}$ для всех границ. Алгоритм вывода $M_{m,pq}^{\pm}(z),\mathrm{E}_{m,pq}^{\pm}(z)$ представлен в приложении.

Подстановкой (2.8), (2.9) в (2.6) получим

$$
\left.
\begin{aligned}
H_{x,m}^{\pm} &= \frac{1}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}\left[\sum_{p,q=-\infty}^{\infty} A_{m,pq}^{M}\frac{M_{m,pq}^{\pm}(z)}{M_{m,pq}^{\pm}(z_m)}e^{-i\chi_{pq}(x,y)}\right] - i\frac{k}{Z_0}\frac{\partial}{\partial y}\left[\sum_{p,q=-\infty}^{\infty} A_{m,pq}^{E}\frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{\pm}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{\pm}(z_m)}e^{-i\chi_{pq}(x,y)}\right],\\
H_{y,m}^{\pm} &= \frac{1}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}\left[\sum_{p,q=-\infty}^{\infty} A_{m,pq}^{M}\frac{M_{m,pq}^{\pm}(z)}{M_{m,pq}^{\pm}(z_m)}e^{-i\chi_{pq}(x,y)}\right] + i\frac{k}{Z_0}\frac{\partial}{\partial x}\left[\sum_{p,q=-\infty}^{\infty} A_{m,pq}^{E}\frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{\pm}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{\pm}(z_m)}e^{-i\chi_{pq}(x,y)}\right],\\
E_{x,m}^{\pm} &= \frac{1}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}\left[\sum_{p,q=-\infty}^{\infty} A_{m,pq}^{E}\frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{\pm}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{\pm}(z_m)}e^{-i\chi_{pq}(x,y)}\right] + i\frac{k}{Z_0}\frac{\partial}{\partial y}\left[\sum_{p,q=-\infty}^{\infty} A_{m,pq}^{M}\frac{M_{m,pq}^{\pm}(z)}{M_{m,pq}^{\pm}(z_m)}e^{-i\chi_{pq}(x,y)}\right],\\
E_{y,m}^{\pm} &= \frac{1}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial z\partial y}\left[\sum_{p,q=-\infty}^{\infty} A_{m,pq}^{E}\frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{\pm}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{\pm}(z_m)}e^{-i\chi_{pq}(x,y)}\right] - i\frac{k}{Z_0}\frac{\partial}{\partial x}\left[\sum_{p,q=-\infty}^{\infty} A_{m,pq}^{M}\frac{M_{m,pq}^{\pm}(z)}{M_{m,pq}^{\pm}(z_m)}e^{-i\chi_{pq}(x,y)}\right],
\end{aligned}
\right\}
\quad (2.11)
$$

Ток в левой части (2.7) также является периодической функцией, поэтому к нему также справедливо разложение в ряд Флоке по пространственным гармоникам

$$
j_{x,y,m}(x,y) = \sum_{p,q=-\infty}^{\infty} \tilde{j}_{x,y,m,pq} e^{-i\chi_{pq}(x,y)} . \quad (2.12)
$$

Подставляя (2.11), (2.12) в (2.7), получим

$$
\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\left[\begin{aligned}&-i\beta_q A_{m,pq}^{M}\frac{\hat{M}_{m,pq}^{+}(z)}{M_{m,pq}^{+}(z_m)} + \alpha_p\frac{k}{Z_0}A_{m,pq}^{E}\frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{+}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{+}(z_m)} +\\ &+i\beta_q A_{m,pq}^{M}\frac{\hat{M}_{m,pq}^{-}(z)}{M_{m,pq}^{-}(z_m)} - \alpha_p\frac{k}{Z_0}A_{m,pq}^{E}\frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{-}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{-}(z_m)}\end{aligned}\right] = \sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\tilde{j}_{x,m,pq},
$$

$$
\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\left[\begin{aligned}&-i\alpha_p A_{m,pq}^{M}\frac{\hat{M}_{m,pq}^{+}(z)}{M_{m,pq}^{+}(z_m)} - \beta_q\frac{k}{Z_0}A_{m,pq}^{E}\frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{+}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{+}(z_m)} +\\ &+i\alpha_p A_{m,pq}^{M}\frac{\hat{M}_{m,pq}^{-}(z)}{M_{m,pq}^{-}(z_m)} + \beta_q\frac{k}{Z_0}A_{m,pq}^{E}\frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{-}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{-}(z_m)}\end{aligned}\right] = -\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\tilde{j}_{y,m,pq},
$$

Неизвестные коэффициенты $A_{m,pq}^{M}, A_{m,pq}^{E}$ в векторах Герца (2.9) необходимо выразить через коэффициенты $\tilde{j}_{x,y}$ ряда (2.12). После преобразований имеем

$$
A_{m,pq}^{E}\alpha_p\frac{k}{Z_0}\left[\frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{+}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{+}(z_m)} - \frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{-}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{-}(z_m)}\right] + A_{m,pq}^{M} i\beta_q\left[\frac{\hat{M}_{m,pq}^{-}(z)}{M_{m,pq}^{-}(z_m)} - \frac{\hat{M}_{m,pq}^{+}(z)}{M_{m,pq}^{+}(z_m)}\right] = \tilde{j}_{x,m,pq},
$$

$$
A_{m,pq}^{E}\beta_q\frac{k}{Z_0}\left[\frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{-}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{-}(z_m)} - \frac{\mathrm{E}_{m,pq}^{+}(z)}{\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}^{+}(z_m)}\right] + A_{m,pq}^{M} i\alpha_p\left[\frac{\hat{M}_{m,pq}^{-}(z)}{M_{m,pq}^{-}(z_m)} - \frac{\hat{M}_{m,pq}^{+}(z)}{M_{m,pq}^{+}(z_m)}\right] = -\tilde{j}_{y,m,pq}.
$$

Обозначим

$$\vartheta^E_{m,pq} = \frac{k}{Z_0}\varphi\overline{\vartheta}^E_{m,pq},\ \overline{\vartheta}^E_{m,pq} = \frac{k}{Z_0}\left[\frac{\mathrm{E}^+_{m,pq}}{\hat{\mathrm{E}}^+_{m,pq}} - \frac{\mathrm{E}^-_{m,pq}}{\hat{\mathrm{E}}^-_{m,pq}}\right],$$

$$\vartheta^M_{m,pq} = \left[\frac{\hat{M}^+_{m,pq}}{M^+_{m,pq}} - \frac{\hat{M}^-_{m,pq}}{M^-_{m,pq}}\right],$$

тогда

$$\left.\begin{aligned} A^E_{m,pq} &= \frac{1}{\rho^2_{pq}\vartheta^E_{m,pq}}\left(\alpha_p\tilde{j}_{x,m,pq} + \beta_q\tilde{j}_{y,m,pq}\right), \\ A^M_{m,pq} &= \frac{i}{\rho^2_{pq}\vartheta^M_{m,pq}}\left(\beta_q\tilde{j}_{x,m,pq} - \alpha_p\tilde{j}_{y,m,pq}\right). \end{aligned}\right\},$$

Подставляя найденные коэффициенты в векторы Герца, получим поле $E_{x,y,m}$, которое рассеивает лента, расположенная на диэлектрическом слое с координатой z_m

$$\begin{aligned} E_{x,m}(x,y,z) &= \frac{Z_0}{k}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\left[f^{(11)}_{m,pq}(z)\,\tilde{j}_{x,m,pq} + f^{(12)}_{m,pq}(z)\,\tilde{j}_{y,m,pq}\right]e^{-i\chi_{pq}(x,y)}, \\ E_{y,m}(x,y,z) &= \frac{Z_0}{k}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\left[f^{(21)}_{m,pq}(z)\,\tilde{j}_{x,m,pq} + f^{(22)}_{m,pq}(z)\,\tilde{j}_{y,m,pq}\right]e^{-i\chi_{pq}(x,y)}, \end{aligned} \qquad (2.13)$$

где

$$\left.\begin{aligned} f^{(11)}_{m,pq} &= \frac{i}{\rho^2_{pq}}\left(\frac{\alpha^2_p}{\overline{\vartheta}_e}\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}(z) - \frac{k^2\beta^2_q}{\vartheta_m}M_{m,pq}(z)\right), \\ f^{(22)}_{m,pq} &= \frac{i}{\rho^2_{pq}}\left(\frac{\beta^2_q}{\overline{\vartheta}_e}\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}(z) - \frac{k^2\alpha^2_p}{\vartheta_m}M_{m,pq}(z)\right), \\ f^{(12)}_{m,pq} &= f^{(21)}_{m,pq} = \frac{i\alpha_p\beta_q}{\rho^2_{pq}}\left(\frac{1}{\overline{\vartheta}_e}\hat{\mathrm{E}}_{m,pq}(z) + \frac{k^2}{\vartheta_m}M_{m,pq}(z)\right), \\ Z_0 &= \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}. \end{aligned}\right\}$$

Теперь поле выражено через коэффициенты ряда Флоке для токов на лентах. Коэффициенты $f^{(ij)}_{m,pq}$ являются компонентами тензорной функции Грина.

2.1.4 Удовлетворение граничным условиям (сведение к парным сумматорным уравнениям)

Результат этого этапа – система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), которая решается методом циклической редукции.

Удовлетворяя граничным условиям на каждой ленте

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}_{tg} \tag{2.14}$$

и считая ток вне лент равным нулю, имеем

$$\left. \begin{aligned} & j_{x,y,m}(x,y) = \sigma \left[E_{x,y}^{внеш}(x,y,z) + \sum_{m=1}^{M} E_{x,y,m}(x,y,z_m) \right], \\ & j_{x,y,m}(x,y) = 0, вне\ лент \end{aligned} \right\} \tag{2.15}$$

где $m = 1,2,...M$, $x,y \notin S_m$, S_m - поверхность ленты, лежащей на m-ом слое. После подстановки (2.12), (2.13) в (2.15), приходим к системе векторных ПСУ, где неизвестными являются токи на лентах

$$\begin{aligned} & \left. \begin{aligned} & \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \tilde{j}_{x,m,pq} e^{-i\chi_{pq}} = \sigma \left[U_m e^{-ik_x x} \sin\phi + \sum_{m=1}^{M} \frac{Z_0}{k} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \left[f_{m,pq}^{(11)} \tilde{j}_{x,m,pq} + f_{m,pq}^{(12)} \tilde{j}_{y,m,pq} \right] e^{-i\chi_{pq}} \right], \\ & \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \tilde{j}_{x,m,pq} e^{-i\chi_{pq}} = 0, \end{aligned} \right\} \\ & \left. \begin{aligned} & \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \tilde{j}_{y,m,pq} e^{-i\chi_{pq}} = \sigma \left[-U_m e^{-ik_x x} \cos\phi + \sum_{m=1}^{M} \frac{Z_0}{k} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \left[f_{m,pq}^{(21)} \tilde{j}_{x,m,pq} + f_{m,pq}^{(22)} \tilde{j}_{y,m,pq} \right] e^{-i\chi_{pq}} \right], \\ & \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \tilde{j}_{y,m,pq} e^{-i\chi_{pq}} = 0, \end{aligned} \right\} \end{aligned} \tag{2.16}$$

где размерность системы равна числу лент *M*, коэффициенты ряда Флоке для тока равны

$$\tilde{j}_{x,y,m,pq} = \frac{1}{d_x d_y} \int_{x_m - l_x}^{x_m + l_x} \int_{y_m - l_y}^{y_m + l_y} j_{x,y,m}(x,y) e^{i\chi_{pq}(x,y)} dxdy, \tag{2.17}$$

x_m, y_m - координаты центра и $2l_x, 2l_y$ - размеры полоски.

ПСУ решаются проекционными методом Галеркина [122]. Для этого токи (2.17) представим рядом по известным базисным функциям φ, ψ

$$
\left.
\begin{aligned}
j_{x,m}(x,y) &= \sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty} X_{m,rs}\varphi_{m,rs}(x,y),\\
j_{y,m}(x,y) &= \sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty} Y_{m,rs}\psi_{m,rs}(x,y),
\end{aligned}
\right\}
\tag{2.18}
$$

$$
\left.
\begin{aligned}
\varphi_{m,rs}(x,y) &= C_r^{3/2}\left(\frac{x-x_m}{l_{x,m}}\right)\left[1-\left(\frac{x-x_m}{l_{x,m}}\right)^2\right]P_s\left(\frac{y-y_m}{l_{y,m}}\right),\\
\psi_{m,rs}(x,y) &= P_r\left(\frac{x-x_m}{l_{x,m}}\right)C_s^{3/2}\left(\frac{y-y_m}{l_{y,m}}\right)\left[1-\left(\frac{y-y_m}{l_{y,m}}\right)^2\right],
\end{aligned}
\right\}
\tag{2.19}
$$

где $X_{m,rs}, Y_{m,rs}$ - неизвестные коэффициенты, $P_r, C_r^{3/2}$ - полиномы Лежандра и Гегенбауэра. Такой выбор базиса φ,ψ позволяет учитывать особенности распределения тока на графеновых лентах. Весовая функция в квадратных скобках (2.19) обеспечивает нули тока на краях лент. Помимо графеновых лент, можно моделировать импедансные и идеально проводящие полоски. В этом случае в базисе используются взвешенные полиномы Чебышева первого и второго рода. Количество базисных функции *r, s* может быть ограничено конечным значением и определяется исходя из критерия сходимости. Для лент размером порядка длиной волны в вакууме достаточно двух – пяти по каждой координате. Если на *m* – ом слое несколько лент, то в (2.18), (2.19) добавляется сумма и индекс по всем лентам на этом слое.

Подставим (2.18) в (2.17) меняя порядок суммирования

$$
\tilde{j}_{x,m,pq} = \frac{1}{d_x d_y}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty}\int_{x_m-l_x}^{x_m+l_x}\int_{y_m-l_y}^{y_m+l_y} X_{m,rs}\varphi_{m,rs}(x,y)e^{i\chi_{pq}(x,y)}dxdy\,,
$$

$$
\tilde{j}_{y,m,pq} = \frac{1}{d_x d_y}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty}\int_{x_m-l_x}^{x_m+l_x}\int_{y_m-l_y}^{y_m+l_y} Y_{m,rs}\psi_{m,rs}(x,y)e^{i\chi_{pq}(x,y)}dxdy\,.
$$

Обозначая

$$\Phi_{m,rs,pq} = \int\limits_{x_m-l_x}^{x_m+l_x} \int\limits_{y_m-l_y}^{y_m+l_y} \varphi_{m,rs}\, e^{i\chi_{pq}} dxdy,$$
$$\Psi_{m,rs,pq} = \int\limits_{x_m-l_x}^{x_m+l_x} \int\limits_{y_m-l_y}^{y_m+l_y} \psi_{m,rs}\, e^{i\chi_{pq}} dxdy, \tag{2.21}$$

получим

$$\tilde{j}_{x,m,pq} = \frac{1}{d_x d_y} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} X_{m,rs} \Phi_{m,rs,pq},$$
$$\tilde{j}_{y,m,pq} = \frac{1}{d_x d_y} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} Y_{m,rs} \Psi_{m,rs,pq}. \tag{2.22}$$

Подставляем (2.21), в систему (2.16)

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{1}{\sigma d_x d_y} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} X_{m,rs} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \Phi_{m,rs,pq} e^{-i\chi_{pq}} = U_m e^{-ik_x x} \sin\phi - \\
&-\frac{1}{d_x d_y} \frac{Z_0}{k} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} \left[X_{m,rs} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} f_{m,pq}^{(11)} \Phi_{m,rs,pq} e^{-i\chi_{pq}} + Y_{m,rs} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} f_{m,pq}^{(12)} \Psi_{m,rs,pq} e^{-i\chi_{pq}} \right], \\
&\frac{1}{d_x d_y} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} X_{m,rs} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \Phi_{m,rs,pq} e^{-i\chi_{pq}} = 0,
\end{aligned}\right\} \tag{2.22}$$

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{1}{\sigma d_x d_y} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} Y_{m,rs} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \Psi_{m,rs,pq} e^{-i\chi_{pq}} = -U_m e^{-ik_x x} \cos\phi - \\
&-\frac{1}{d_x d_y} \frac{Z_0}{k} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} \left[X_{m,rs} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} f_{m,pq}^{(21)} \Phi_{m,rs,pq} e^{-i\chi_{pq}} + Y_{m,rs} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} f_{m,pq}^{(22)} \Psi_{m,rs,pq} e^{-i\chi_{pq}} \right], \\
&\frac{1}{d_x d_y} \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^{\infty} Y_{m,rs} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \Psi_{m,rs,pq} e^{-i\chi_{pq}} = 0,
\end{aligned}\right\} \tag{2.23}$$

Проектируем систему на базисные функции (умножаем на φ, ψ (2.22), (2.23), соответственно и интегрируем по всей ленте). Обозначая

$$\left.\begin{aligned}
&\Phi^*_{m,uv,pq} = \int\limits_{-l_x}^{l_x} \int\limits_{-l_y}^{l_y} \varphi_{m,uv}\, e^{-i\chi_{pq}} dxdy,\ \Phi^*_{m,uv,kx} = \int\limits_{-l_x}^{l_x} \int\limits_{-l_y}^{l_y} \varphi_{m,uv}\, e^{-ik_x x} dxdy, \\
&\Psi^*_{m,uv,pq} = \int\limits_{-l_x}^{l_x} \int\limits_{-l_y}^{l_y} \psi_{m,uv}\, e^{-i\chi_{pq}} dxdy,\ \Psi^*_{m,uv,kx} = \int\limits_{-l_x}^{l_x} \int\limits_{-l_y}^{l_y} \psi_{m,uv}\, e^{-ik_x x} dxdy,
\end{aligned}\right\} \tag{2.24}$$

получим СЛАУ относительно неизвестных коэффициентов $X_{m,rs}, Y_{m,rs}$

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{1}{\sigma}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty}X_{m,rs}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\Phi_{m,rs,pq}\Phi^*_{m,uv,pq}=d_xd_yU_me^{-ik_xx}\sin\phi\Phi^*_{m,uv,kx}-\\
&-\frac{Z_0}{k}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty}\left[X_{m,rs}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}f^{(11)}_{m,pq}\Phi_{m,rs,pq}\Phi^*_{m,uv,pq}+Y_{m,rs}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}f^{(12)}_{m,pq}\Psi_{m,rs,pq}\Phi^*_{m,uv,pq}\right],\\
&\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty}X_{m,rs}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\Phi_{m,rs,pq}\Phi^*_{m,uv,pq}=0,
\end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{1}{\sigma}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty}Y_{m,rs}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\Psi_{m,rs,pq}\Psi^*_{m,uv,pq}=-d_xd_yU_me^{-ik_xx}\cos\phi\Psi^*_{m,uv,kx}-\\
&-\frac{Z_0}{k}\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty}\left[X_{m,rs}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}f^{(21)}_{m,pq}\Phi_{m,rs,pq}\Psi^*_{m,uv,pq}+Y_{m,rs}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}f^{(22)}_{m,pq}\Psi_{m,rs,pq}\Psi^*_{m,uv,pq}\right],\\
&\sum_{r=0}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty}Y_{m,rs}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\Psi_{m,rs,pq}\Psi^*_{m,uv,pq}=0,
\end{aligned}\right\}$$

где u, $v = 0, 1, \ldots, M$, интегралы $\Phi_{m,rs,pq},\Phi^*_{m,rs,pq},\Psi_{m,uv,pq},\Psi^*_{m,uv,pq}$ (2.22) в матричных элементах находятся аналитически.

СЛАУ решаем методом циклической редукции. Результат решения - коэффициенты $X_{m,rs},Y_{m,rs}$, которые затем подставляются в выражения (2.21) для токов на m – ой ленте.

По известным токам находятся компоненты поля, рассеянного лентой (2.13) и всей решеткой в линейном режиме

$$E^{лин}_{x,y}\left(x,y,z\right)=E^{внеш}_{x,y}\left(x,y,z\right)+\sum_{m=1}^{M}E_{x,y,m}\left(x,y,z_m\right). \qquad (2.25).$$

2.1.5 Расчет отраженной и прошедшей мощности

Считаем, что компоненты электрического и магнитного рассеянного ДРГ поля E_x,H_y (2.6) и внешнего поля $E^{внеш}_x,H^{внеш}_y$ (2.1) - (2.4) (поле ДРГ без графеновых лент) найденные на предыдущих этапах, известны. Плотность потока энергии, переносимой ЭМВ через площадку $d_x \times d_y$

$$P_z=\frac{1}{2}\int_0^{d_x}\int_0^{d_y}\left[\vec{E},\vec{H}^*\right]\vec{n}dxdy,$$

вектор $\vec{n}$ перпендикулярен плоскости графеновых лент. Тогда суммарная отраженная (индекс «отр») и прошедшая (индекс «прош») мощность генерируемой волны равна

$$\left.\begin{aligned} P_z^{отр} &= -\frac{1}{2}\int_0^{d_x}\int_0^{d_y}(E_x + E_x^{внеш})(H_y + H_y^{внеш})^* dxdy, \\ P_z^{прош} &= \frac{1}{2}\int_0^{d_x}\int_0^{d_y}(E_x + E_x^{внеш})(H_y + H_y^{внеш})^* dxdy. \end{aligned}\right\}$$

При вычислении E_x, H_y учитываются только распространяющиеся пространственные гармоники, т.е. поле дальней зоны. Тогда коэффициенты отражения и прохождения по мощности

$$\left.\begin{aligned} \hat{R} &= \frac{P_z^{отр}}{P_z^{пад}}, \\ \hat{T} &= \frac{P_z^{прош}}{P_z^{пад}}, \end{aligned}\right\}$$

где $P_z^{пад} = \frac{1}{2}\int_0^{d_x}\int_0^{d_y}\left[\overrightarrow{E}^{пад}, \overrightarrow{H}^{пад*}\right]\vec{n}dxdy$, $\overrightarrow{E}^{пад}, \overrightarrow{H}^{пад}$ - падающее поле (в задаче смешения волны накачки).

2.1.6 Сведение задачи к одномерному случаю

Предложенная математическая модель о дифракции ЭМВ на ДРГ легко сводится к одномерному случаю. При этом, решетка бесконечна в направлении y (рис. 2.1), а алгоритм содержит те же этапы. Отличия заключаются в следующем.

Ряд Флоке (2.8) по пространственным гармоникам принимает вид

$$P_m^{M,E}\left(x,y,z\right) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \tilde{P}_{m,p}^{M,E}\left(z\right)e^{-i\chi_p\left(x,y\right)},$$

где $\chi_p\left(x,y\right) = \alpha_p x + k_y y$, $\alpha_p = 2p\pi / d_x + k_x$.

Упрощается вид базисных функций (2.19)

$$\left.\begin{aligned} \varphi_{m,r}(x,y) &= C_r^{3/2}\left(\frac{x-x_m}{l_{x,m}}\right)\left[1-\left(\frac{x-x_m}{l_{x,m}}\right)^2\right], \\ \psi_{m,r}(x,y) &= P_r\left(\frac{x-x_m}{l_{x,m}}\right). \end{aligned}\right\}$$

Таким образом, из всех выражений математической модели ДРГ пропадают суммы $\sum\limits_{q=-\infty}^{\infty}$, $\sum\limits_{s=-\infty}^{\infty}$, $\sum\limits_{v=-\infty}^{\infty}$, а алгоритм остается тем же. В случае, когда $\phi=0$ (рис. 2.1) задача распадается на две независимые для *s*- и *p*-поляризации.

2.1.7 Верификация результатов расчета

Для верификации результатов моделирования на основе представленной математической модели, использующей ИГУ, проведены расчеты методом ОИДУ [124] как для двумерных, так и для одномерных решеток.

Одномерная решетка в постоянном магнитном поле

Для одномерного случая проведены расчеты коэффициентов отражения R, прохождения T и поглощения P (потерь) по мощности для решетки в постоянном магнитном поле (на вставке к рис. 2.2.) методом ОИДУ [124]. Рассматривается *p*-поляризация. Магнитное поле перпендикулярно плоскости решетки. Поверхностная проводимость графена в магнитном поле определяется выражением (1.3).

Исследуемую структуру (вставка рис. 2.2) можно представить как решетку из графеновых лент шириной $2l$ (полосковая), так и решетку из щелей (щелевая) шириной $2l_{щел}$ = d - $2l$ в графеновом сплошном слое (d - период решетки). Результаты расчетов представлены – линейные спектры представлены на рис. 2.2. Размеры - d = 40 мкм, $2l$ = 30 мкм, подложка из четырех слоев. Слои №*1* и №*3* (нумерация (сверху вниз) имеют параметры – n =1.77, толщина $h_{1,3}$ =56 мкм; слои №*2* и №*4* – n =1.414, $h_{2,4}$=71 мкм. Эти слои лежат на полубесконечной подложке с n =1.77. Параметры графена μ_c = 0.25 эВ, τ = 1 пс, магнитное поле B =0.5 Тл.

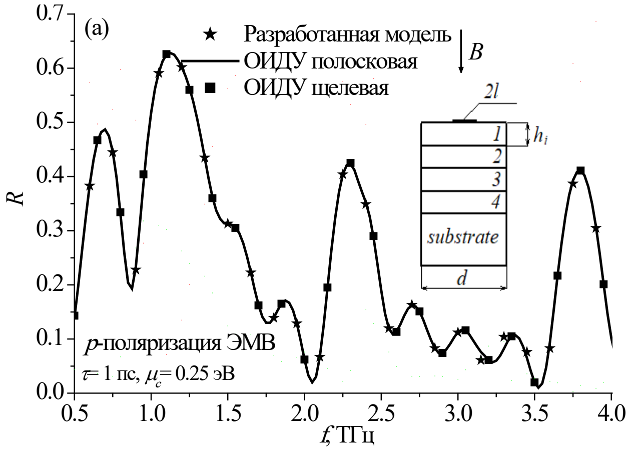


Рис. 2.2 Верификация результатов расчета для одномерной многослойной графеновой решетки. Коэффициент отражения R. Звездочки – метод ИГУ, сплошные кривые – метод ОИДУ для полосковой решетки, квадратные символы - метод ОИДУ для щелевой решетки.

Как видно из графика на рис. 2.2, имеется полное совпадение результатов по методам ИГУ и ОИДУ в области резонанса основной и второй моды (1…1.25 и 2.2…2.4 ГГц) и лишь небольшое расхождение в резонансной области высшей моды (3…3.5 ГГц).

Двумерная решетка, содержащая сплошные графеновые слои

Верификация результатов расчета для двумерной ДРГ приведена в главе 3 на рис. 3.6. Максимальное отклонение метода ОИДУ (сплошные) от ИГУ (символы) составило не более 5.3%.

2.2 Решение нелинейной краевой задачи дифракции

Для решения нелинейной задачи дифракции на ДРГ применяется метод возмущения. Его основная идея – использование поля, найденного на предыдущем этапе в линейном режиме $E^{лин}\left(x,y,z\right)$ (2.25). При этом в граничные условия для токов на лентах (2.14) вводится нелинейная часть, определяемая поверхностной проводимостью графена третьего порядка $\sigma^{(3)}$. Этот достаточно простой метод позволяет вычислить поле как на частоте третьей частотной гармоники при падении одной волны, так и на суммарных и разностных комбинационных частотах в задаче смешения двух волн.

2.2.1 Генерация третьей частотной гармоники

Полагаем, что из воздуха на ДРГ надает плоская, линейно-поляризованная ЭМВ $E_0 \cos(\omega_1 t + \varphi_1)$. При значениях напряженности электрического поля ЭМВ значительно меньших внутриатомных полей $E_0/E_{am} \ll 1$ (E_{am}~$10^{10}\ldots10^{11}$ В/м) отклик системы считается линейным [74] и наблюдается картина линейной дифракции, где связь тока на графеновых лентах и поля рассеянного решеткой $\vec{j}^{\,лин} = \sigma^{(1)} \vec{E}^{лин}$. При дальнейшем повышении E_0 (E_0 порядка E_{am}) характер взаимодействия становится нелинейным

$$\vec{j} = \sigma^{(1)} \vec{E} + \sigma^{(2)} \vec{E}\vec{E} + \sigma^{(3)} \left|\vec{E}\right|^2 \vec{E} + \ldots \qquad (2.26)$$

где $\sigma^{(1)}$ - линейная проводимость первого порядка, определяемая формулой Кубо (или ее приближениями [126]), $\sigma^{(2)}$, $\sigma^{(3)}$, …- нелинейные проводимости высших порядков, $\vec{E}$ - поле рассеянное решеткой в нелинейном режиме. Проводимости с четными индексами в выражении (2.26) можно опустить вследствие малости [66], поскольку гексагональная кристаллическая решетка графена центрально-симметрична. Тогда с учетом, что нелинейность третьего порядка максимальна

$$\vec{j} = \vec{j}^{\,лин} + \vec{j}^{\,нелин} = \sigma^{(1)} \vec{E} + \sigma^{(3)} \left|\vec{E}\right|^2 \vec{E} + \ldots \qquad (2.27)$$

Считаем, что первый этап решения линейной задачи дифракции выполнен и нам известен ток $\vec{j}^{\,лин}$ и поле, рассеянное решеткой в ближней и дальней зонах $\vec{E}^{лин}\left(x,y,z,t\right) = \vec{E}^{лин}\left(x,y,z\right)\cos(\omega t + \varphi)$. Применим метод возмущения. Полагая, что параметр $\sigma^{(3)}$ - малый, можем считать $\vec{E} \approx \vec{E}^{лин}\left(x,y,z,t\right)$, тогда нелинейный ток

$$\vec{j}^{\,нелин} \approx \sigma^{(3)} \left|\vec{E}^{лин} \cos(\omega t + \varphi)\right|^2 \vec{E}^{лин} \cos(\omega t + \varphi).$$

Используя преобразование

$$\cos^2(\omega t+\varphi)\cos(\omega t+\varphi)=\frac{1}{2}\left[1+\cos 2(\omega t+\varphi)\right]\cos(\omega t+\varphi)=$$
$$=\frac{1}{2}\cos(\omega t+\varphi)+\frac{1}{4}\cos(\omega t+\varphi)+\frac{1}{4}\cos 3(\omega t+\varphi),$$

получим

$$\vec{j}^{\,нелин}\approx\sigma^{(3)}\left[\frac{3}{4}\left|\vec{E}^{\,лин}\right|^2\vec{E}^{\,лин}\cos(\omega t+\varphi)+\frac{1}{4}\left|\vec{E}^{\,лин}\right|^2\vec{E}^{\,лин}\cos 3(\omega t+\varphi)\right].$$

При известном $\vec{E}^{\,лин}$ находим поля на основной (первое слагаемое - самовоздействие) и утроенной частоте (второе слагаемое - третья гармоника).

Линейные и нелинейные проводимости графена $\sigma^{(1)}$, $\sigma^{(3)}$ являются функциями частоты ω ЭМВ и параметров графена - температуры T, химического потенциала μ_c и времени релаксации носителей τ . В зависимости от значений этих параметров могут использованы различные аналитические приближения [83, 85], подробный анализ которых представлен в главе 1.

2.2.2 Смешение двух волн

Аналогично решается нелинейная задача дифракции при падении двух плоских линейно-поляризованных ЭМВ. В этом случае решение линейной задачи разбивается на два отдельных этапа – нахождение поля, рассеянного решеткой на частоте волны накачки $\vec{E}_1^{\,лин}\cos(\omega_1 t+\varphi_1)$ и сигнала $\vec{E}_2^{\,лин}\cos(\omega_2 t+\varphi_2)$. Тогда результирующее поле, рассеянное ДРГ в линейном режиме $\vec{E}_1^{\,лин}(x,y,z,t)+\vec{E}_2^{\,лин}(x,y,z,t)$. Подставляя в выражение (2.27), получим нелинейный ток

$$\vec{j}^{\,нелин}=\sigma^{(3)}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\cos(\omega_1 t+\varphi_1)+\vec{E}_2^{\,лин}\cos(\omega_2 t+\varphi_2)\right|^2\left[\vec{E}_1^{\,лин}\cos(\omega_1 t+\varphi_1)+\vec{E}_2^{\,лин}\cos(\omega_2 t+\varphi_2)\right].$$

Считаем, что амплитуда электрического поля волны накачки значительно выше амплитуды волны сигнала ($E_1 >> E_2$)

$$\vec{j}^{\,нелин}\approx\sigma^{(3)}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\cos(\omega_1 t+\varphi_1)\right|^2\left[\vec{E}_1^{\,лин}\cos(\omega_1 t+\varphi_1)+\vec{E}_2^{\,лин}\cos(\omega_2 t+\varphi_2)\right]$$

Используя преобразование

$$\cos^2(\omega_1 t+\varphi_1)\cos(\omega_2 t+\varphi_2)=\frac{1}{2}\left[1+\cos 2(\omega_1 t+\varphi_1)\right]\cos(\omega_2 t+\varphi_2)=$$

$$=\frac{1}{2}\cos(\omega_2 t+\varphi_2)+\frac{1}{4}\cos\left[2(\omega_1 t+\varphi_1)-(\omega_2 t+\varphi_2)\right]+\frac{1}{4}\cos\left[2(\omega_1 t+\varphi_1)+(\omega_2 t+\varphi_2)\right],$$

получим

$$\vec{j}^{\,нелин}\approx\sigma^{(3)}\begin{bmatrix}\frac{3}{4}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_1^{\,лин}\cos(\omega_1 t+\varphi_1)+\\+\frac{1}{4}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_1^{\,лин}\cos 3(\omega_1 t+\varphi_1)+\\+\frac{1}{2}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_2^{\,лин}\cos(\omega_2 t+\varphi_2)+\\+\frac{1}{4}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_2^{\,лин}\cos\left[2(\omega_1 t+\varphi_1)-(\omega_2 t+\varphi_2)\right]+\\+\frac{1}{4}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_2^{\,лин}\cos\left[2(\omega_1 t+\varphi_1)+(\omega_2 t+\varphi_2)\right]\end{bmatrix}.$$

Считаем объем взаимодействия поля с графеновыми лентами субволновым, тогда $\varphi_1=\varphi_2$ и нелинейный ток

$$\vec{j}^{\,нелин}\approx\sigma^{(3)}\begin{bmatrix}\frac{3}{4}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_1^{\,лин}\cos\omega_1 t+\frac{1}{4}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_1^{\,лин}\cos 3\omega_1 t+\frac{1}{2}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_2^{\,лин}\cos\omega_2 t+\\+\frac{1}{4}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_2^{\,лин}\cos 2(\omega_1-\omega_2)t+\frac{1}{4}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_2^{\,лин}\cos 2(\omega_1+\omega_2)t\end{bmatrix}\qquad(2.28)$$

Первое слагаемое (2.28) отвечает за самовоздействие, второе – ГТГ, третье - кросс-модуляцию, четвертое и пятое – генерацию разностной и суммарной комбинационных частот.

По найденным токам

$$\vec{j}^{\,нелин}\approx\sigma^{(3)}(\omega_1,\omega_1,\pm\omega_2)\frac{1}{4}\left|\vec{E}_1^{\,лин}\right|^2\vec{E}_2^{\,лин}\cos 2(\omega_1\pm\omega_2)t$$

вычисляются поля на комбинационных частотах.

2.2.3 Погрешность метода возмущений

Метод возмущений дает завышенные уровни генерируемого нелинейного поля, при сравнении со строгими численными методами [126], например методом Ньютона (рис. 2.3). В [126] рассматривается падение волны из полупространства с n_1 в полупространство с n_2, разделенными непрерывным графеновым слоем с параметрами μ=0.45 эВ, τ = 1 пс. Проводится оценка погрешности при различных параметрах нелинейности

$$\delta = \sigma^{(3)} \left| E^{лин} \right|^2 \big/ \sigma^{(1)} \tag{2.29}$$

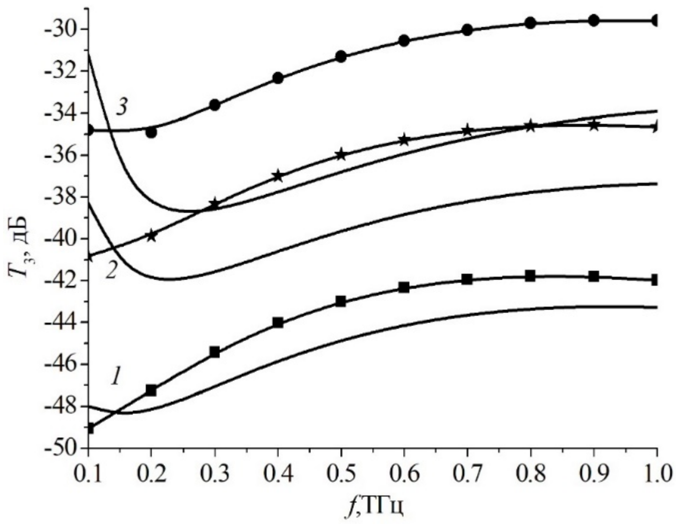


Рис. 2.3 Оценка погрешности метода возмущения (кривые с символами) в сравнении со строгим методом Ньютона (сплошные) при расчете нормированной мощности ГТГ. Кривая 1 - $\delta \approx 0.1$, 2 – $\delta \approx 0.25$, $3 - \delta \approx 0.5$ [126].

При фиксированных параметрах графена *T*, μ_c, τ считая $\sigma^{(3)}, \sigma^{(1)}$ известными, из (2.29) очевидно, что значительное влияние на погрешность оказывает амплитуда падающего поля $E^{лин}$. Она растет при увеличении $E^{лин}$ и может достигать пяти децибел (кривые *3* рис. 2.3.). Значения коэффициента прохождения третьей гармоники T_3 нормированы на мощность падающей волны.

Несмотря на завышенные уровни генерируемого нелинейного поля, качественное поведение радиофизических параметров ДРГ остается неизменным, однако при расчетах вблизи частот резонанса ППП (когда поле вблизи графеновых лент сверхлокализованно) расхождение необходимо учитывать.

2.2.4 *Оценка времени счета*

Для оценки выигрыша во времени счета проведено сравнение с данными, представленными в работе [34]. Как отмечают авторы, моделирование спектров ГТГ методом конечных разностей во временной области на четырехъядерном процессоре P4 Core (TM)2 с тактовой частотой 3 ГГц и 8 ГБ оперативной памяти заняло 260 минут, линейных спектров – 70 минут (20 частотных точек). Структура одномерной элементарной ячейки представлена на рис. 2.4. Период – 10 мкм, ширина ленты 1.8 мкм

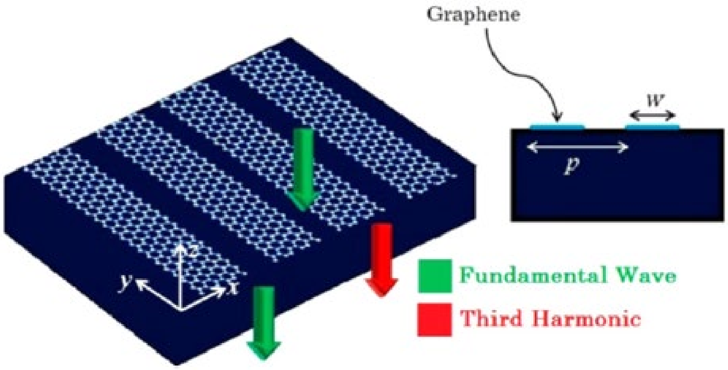


Рис. 2.4 Структура элементарной ячейки ДРГ из [34].

Расчет такой же структуры разработанным в данной диссертационной работе программным обеспечением занимает время менее секунды (20 частотных точек) или 3 секунды (200 частотных точек) на компьютере со схожими характеристиками. Количество базисных функций в разложении тока – 8, пространственных гармоник – 80. При таком выборе удовлетворяются условия сходимости решения.

Расчет двумерной решетки с одной графеновой лентой $N = 1$ в элементарной ячейке составляет 20 секунд (20 частотных точек). При увеличении количества лент время увеличивается пропорционально N^2. От количества разделительных диэлектрических слоев зависимость слабая. Таким образом выигрыш во времени счета достигает нескольких порядков.

Выводы

В настоящей главе решена нелинейная задача дифракции плоской монохроматической ЭМВ на бесконечной ДРГ. Представленный алгоритм содержит два основных этапа – решение задачи дифракции в линейном режиме и нахождение поля на утроенной и комбинационных частотах с использованием метода возмущения (нелинейный режим).

На первом этапе с использованием ИГУ для графеновых лент решена линейная задача дифракции - нахождение поля, рассеянного ДРГ в ближней и дальней зоне. Вначале решена задача нахождения внешнего поля - поля в многослойном диэлектрике без графеновых лент. Получена рекуррентная схема вычисления коэффициентов для каждого слоя. Для нахождения поля, рассеянного лентами, векторы Герца раскладываются в ряд Флоке по пространственным гармоникам. Искомые коэффициенты рядов выражаются через ток на лентах. На этапе удовлетворения ИГУ для электрического поля вблизи графеновых лент получена система ПСУ относительно плотности токов на лентах. В качестве базисных функций в разложении тока использованы полиномы Лежандра и Гегенбауэра. Такой выбор обусловлен учетом особенностей распределения тока на прямоугольных графеновых лентах. Полученные уравнения решены методом Галеркина. По найденным коэффициентам ряда для векторов Герца, вычислено поле, рассеянное лентами и всей ДРГ. Рассмотрен алгоритм сведения задачи дифракции на двумерной ДРГ к одномерному случаю.

Проведена верификация результатов расчета представленной математической модели линейной дифракции, использующей ИГУ, путем сравнения с результатами расчетов методом ОИДУ. Получено практически полное совпадение с методом ОИДУ для одномерной и двумерной ДРГ.

На втором этапе с использованием метода возмущения и поля, полученного на первом этапе (в линейном режиме) решена нелинейная задача дифракции - нахождение поля на утроенной частотной гармонике при падении одной ЭМВ и комбинационных частотах в задаче смешения двух ЭМВ, одна из которой является мощной волной накачки, другая – сигнальной волной меньшей амплитуды. На этапе удовлетворения ИГУ учтена нелинейная проводимость третьего порядка графена. По аналогии с алгоритмом решения линейной задачи найдено поле, рассеянное ДРГ на утроенной и комбинационных частотах.

Оценка результатов в нелинейном режиме приведена в виде анализа погрешности метода возмущения, который дает завышенный уровень мощности генерируемых волн, однако качественного влияния на радиофизические параметры графеновых ДР нет.

ГЛАВА 3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЛАЗМОННЫХ УСТРОЙСТВ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА В ТГЦ И ИК ДИАПАЗОНЕ

Представленная в главе 2 математическая модель запрограммирована в среде MS Visual Studio на языке C/C++. Разработанный пакет моделирования электродинамических задач дифракции предоставляет широкие возможности моделирования задач линейной и нелинейной дифракции на основе дифракционных решеток [127A-150A], элементами которых могут являться импедансные, идеально проводящие и ленты из графена. Имеется возможность изменять:

- частотный диапазон;
- шаг перестройки (как по частоте, так и по длине волны);
- углы плоскости падения волн (в случае падения двух ЭМВ в задаче смешения углы меняются одновременно);
- периодичность решеток (раздельно по обеим осям),
- количество диэлектрических слоев и их параметры (показатель преломления и толщина);
- количество графеновых лент и их параметры (размеры, химический потенциал, время релаксации);
- формулы для линейной и нелинейной проводимости графена;
- материал лент;
- мощность волны накачки.

На основе разработанного пакета программ исследованы линейные и нелинейные спектры ДРГ и показаны способы оптимизации характеристик в ТГц и ИК диапазоне с целью усиления взаимодействия с внешним полем в линейном режиме и увеличения уровня генерации на частоте ТГ и комбинационных частотах.

3.1 Линейный режим

Исследуется многослойная структура, содержащая графеновые ленты, элементарная ячейка которой представлена на рис. 3.1. Она состоит из прямоугольной графеновой ленты размером $l \times w$, которая разделена с полубесконечной подложкой Al_2O_3 (n = 1.77), диэлектрическим слоем SiO_2 (толщиной d с показателем преломления n = 1.45). Параметры графеновых лент там, где они отдельно не указаны – фиксированные: T = 300 K, τ = 1 пс, μ_c = 0.35 эВ. Периоды элементарных ячеек - d_x, d_y по осям x, y.

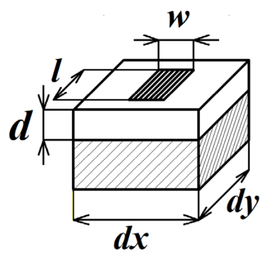
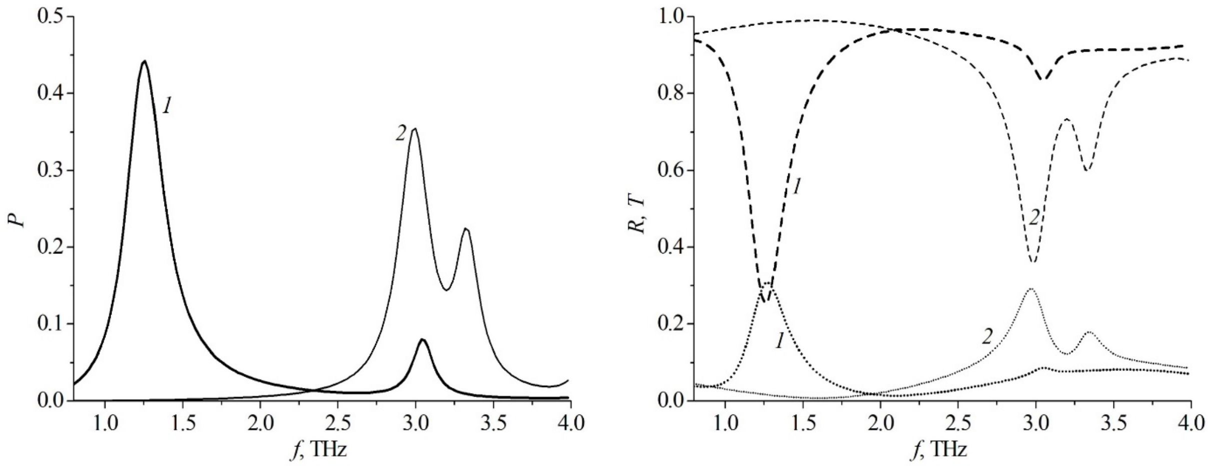


Рис. 3.1 Элементарная ячейка ДРГ.

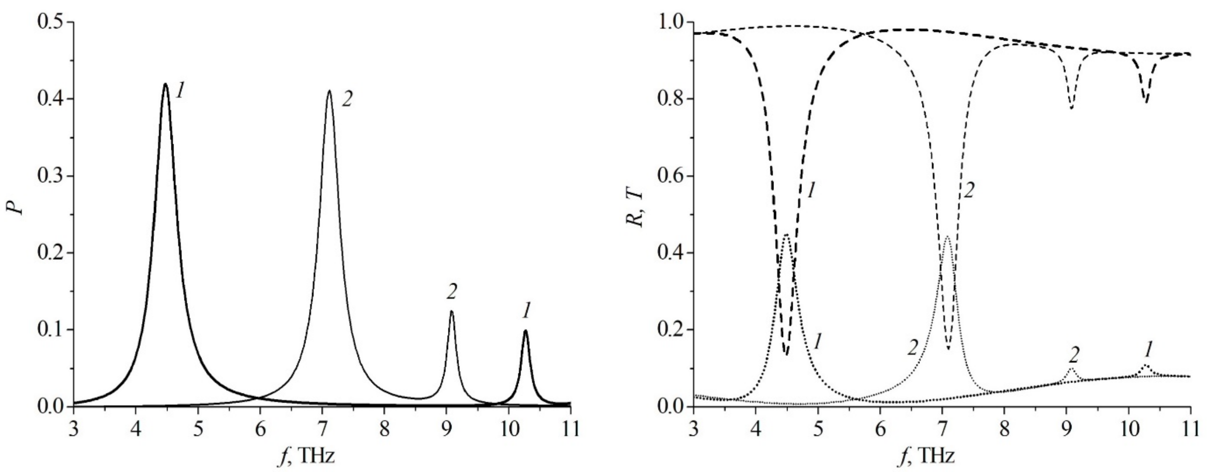
Здесь и далее полагаем, что возможны 2 случая поляризации падающих волн: s-поляризация (касательная составляющая электрического поля направлена вдоль длинной стороны l графеновой ленты) и p-поляризация (касательная составляющая электрического поля направлена вдоль узкой стороны w графеновой ленты). Рассматривается случай нормального падения ЭМВ.

При расчетах линейных спектров учитывается только линейная проводимость графена $\sigma^{(1)}$. ТГц до ИК спектры (по мощности) отражения R, пропускания T и поглощения (потерь) $P = 1 - R - T$ падающей ЭМВ от для трёх конфигураций ДРГ с различными геометрическими размерами элементарной ячейки и графеновых лент приведены на рис. 3.2 - 3.4. Для всех трёх конфигураций обнаружены резонансные области, т.е. удовлетворяются условия возбуждения стоячих ППП ($\mathrm{Re}\,\varepsilon_{gr} < 0$, где ε_{gr} - эквивалентная диэлектрическая проницаемость) в диапазоне от ТГц до ближнего ИК. В этих областях происходит экстремальное увеличение поля вблизи графеновых лент, значительно увеличивается коэффициент поглощения P и отражения R и уменьшается коэффициент прохождения T (3.2 - 3.4). Резонансы определяются плазмонными модами в графеновых лентах конечной длины и зависят от поляризации падающей волны. При s-поляризации (резонансе тока вдоль длинной стороны лент) резонансные частоты в большей степени разнесены по частоте, чем для p-поляризации.



(а) (б)

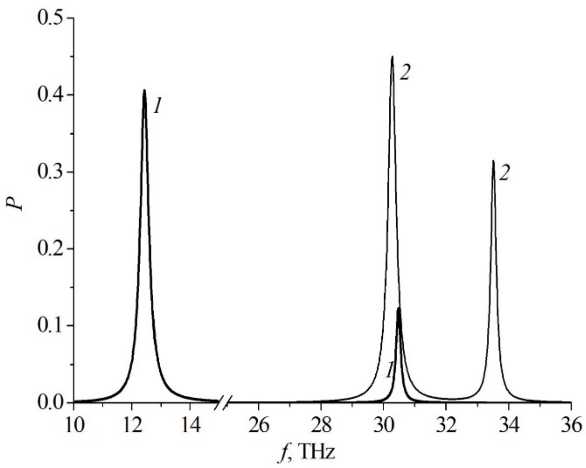
Рис. 3.2 ТГЦ спектры поглощения P (сплошные линии), отражения R (пунктирные линии) и прохождения T (штриховые линии). Параметры ДРГ: $w \times l = 8 \times 25$ мкм^2, $d_x = d_y = 35$ мкм, $d = 30$ мкм. Линии (*1*) - *s*-, (*2*) - *p*-поляризация.



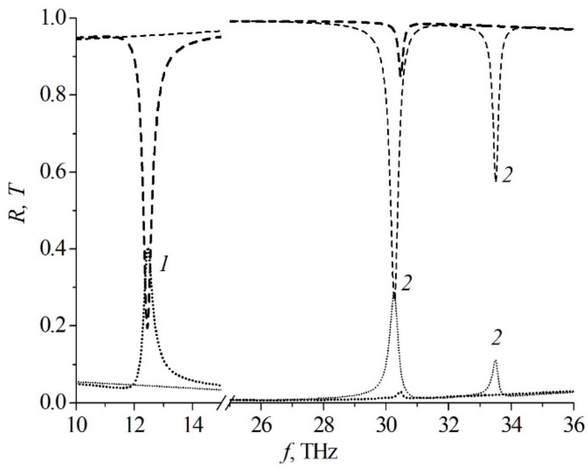
(а) (б)

Рис. 3.3 ТГЦ спектры поглощения P (сплошные линии), отражения R (пунктирные линии) и прохождения T (штриховые линии). Параметры ДРГ: $w \times l = 1.4 \times 2.5$ мкм^2, $d_x = d_y = 3.5$ мкм, $d = 10$ мкм. Линии (*1*) - *s*-, (*2*) - *p*-поляризация.

Для *s*-поляризации ЭМВ первый пик поглощения соответствует резонансу тока основной моды ППП (кривые *1*, стоячая волна вдоль длины *l* лент). При *p*-поляризации ЭМВ устанавливается резонанс тока вдоль ширины *w* ленты (кривые *2*,), поэтому резонансная частота выше. Спектры могут содержать несколько резонансов высших мод ППП (рис. 3.2 - 3.4).



(а)



(б)

Рис. 3.4 ИК спектры поглощения P (сплошные линии), отражения R (пунктирные линии) и прохождения T (штриховые линии). Параметры ДРГ (рис.1): $w \times l = 80 \times 250$ нм^2, $d_x = d_y = 300$ нм, $d = 2$ мкм. Линии (*1*) - *s*-, (*2*) - *p*-поляризация.

Таким образом, на границе раздела графеновые ленты - диэлектрик возможно существование ППП в диапазоне от ТГЦ до ИК, о чем говорят резонансы коэффициентов рассеяния () поля ЭМВ. При этом длина волны ППП меньше, длины ЭМВ в вакууме. Поле на поверхности графена ограничено гораздо сильнее, чем внутри диэлектрика и значительно возрастает на резонансных частотах.

3.1.1 Широкополосные ТГц поглотители

Представленные выше расчёты показывают, что ДРГ могут стать перспективной платформой для моделирования поглотителей и поляризаторов в ТГц диапазоне частот, поскольку на низких частотах наблюдается максимальное поглощение (рис. 3.2). В результате анализа актуальных работ, посвященным поглотителям (глава 1) можно выделить способы повышения коэффициента поглощения и расширения полосы – применение нескольких лент, использование сплошных слоев графена и увеличения количества слоев графен – диэлектрик. Для повышения ширины полосы максимального поглощения предлагается располагать на верхнем слое несколько лент графена с близкими, но различающимися геометрическими размерами. Структура многослойной элементарной ячейки предлагаемых поглотителей (рис. 3.5) имеет девять чередующих слоев сплошного графена и диэлектрика, сверху расположены графеновые ленты (поз. *1*) ширины w и разной длины - l_1, l_2, l_3. Для диэлектрика n = 1.77, подложки - 1.45. Исследование проведено двумя способами – с использованием разработанной модели с ИГУ и ОИДУ.

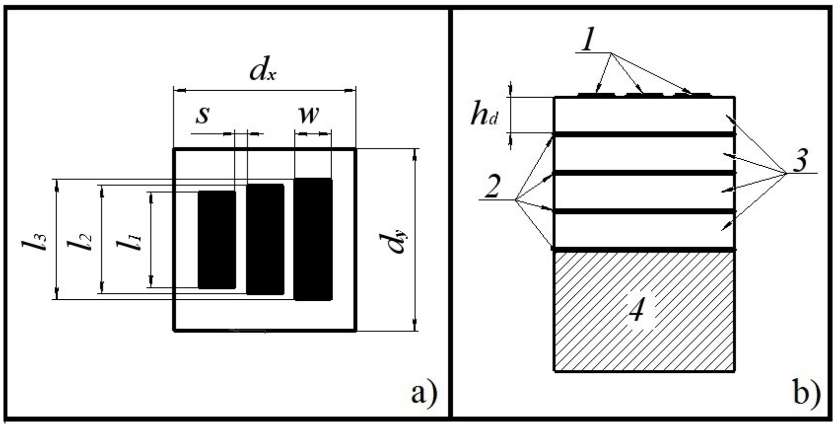


Рис. 3.5 Структура ТГц поглотителя на основе ДРГ. a) Верхний слой, b) в разрезе. *1* – графеновые ленты с шириной w и длинами l_1, l_2, l_3,; s – зазор; *2* –сплошной слой графена; *3* - разделительные диэлектрики толщиной h_d; *4* – полубесконечная подложка.

При s - поляризации ЭМВ (вектор электрического поля вдоль l) возникает резонанс ППП и увеличение тока, протекающего вдоль графеновых лент, что проявляется в значительном увеличении коэффициента поглощения поля ЭМВ (рис. 3.6). При этом резонансная частота поглотителя определяется периодом, размерами лент и химическим потенциалом графена μ_c. Наблюдается значительная частотная перестройка области максимального коэффициента поглощения при изменении μ_c. Близко расположенные резонансы, соответствующие лентам близких размеров, сливаются в один, поглощающий более 90% падающей энергии с относительной шириной порядка 20%.

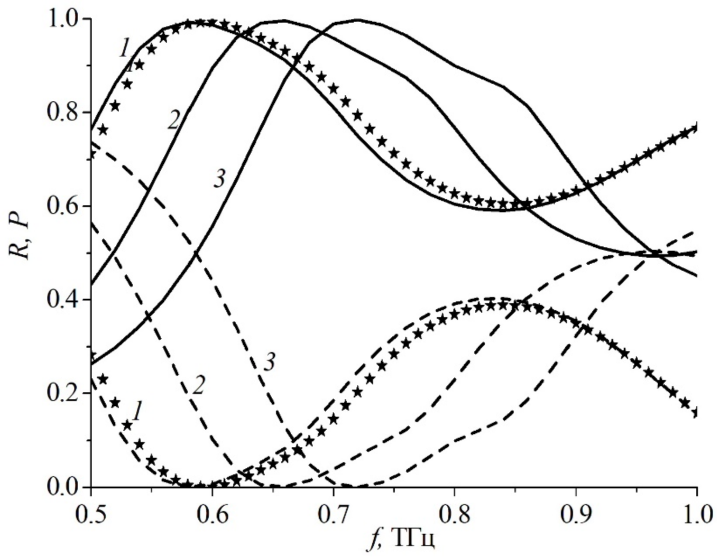


Рис 3.6 Широкополосные спектры поглощения P_s (сплошные кривые) и отражения R_s (штриховые) ТГц поглотителей на основе ДРГ при различные значениях химического потенциала μ_c, s – поляризация. $d_x = d_y = 70$ мкм, $w = 15$ мкм, $l_1 = 50$, $l_2 = 4$, $l_3 = 40$ мкм, зазор $s = 5$ мкм. Кривые (*1*) $\mu_c = 0.25$ эВ, $h_d = 25$ мкм; (*2*) $\mu_c = 0.35$ эВ, $h_d = 23$ мкм; (*3*) $\mu_c = 0.4$ эВ, $h_d = 20$ мкм. Сплошные кривые – ОИДУ, символы – ИГУ.

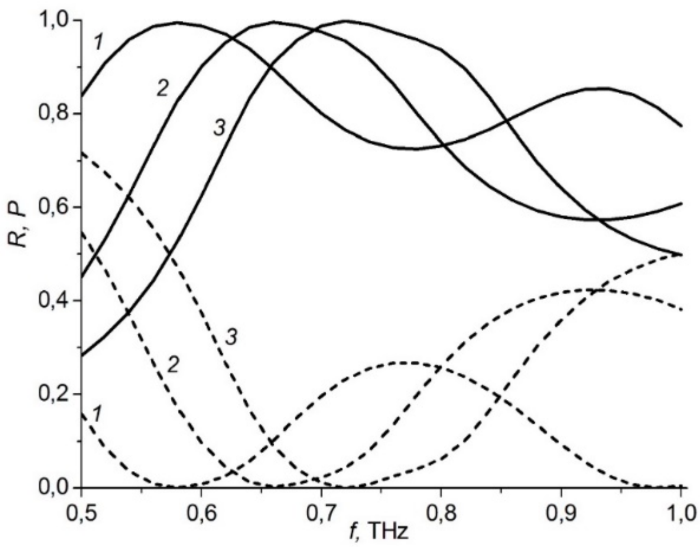


Рис. 3.7 Спектры поглощения P_s (сплошные) и отражения R_s (штриховые) ТГц поглотителя с уменьшенной шириной лент. $d_x = d_y = 70$ мкм, $w = 10$ мкм, $l_1 = 50$, $l_2 = 45$, $l_3 = 40$ мкм, зазор $s = 5$ мкм. Кривые (*1*) $\mu_c = 0.25$ эВ, $h_d = 30$ мкм; (*2*) $\mu_c = 0.35$ эВ, $h_d = 25$ мкм; (*3*) $\mu_c = 0.4$ эВ, $h_d = 23$ мкм.

Изменение ширины лент (остальные размеры фиксированы) приводит к сдвигу резонансной частота изменяется и уменьшению поглощения. С целью получения полного поглощения были изменены толщины дилектриков h_d (рис. 3.7). В сумме результате произведенных изменения частотного сдвига максимума поглощения не происходит (при сравнении с рис. 3.4б), но при минимальном значении μ_c проявляется дополнительный широкий резонанс поглощения.

При прямоугольной форме графеновой ленты радиофизические свойства ДРГ будут отличаться для *s* - и *p* – поляризованной волны. Так при *s* - поляризации (рис. 3.6, 3.7) и *p* - поляризации (рис. 3.8) имеется частотное разнесение резонансов. Обращая внимание на коэффициенты отражения, можно заметить, что R_s (*s* – поляризация) практически равен к нулю (рис. 3.6, 3.7), при этом значение R_p (*p*-поляризации) превышает 60% (рис. 3.8). Отсюда возникает еще одно применение представленной структур – в качестве поляризатора с развязкой по коэффициенту отражения $N = 10\lg(R_p/R_s)$, которая в данной конфигурации превышает значение 20 дБ.

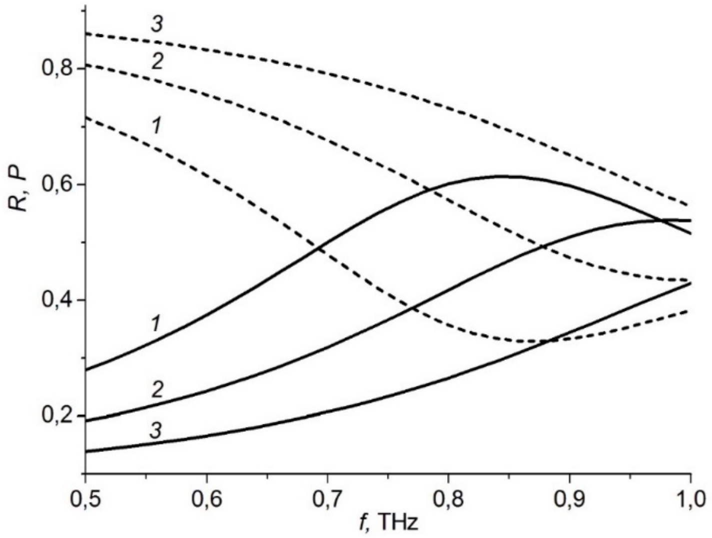


Рис. 3.8 Спектры поглощения P_p (сплошные) и отражения R_p (штриховые) ЭМВ p-поляризации. Кривые (1) μ_c = 0.25 эВ, h_d = 25 мкм; (2) μ_c = 0.35 эВ, h_d = 23 мкм; (3) μ_c = 0.4 эВ, h_d = 20 мкм.

При исследовании влияния угла падания ЭМВ на спектры поглощения и развязки, можно сделать вывод, что предложенные ТГц поглотители и поляризаторы, обладают хорошей поляризационной (рис. 3.9б), и угловой (рис. 3.9а) нечувствительностью (полное поглощение в диапазоне углов падения от минус 30° до плюс 30° рис. 3.9).

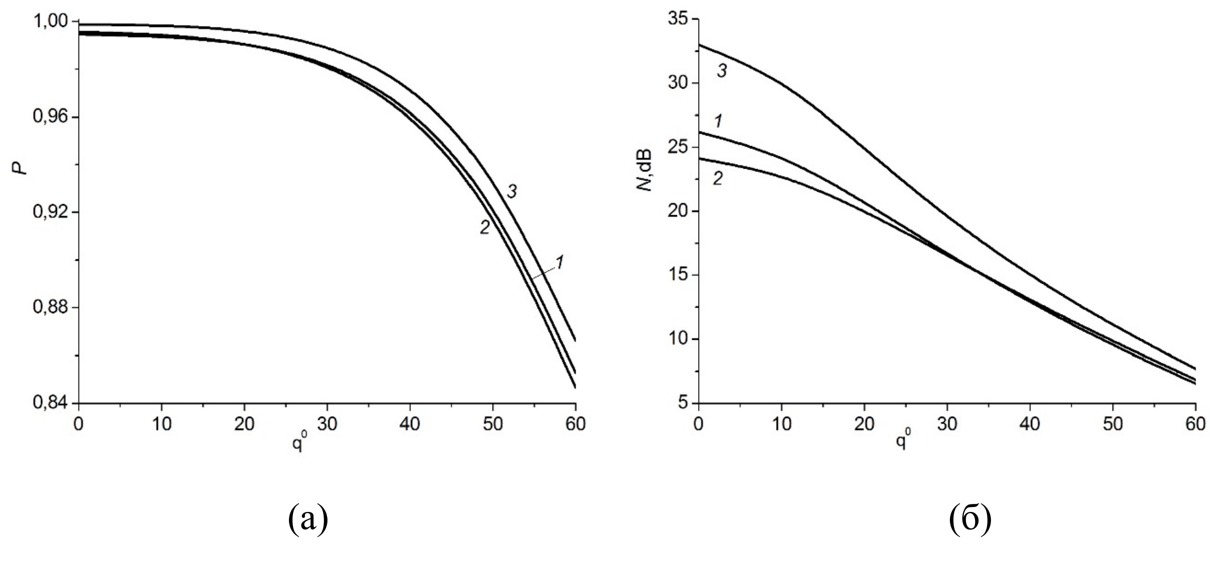


Рис. 3.9 Влияние угла падения *s* – поляризованной ЭМВ на (а) поглощающие P_s и (б) поляризационные свойства *N* ДРГ при разных значениях μ_c. Остальные параметры как на рис. 3.8.

На рис. 3.10-3.12 представлены спектры ДРГ с увеличенными и уменьшенными в два раза размерами. Из-за сильной частотной дисперсии линейной проводимости графена $\sigma^{(1)}$, частотный сдвиг резонанса не пропорционален изменению размеров геометрии. Результаты (рис. 3.10-3.12) показывают, что при увеличении химического потенциала (уровня Ферми) и уменьшении периода ДРГ, резонансные частоты ППП сдвигаются вверх. При этом добротность резонанса (и величина поглощения) увеличивается при уменьшении химического потенциала.

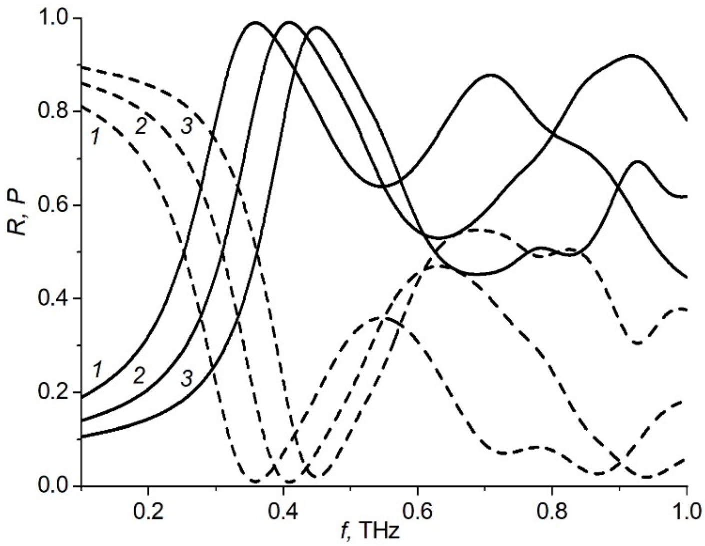


Рис. 3.10 Спектры поглощения P_p (сплошные) и отражения R_p (штриховые) ЭМВ p-поляризации для ДРГ с увеличенной геометрией. $d_x = d_y = 140$ мкм, $w = 30$ мкм, $l_1 = 100$, $l_2 = 90$, $l_3 = 80$ мкм, зазор $s = 10$ мкм. Кривые (*1*) $\mu_c = 0.25$ эВ, $h_d = 50$ мкм; (*2*) $\mu_c = 0.35$ эВ, $h_d = 40$ мкм; (*3*) $\mu_c = 0.4$ эВ, $h_d = 30$ мкм.

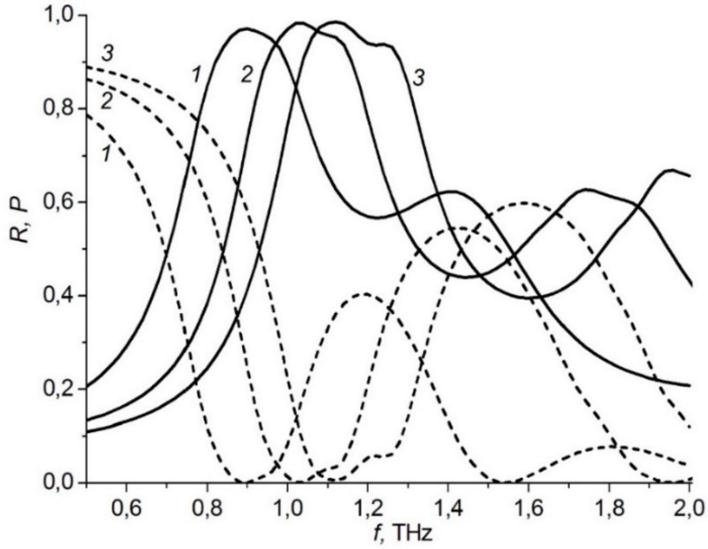


Рис. 3.11 Спектры поглощения P_p (сплошные) и отражения R_p (штриховые) ЭМВ p-поляризации для ДРГ с уменьшенной геометрией. $d_x = d_y = 35$ мкм, $w = 7.5$ мкм, $l_1 = 25$, $l_2 = 22.5$, $l_3 = 20$ мкм, зазор $s = 2.5$ мкм. Кривые (*1*) $\mu_c = 0.25$ эВ, $h_d = 15$ мкм; (*2*) $\mu_c = 0.35$ эВ, $h_d = 12.5$ мкм; (*3*) $\mu_c = 0.4$ эВ, $h_d = 12.5$ мкм.

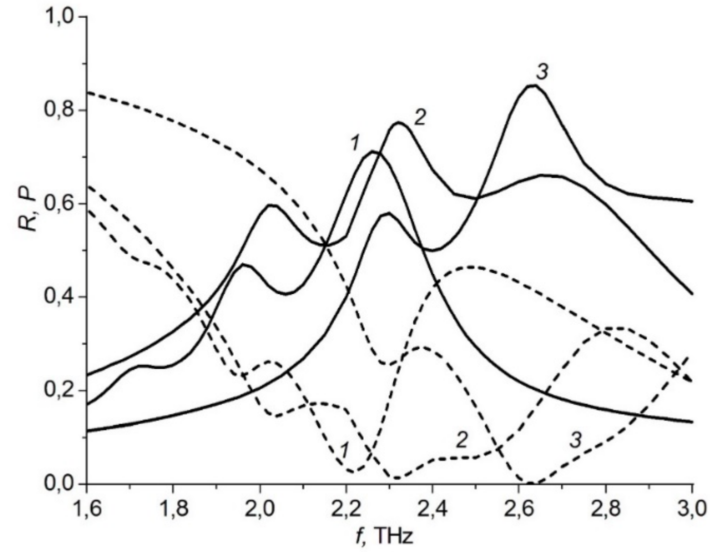


Рис. 3.12 Спектры поглощения P_p (сплошные) и отражения R_p (штриховые) ЭМВ p-поляризации для ДРГ с уменьшенной геометрией. $d_x = d_y = 7$ мкм, $w = 1$ мкм, $l_1 = 5$, $l_2 = 4.5$, $l_3 = 4$ мкм, зазор $s = 0.5$ мкм. Кривые (*1*) $\mu_c = 0.25$ эВ, $h_d = 13$ мкм; (*2*) $\mu_c = 0.35$ эВ, $h_d = 5$ мкм; (*3*) $\mu_c = 0.4$ эВ, $h_d = 5$ мкм.

Из рис. 3.10, 3.12 видно, когда частота падающей ЭМВ выше 1 ТГц, полного поглощения (100%) не наблюдается. Выше этих частот происходит значительное снижение действительной части проводимости (рис. 1.5).

Таким образом резонансы ППП в поглотителях на основе ДРГ значительно увеличивают взаимодействие поля ЭМВ с графеном. Величина взаимодействия управляется химическим потенциалом графена и зависит от параметров окружающего диэлектрика. Управление резонансной частотой таких поглотителей и поляризаторов может управляться как химическим потенциалом, так и выбором геометрических параметров элементарной ячейки – периодом ДР и размером графеновых лент.

3.2 Нелинейный режим

На основании результатов, полученных в предыдущем разделе, можно предположить, что резонансные свойства ДРГ могут использованы для моделирования нелинейных процессов на частотах, близких резонансным основной и высших мод ППП в графеновых лентах. Для решения нелинейной задачи дифракции использован метод возмущения и поле рассеянное ДР в линейном режиме. Поставлены задачи исследовать характеристики ДР и выявить способы увеличения генерируемой мощности.

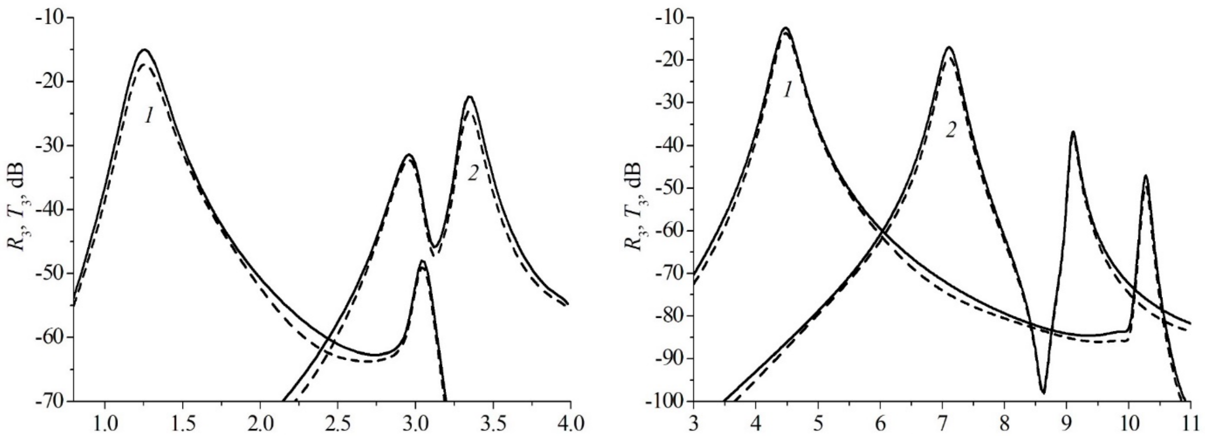
3.2.1 Генерация третьей гармоники

При исследовании рассеяния ЭМВ на ДРГ различных размеров в линейном режима были продемонстрированы многомодовые резонансные спектры, на основании которых проведено моделирование широкополосных ТГц поглотителей и поляризаторов. Для поглотителей важно получить полное поглощение энергии, однако на высоких частотах этого получить не удалось. Несмотря на это, высокодобротные резонансы наблюдаются и ИК диапазоне, делая перспективными плазмонные ДРГ для конструирования нелинейных устройств.

На первом этапе проведено численное моделирование эффекта ГТГ на двумерной ДРГ с одной лентой (параметры на рис. 3.2 - 3.4). При расчетах учтена нелинейная проводимость третьего порядка $\sigma^{(3)}$ по формуле Михайлова (1.10) для ГТГ в ТГц и ИК диапазонах частот. Рассчитаны нелинейные спектры T_3 и R_3 на частоте ТГ при нормальном к поверхности графена падении ЭМВ *s*- и *p* - поляризации. Спектрам T_3 соответствует направление излучения, совпадающее с направлением падающей ЭМВ, спектрам R_3 – обратное (отраженное) направление. Коэффициенты T_3, R_3 на рис. 3.13 – 3.14 и других спектрах определяются как

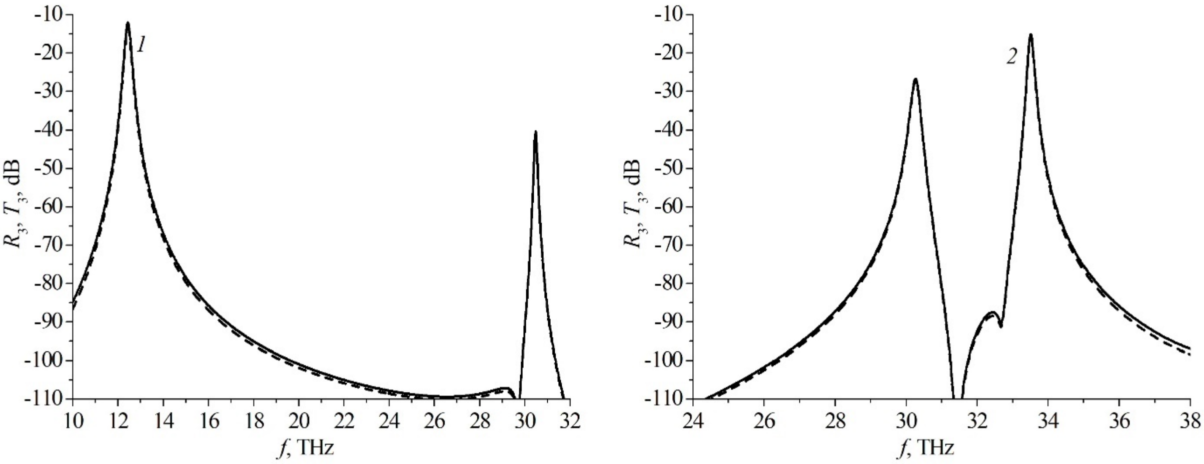
$$\left.\begin{aligned} R_3 &= \frac{P_{ГТГ}^{отр}}{P_0}, \\ T_3 &= \frac{P_{ГТГ}^{прош}}{P_0}, \end{aligned}\right\}$$

где $P_{ГТГ}^{отр}, P_{ГТГ}^{прош}$ - плотность мощности ГТГ в отраженном и прошедшем направлении, P_0 - плотность мощности падающей волны (в задаче смешения мощности волны накачки P_1), за исключением тех случаев, где нормировка осуществляется на соответствующий коэффициент в линейном режиме и это указано.



(а) (б)

Рис. 3.13 Спектры генерации ТГ ДРГ с параметрами из рис. 3.2 (а) и рис. 3.3 (б): T_3 (сплошные), R_3 (штриховые линии) направлении. Линии (*1*) - *s*-, (*2*) - *p*-поляризация. (а) P_0 = 10 мВт/мм^2, (б) P_0 = 0.002 мВт/мм^2.



(а) (б)

Рис. 3.14 Спектры ГТГ ДРГ с параметрами из рис. 3.4: в прямом T_3 (сплошные) и обратном R_3 (штриховые линии) направлении. Линии (*1*) *s*-, (*2*) *p*-поляризация, $P_1 = 10^{-7}$ мВт/мм^2.

Увеличение уровня ГТГ на несколько порядков наблюдается в условиях, когда частота падающей ЭМВ приближается к резонансной частоте ППП (основной и высших). Экстремальное усиление и локализация поля приводит значительному увеличению нелинейности ДРГ и уровню ГТГ. ДРГ демонстрируют данный эффект для всех (трех) конфигураций геометрических размеров в широком диапазоне ТГЦ и ИК частот.

3.2.2 Исследование влияния параметров решетки на линейные и нелинейные спектры

При моделировании ТГц поглотителей показано, что для плазмонных графеновых структур неприменим принцип масштабируемости. Следовательно, для настройки на заданную рабочую частоту приходится подбирать размеры элементов решетки. На резонансную частоту ДРГ, помимо параметров графена, также влияет периодичность расположения лент и их геометрические размеры. На локализованность поля вблизи графена, коэффициент поглощения оказывает влияние толщина разделительного диэлектрика. Поэтому исследование влияния и оптимизация этих параметров важны при моделировании высокоэффективных поглотителей, поляризаторов, генераторов ТГ и преобразователей частот.

Основные закономерности влияния параметров ДРГ на их электродинамические характеристики выявлены при исследовании генерации третьей гармоники и могут применяться для моделирования других устройств на основе графена.

3.2.2.1 Положение графеновых лент и эффект многослойности

Как было отмечено ранее, запрограммированная математическая модель позволяет моделировать многоэлементные и многослойные плазмонные решетки. Количество лент в одном слое и их координаты - произвольные. Кроме того, они могут лежать как на верхнем, так и на внутренних слоях многослойного диэлектрика. Отсюда появляется возможность дополнительного пространственного перераспределения дифракционного поля. При синфазной интерференции можно добиться максимального взаимодействия поля и элементов ДРГ.

На рис. 3.15 представлены элементарные ячейки исследуемых ДРГ. Ленты расположены как в одном (№*1,2*), так и в разных слоях (№*3,4*). Параметры графена: $T = 300$ K, $\tau = 1$ пс, $\mu_c = 0.35$ эВ.

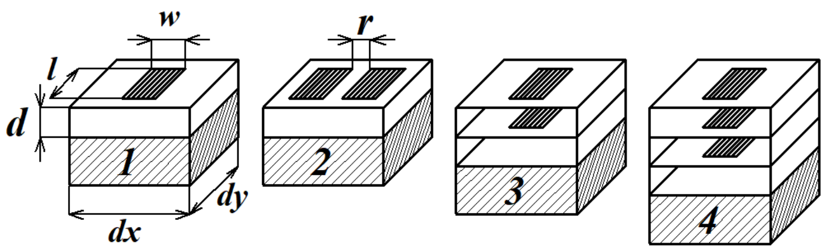


Рис. 3.15 Элементарные ячейки исследуемых ДРГ.

Спектры коэффициентов отражения R, пропускания T и поглощения P падающей ЭМВ в ТГц диапазоне для ДРГ с одной и двумя графеновыми (в одном слое и друг над другом) лентами приведены на рис. 3.16. Параметры ДРГ: $w \times l = 8 \times 25$ мкм^2, $d_x = d_y = 35$ мкм, $d = 30$ мкм, $r = 1$ мкм. На рис. 3.17 представлены результаты расчетов нелинейных спектров T_3 и R_3.

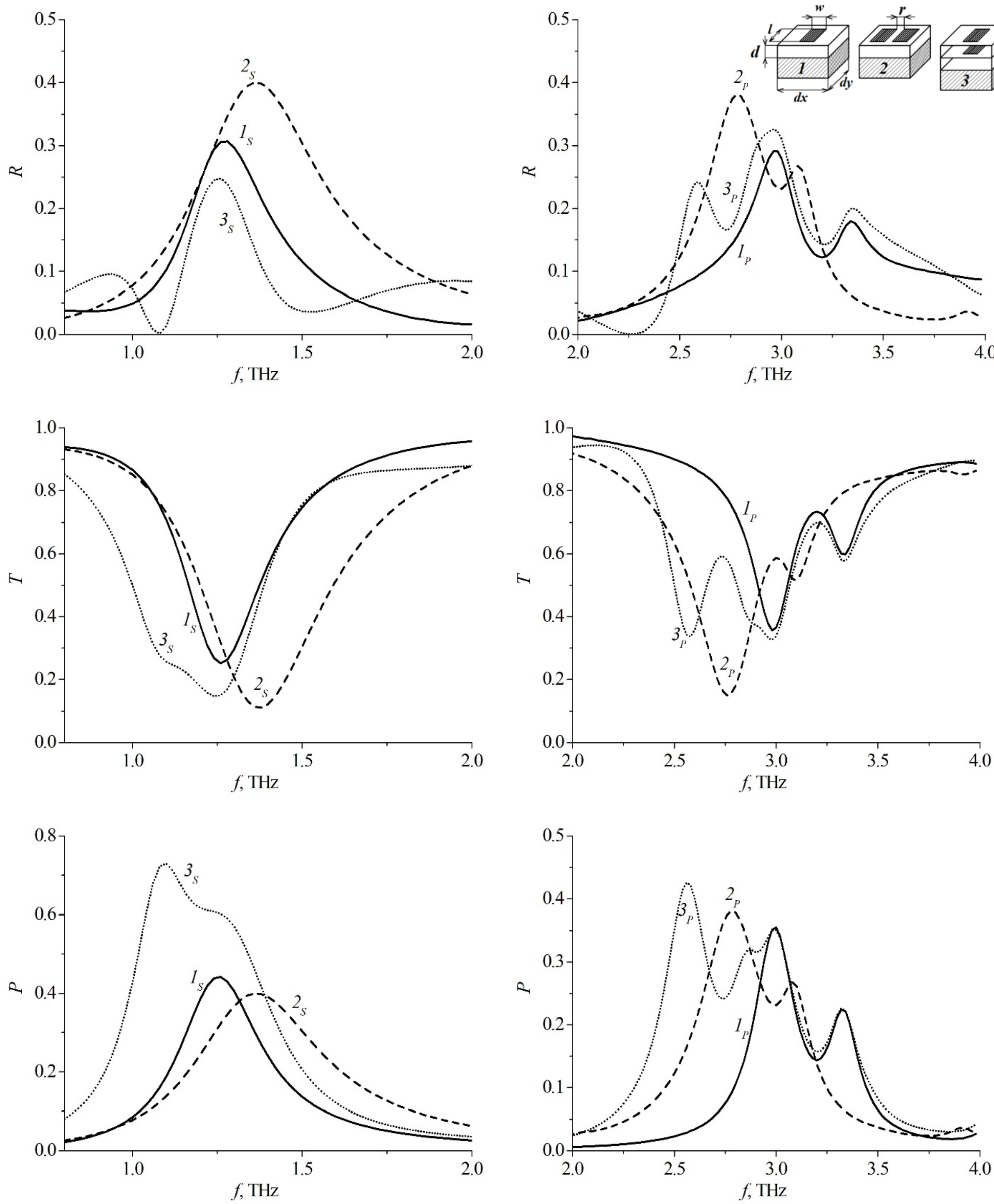
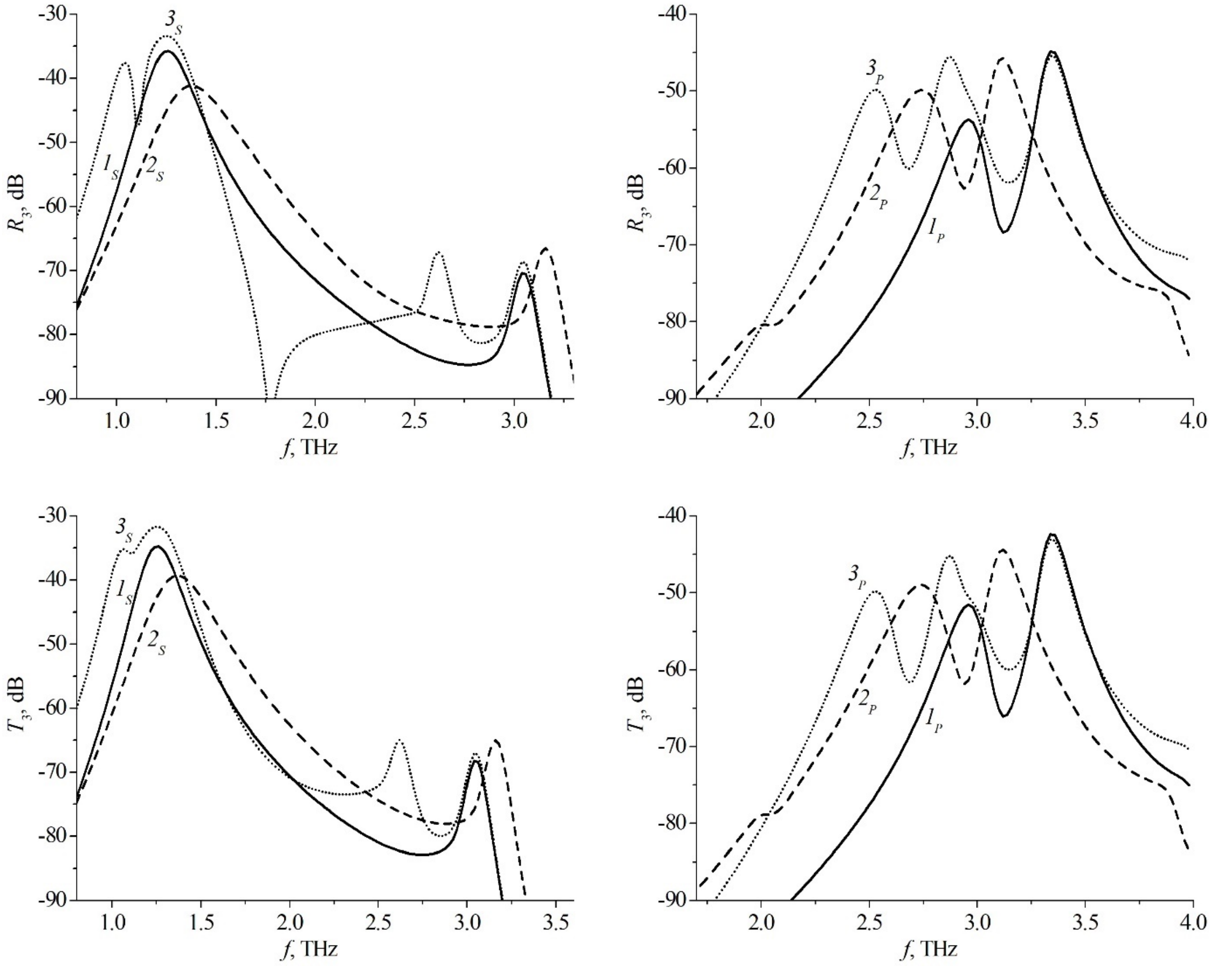


Рис. 3.16 ТГЦ линейные спектры отражения *R*, прохождения *T*, поглощения *P* ДРГ. Сплошные – конфигурация №*1*, штриховые - №*2*, пунктирные кривые - №*3* (рис. 3.15). Индексы указывают тип поляризации.

Рассмотрим подробно эффекты, возникающие при размещении двух лент рядом в одном слое. С уменьшением расстояния увеличивается связь между ними, при этом присутствует два эффекта. С одной стороны, при *s* – поляризации падающей волны устанавливается синфазный режим колебаний соседних лент, большая локализация поля ППП в подложке и в ленте, меньшая фазовая скорость ППП, и, как следствие, снижается резонансная частота. При *p* – поляризации – противофазный режим, меньшая локализация поля ППР в подложке и в ленте, большая скорость ППП и, как следствие, повышается резонансная частота. С другой стороны, из-за большой дисперсии поверхностной проводимости графена и, соответственно эффективного показателя преломления (рис. 1.9), увеличивается продольная компонента волнового вектора ППП (снижается длина волны). В сумме эти два эффекта приводят в случае *s*-поляризации к повышению частоты, в случае *p*-поляризации к снижению частоты (штриховые линии рис. 3.16.

Последующий анализ линейных спектров показывает, что для обоих типов поляризации возрастает коэффициент отражения *R*, и снижается коэффициент прохождения *T* (что может быть полезно для устройств, работающих в режиме отражения). В спектрах поглощения *P* при s-поляризации наблюдается расширение пиков и некоторое уменьшение величины, при *p*-поляризации - небольшое увеличение величины. Однако эффекта увеличения уровня ГТГ по сравнению с однослойной нет (рис. 3.17). Таким образом, конфигурация с расположением лент в одном слое может быть более выгодна для моделирования поглотителей, поляризаторов и других устройств, работающих в линейном режим, что подтверждается результатами моделирования, представленными в разделе 3.1.1.



(а) (б)

Рис. 3.17 Спектры нелинейного отражения R_3 (а) и прохождения T_3 (б) волн *s*- (кривые с индексом *s*) и *p*-поляризации (кривые с индексом *p*) для ДРГ на рис. 3.16. Сплошные кривые – конфигурация №*1*, штриховые - №*2*, пунктирные - №*3* (рис. 3.15).

Значительный эффект дает вертикальное расположение двух полосок друг над другом – увеличение коэффициента поглощения *P* и расширение пиков за счет появления дополнительных резонансов (рис. 3.16).

Это связано с тем, что графеновые ленты на поверхности и в глубине ДРГ имеют различные резонансные частоты. В нелинейных спектрах T_3, R_3 для обоих типов поляризации наблюдается как увеличение уровня ГТГ, так и расширение частотной области, где он максимален (рис. 3.17). Увеличение уровня ГТГ при увеличении количества слоев графена является результатом распределения носителей в нескольких слоях и приводит к более высокому общему уровню оптической проводимости. Таким образом, конфигурация с расположением лент в разных слоях может быть использована как для поглотителей, так и для моделирования генераторов ТГ и преобразователей частот.

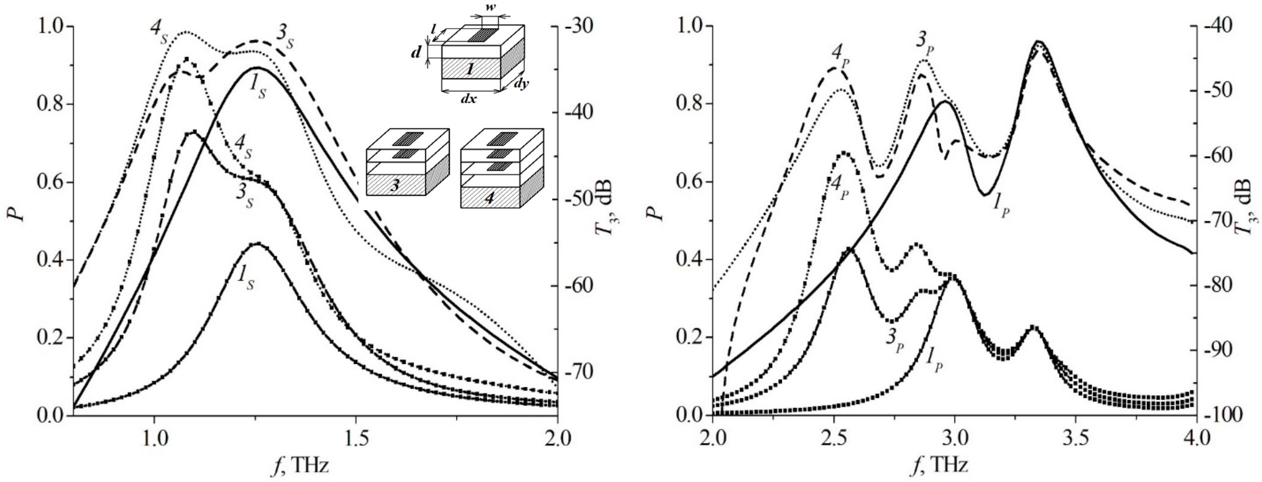


Рис. 3.18 Эффект увеличения числа слоев ДРГ. ТГЦ спектры поглощения P (линии с символами) и ГТГ Т3 (без символов). Номерам соответствует конфигурация ДРГ на вставке. Индексы указывают на тип поляризации.

При увеличении числа слоев графен-диэлектрик до трех коэффициент поглощения P падающего поля дополнительно увеличивается (рис. 3.18) и может достигать 90% и 60% для s- и p-поляризации соответственно. При этом уровень ГТГ дополнительно повышается. Дальнейшее увеличение числа слоев графен-диэлектрик (4 и более) слабо влияет на коэффициенты P, T_3 и R_3.

Выше было отмечено, что ленты, расположенные сверху и во внутреннем слое имеют разные резонансные частоты, что особенно заметно в ИК диапазоне (рис. 3.19). Пики поглощения выше частоты 26 ТГц соответствуют резонансам тока верхней ленты, ниже частоты 26 ТГц - внутренней ленты. В этом случае увеличение коэффициента поглощения P и уровня ГТГ не наблюдается (рис. 3.19) при увеличении числа слоев графен-диэлектрик.

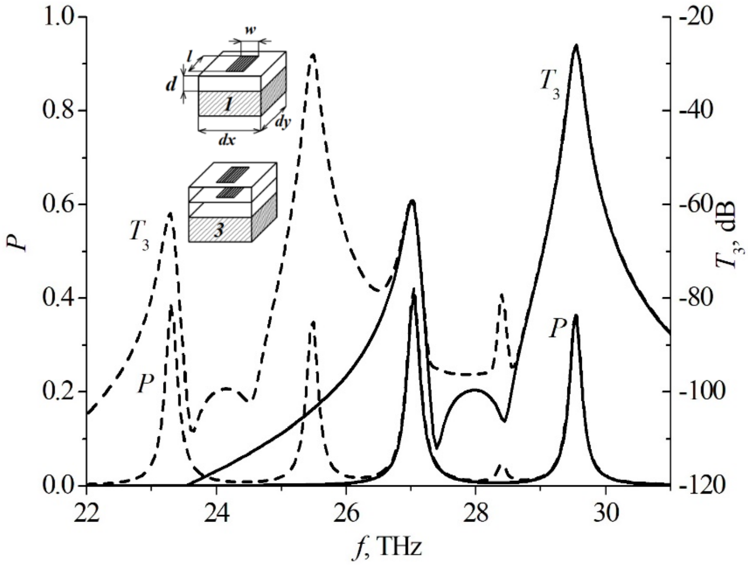


Рис. 3.19 Влияние положения графеновых лент. ИК спектры поглощения P и ГТГ T_3 ДРГ №*1* (сплошные кривые,) и №*3* (штриховые) рис. 3.15, p-поляризация. $w \times l = 100 \times 400$ нм^2, $d_x = d_y = 500$ нм, $d = 1$ мкм. $P_0 = 10^{-7}$ мВт/мм^2.

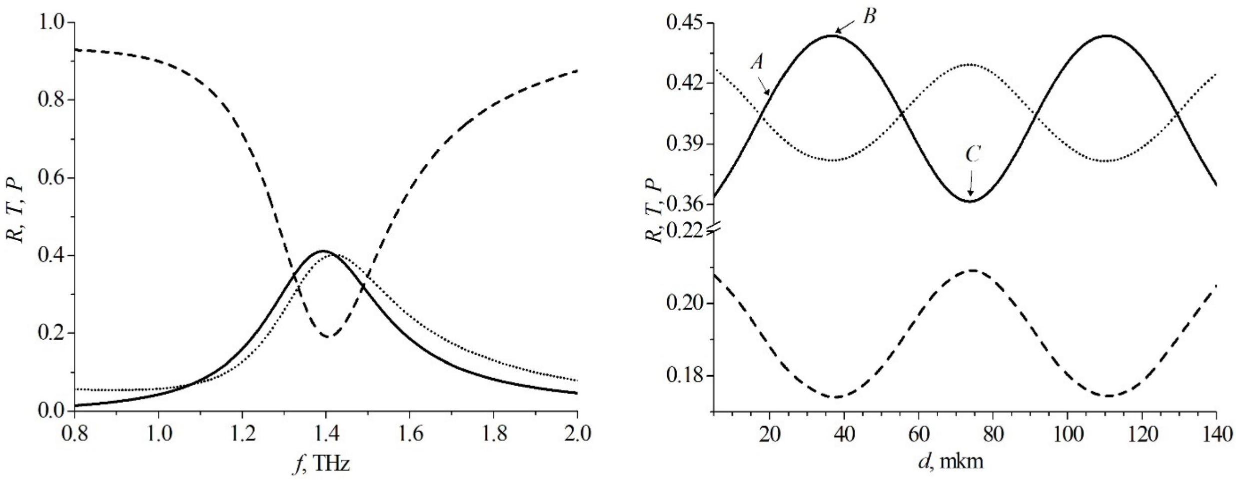
Выводы - в ТГц диапазоне частот при увеличении числа слоев графен-диэлектрик уровень ГТГ (излучаемой в прямом и обратном направлениях) и ширина максимума могут быть увеличены по сравнению с однослойными ДРГ. В ИК диапазоне (ДРГ с характерными размерами меньше микрометров) пики поглощения верхней и внутренней лент оказываются частотно разнесены и для повышения уровня необходимо изменять параметры одной из лент.

3.2.2.2 Оптимизация толщины диэлектрических слоев

Выше было показано, что в дополнение к типичным плазмонным эффектам, увеличить уровень ГТГ можно, добавляя дополнительные слои графен-диэлектрик. Однако при произвольном выборе толщины d разделительных диэлектриков, синфазность многократно отраженных волн от подложки и решеток графеновых лент не гарантируется. Поэтому можно предположить, что варьированием толщины d можно добиться эффекта стоячих волн, что приведет к увеличение электрического поля и уровню нелинейной ГТГ.

В нерезонансных условиях наоборот, нелинейный отклик ДРГ может быть снижен.

На рис. 3.20 представлены графики зависимости линейных коэффициентов *R, T, P* от частоты при фиксированной толщине диэлектрика d и от толщины диэлектрика d при при падении *s*-поляризованной ЭМВ на фиксированной частоте 1.4 ТГц. Параметры графена: $T = 300$ K, $\tau = 1$ пс, $\mu_c = 0.35$ эВ. Выбранная частота соответствует резонансу тока основной моды вдоль длинной стороны графеновой ленты l.



(а) (б)

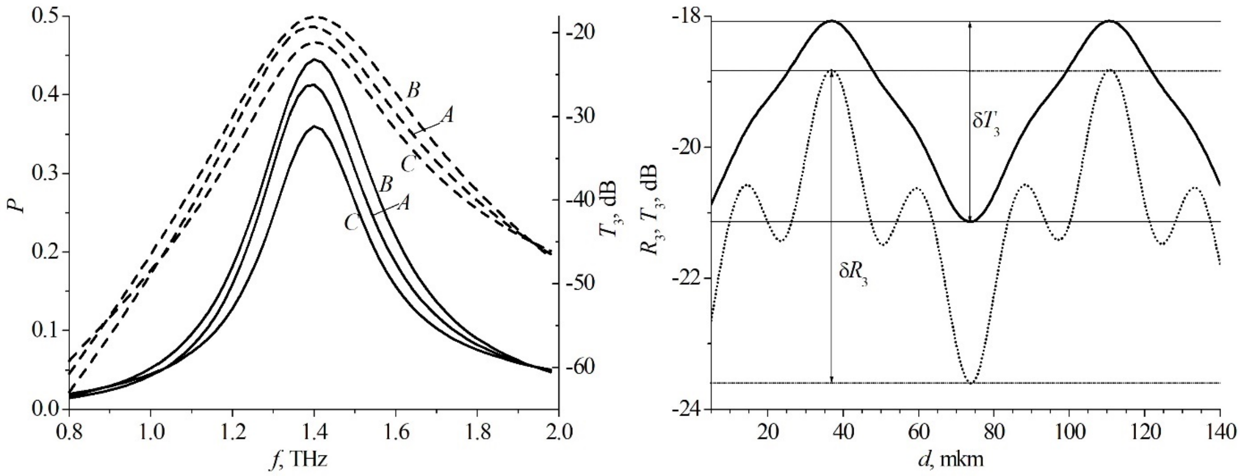
Рис. 3.20 Влияние толщины d диэлектрического слоя на спектры ДРГ №*1* на рис. 3.15. (а) ТГЦ спектры поглощения P (сплошные линии), отражения R (пунктирные) и прохождения T (штриховые) *s*-поляризованной ЭМВ. $w \times l = 7 \times 20$ мкм^2, $d_x = d_y = 25$ мкм, $d = 20$ мкм. (б) Зависимости *R, T, P* на частоте резонанса ППП.

Можно заметить, что существуют периодически расположенные максимумы и минимумы коэффициентов *R, T, P*. Максимумам P соответствует толщина согласующего диэлектрического слоя, кратная четвери резонансной длины волны $\lambda_{\text{рез}}$

$$d_{\text{Pmax}} = \text{m}^* \lambda_{\text{рез}} / 4n,$$

где n – показатель преломления диэлектрика, m = 1, 3, 5…. Для ДРГ с параметрами, указанными в подписи к рис. 3.20 рассчитанное значение $d_{\text{Pmax}} = \lambda_{\text{рез}} / 4n = 36.8$ мкм (точка *B*).

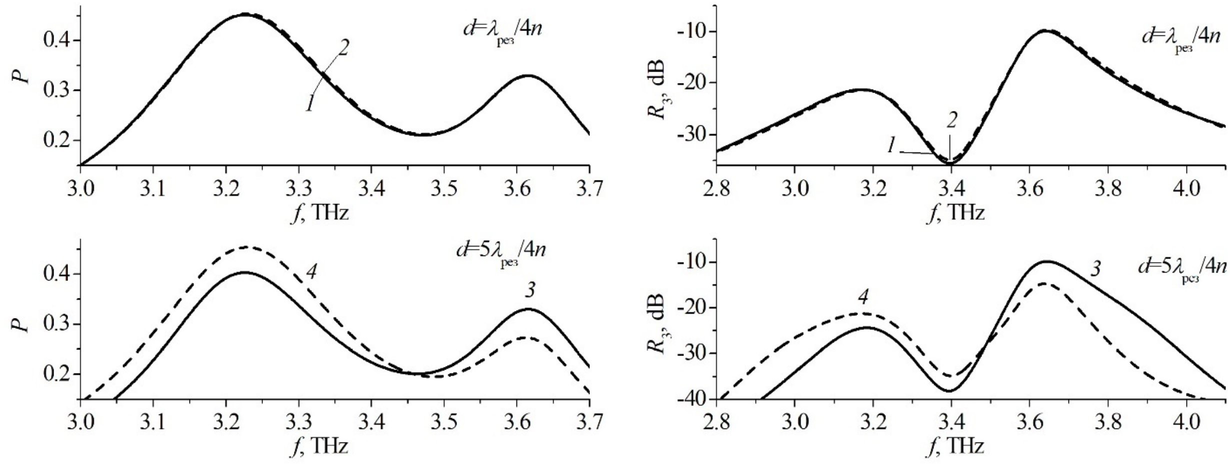
Для трех значений d = {20, 36.8, 73.6} мкм (точки *A,B,C* на графике коэффициента поглощения рис. 3.20б) на рис. 3.21а построены спектры коэффициента поглощения и уровня ГТГ, излучаемой в прямом направлении. Как видно из графика на рис. 3.21б, нелинейные коэффициенты T_3 и R_3 проявляют аналогичное *R, T, P* поведение и настройкой толщины диэлектрика можно получить увеличение/уменьшение уровня ГТГ ($\delta T_3 \sim 3.5$ и $\delta R_3 \sim 5$ дБ).



(а) (б)

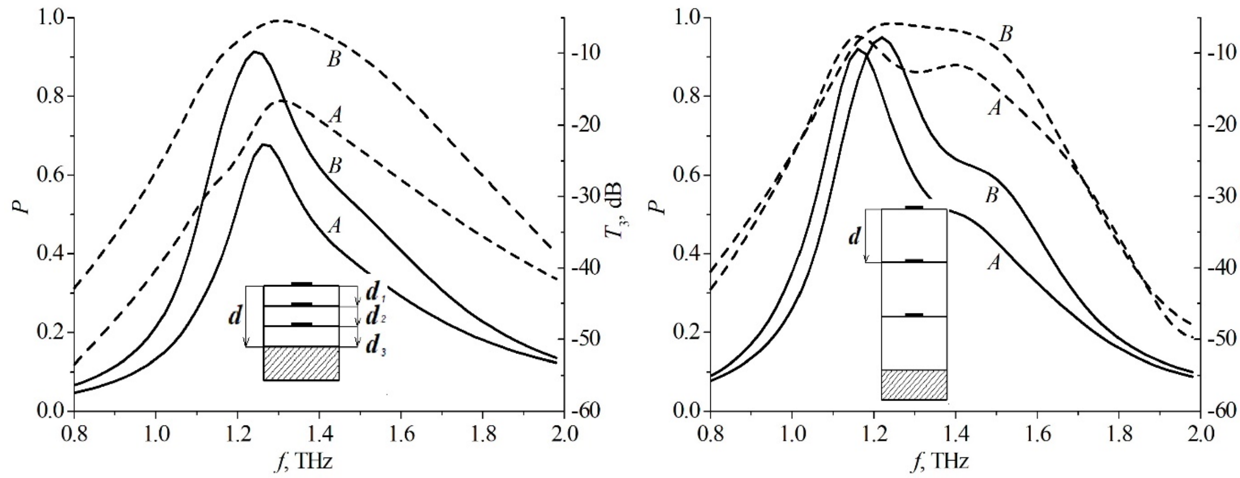
Рис. 3.21 Влияние толщины d диэлектрического слоя на спектры ДРГ параметрами на рис. 3.21 (а) P (сплошные линии), T_3 (штриховые), (*A*) d = 20 мкм, (*B*) 36.8 мкм, (*C*) 73.6 мкм. (б) R_3 (штриховая линия), T_3 (сплошная) вычислены частоте 1.36 ТГц, P_0 = 5 мВт/мм^2.

В случае, когда линейные спектры содержат несколько близко расположенных пиков (рис. 3.22), варьированием толщины d можно осуществлять частотную настройку и повышение уровня ГТГ на заданной резонансной частоте. Например, при р-поляризации падающей ЭМВ резонансным частотам 3.22 и 3.62 ТГц соответствует четвертьволновая толщина ($d_{\text{Pmax}} = \lambda_{\text{рез}} / 4n$) диэлектрика 16 и 14.3 мкм, соответственно. Однако, эффект влияния на коэффициент поглощения и уровень ГТГ проявляется слабо (кривые *1, 2* рис. 3.22). Но при пятикратном увеличения толщины диэлектрика $d_{\text{Pmax}} = 5\lambda_{\text{рез}}/4n$ (что соответствует значениям 71.4 и 80 мкм) увеличение коэффициента поглощения и уровня ГТГ уже значительное - до 5 дБ (рис. 3.22)



(а) (б)

Рис. 3.22 Эффект увеличения коэффициента поглощения P и уровня R_3 ГТГ при кратном $\lambda_{рез}/4$ увеличении толщины диэлектрика, p-поляризация. Кривые (*1,2*) (а) $d = \lambda_{рез}/4n$, (б) $d = 5\lambda_{рез}/4n$. Кривая (*1*) d = 14.3 мкм, (*2*) 16 мкм, (*3*) 71.4 мкм, (*4*) 80 мкм; $w \times l = 7\times 20$ мкм^2, $d_x = d_y = 25$ мкм.



а) б)

Рис. 3.23 Влияние конфигурации многослойных ДРГ с четвертьволновыми диэлектрическими слоями. ТГЦ спектры поглощения P (сплошные линии) и ГТГ T_3 (штриховые) ЭМВ s – поляризации. $w \times l = 7\times 20$ мкм^2, $d_x = d_y = 25$ мкм. (а) Кривые (*A*) $d_1 = d_2 = 7$ мкм, $d_3 = 6$ мкм; (*B*) $d_1 = d_2 = 15$ мкм, $d_3 = 7$ мкм. (б) Кривые (*A*) $d = 20$ мкм; (*B*) $d = 37$ мкм, $P_0 = 2$ мВт/мм^2.

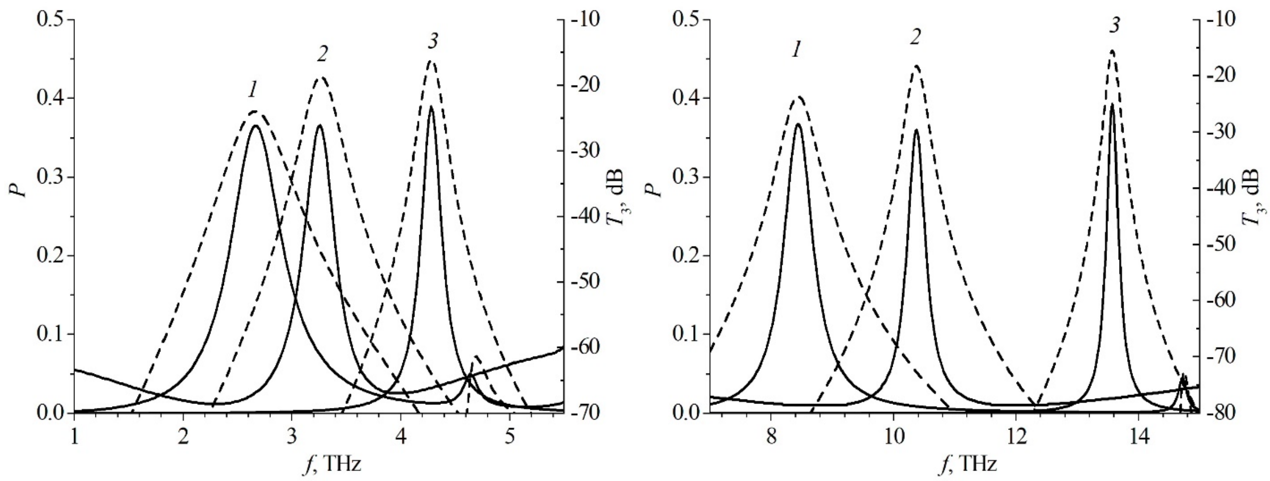
При моделировании многослойных ДРГ возможно две конфигурации – когда суммарная толщина $d = d_1+d_2+d_3$ всех разделительных слоев равна $\lambda_{рез}/4n$ (вставка рис. 3.23а), и когда толщина каждого слоя $d = d_1 = d_2 = d_3$ равна $\lambda_{рез}/4n$ (вставка рис. 3.23б). Для обоих случаев заметно значительное повышение P и T_3 (кривые B) по сравнению с неоптимизированными толщинами (кривые A).

Вывод – при изменении толщины разделительных диэлектрических слоев можно добиться усиления взаимодействия внешнего поля с ДРГ и увеличения уровня ГТГ за счет образования стоячих волн при многократном переотражении падающей волны от подложки и графеновых лент.

3.2.2.3 Размер ленты.

При моделировании поглотителей было отмечено, что радиофизические характеристики ДГР зависят от размера лент. Поэтому целью данного исследования является выявление этих закономерностей. Параметры графена T = 300 K, τ = 1 пс считаем фиксированными. Рассматриваются две конфигурации ДРГ: в элементарной ячейке с периодичностью d_x, d_y на верхнем диэлектрическом слое толщиной d (n = 1.45) расположена графеновая лента прямоугольной ($w\times l$) или квадратной ($w\times w$) формы. Показатель преломления подложки n =1.77 (конфигурация №*1* рис. 3.15). Расчеты приводятся для нормального падения ЭМВ к поверхности графена. Для квадратной ленты тип поляризации не имеет значения (в случае, когда вектор напряженности электрического поля параллелен одной их сторон ленты). При расчете нелинейных коэффициентов R_3, T_3 используется формула (1.18) для проводимости третьего порядка графена.

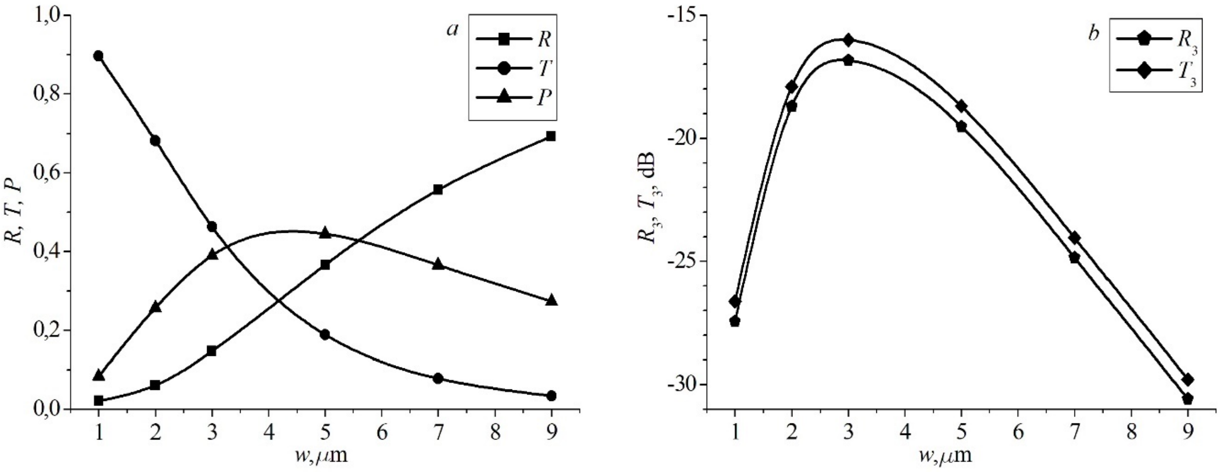
Для различной периодичности $d_x = d_y$ и размера w квадратной графеновой ленты при фиксированном значении химического потенциала μ_c = 0.3 эВ построены графики частотной зависимости коэффициентов P, T_3 (рис. 3.24). Для всех значений w обнаружены максимумы поглощения на резонансных частотах ДРГ. Можно заметить (рис. 3.24), что при увеличении w наблюдается расширение пиков поглощения и ГТГ. Измеренная ширина максимумов T_3 по уровню -3 дБ составляет $\Delta f_{-3дБ}$ = {0.35, 0.19, 0.12} ТГц для w = {0.3, 0.5, 0.7} мкм, соответственно для ДРГ с параметрами на рис. 3.23б.



(а) (б)

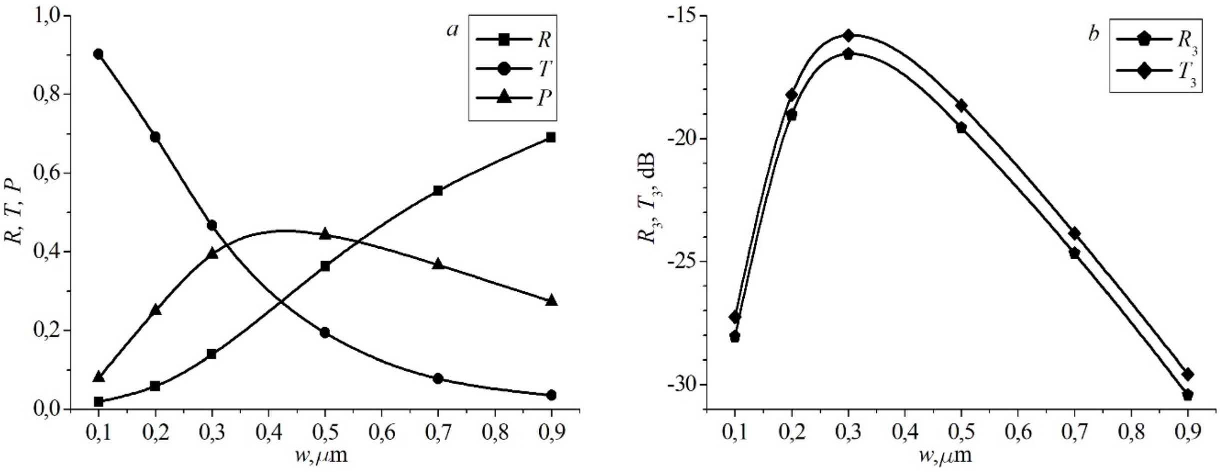
Рис. 3.24 Влияние размера квадратной графеновой ленты. Спектры поглощения P (сплошные линии) и ГТГ T_3 (штриховые) ЭМВ. (а) $d_x = d_y = 10$ мкм, $P_0 = 0.1$ мВт/мм^2, кривые (*1*) $w = 7$ мкм, $d = 22$ мкм, (*2*) $w = 5$ мкм, $d = 18$ мкм, (*3*) $w = 3$ мкм, $d = 14$ мкм. (б) $d_x = d_y = 1$ мкм, $P_0 = 10^{-5}$ мВт/мм^2, кривые (*1*) $w = 0.7$ мкм, $d = 6$ мкм, (*2*) $w = 0.5$ мкм, $d = 5$ мкм, (*3*) $w = 0.3$ мкм, $d = 4$ мкм.

Для исследования отмеченного выше эффекта увеличения T_3 при уменьшении размера ленты, построены графики зависимости линейных и нелинейных коэффициентов от размера w ДРГ на резонансной частоте основной моды ППП в случае s-поляризации ЭМВ (рис. 3.25). Каждой точке соответствует своя резонансная частота $f_{рез}$ и толщина диэлектрического слоя $d=\lambda_{рез}/4n$. Кривые коэффициентов поглощения P (рис. 3.25, 3.26) для периодов $d_x = d_y = 1$ мкм и $d_x = d_y = 10$ мкм имеют максимум поглощения $P \sim 0.40...0.45$ в диапазоне значений $w = 0.3…0.6$ мкм и $w = 3…6$ мкм, соответственно. Т.е., когда коэффициент $\gamma = w / d_y(d_x)$ находится в интервале значений 0.3…0.6 (для ДРГ с квадратными лентами). В нелинейном режиме максимумы R_3, T_3 приходятся на область $\gamma \sim 0.25…0.4$, что левее области максимума поглощения P (рис. 3.25, 3.26). Это можно объяснить двумя эффектами. При уменьшении размера графеновых лент w во - первых, увеличивается плотность тока в графене, во-вторых, снижается коэффициент отражения падающей (при $\gamma \sim 0.3$, $R \sim 0.15$, при $\gamma \sim 0.6$, $R \sim 0.4$). Таким образом, в сумме эти два эффекта дают максимальный уровень ГТГ при $\gamma \sim 0.3$ для ДРГ с квадратными лентами.



(а) (б)

Рис. 3.25 Графики зависимости линейных (a) и нелинейных (b) параметров ДРГ с квадратными графеновыми лентами от размера w = {9, 7, 5, 3, 2, 1} мкм. $d_x = d_y$ = 10 мкм, d = {27, 22, 18, 14, 11, 8} мкм, μ_c = 0.3 эВ, P_0 = 0.1 мВт/мм^2.



(а) (б)

Рис. 3.26 Графики зависимости линейных (a) и нелинейных (b) параметров ДРГ с квадратными графеновыми лентами от размера w = {0.9, 0.7, 0.5, 0.3, 0.2, 0.1} мкм. $d_x = d_y$ = 1 мкм, d = {9, 7, 6, 4, 3.5, 2.5} мкм, μ_c = 0.3 эВ, P_0 = 10^{-5} мВт/мм^2.

Для ДРГ с параметрами, приведенными в подписях к рис. 3.25, 3.26 построены графики зависимости $f_{рез}$ от размера ленты w, которые подтверждают, что не работает принцип масштабируемости – при уменьшении размеров d_x, d_y и w в 10 раз резонансные частоты не увеличиваются в 10 раз, вследствие сильной дисперсии поверхностной проводимости графена. Однако при фиксированных параметре μ_c, резонансная частота ДРГ ведет себя как

$$f_{рез} \sim \eta_w \frac{1}{\sqrt{w}} \tag{2.29}$$

что подтверждается результатами моделирования на рис. 3.25 и результатами [1]. Параметр η_w можно определить из результатов моделирования для одного значения w, затем с использованием (4.1) вычисляются резонансные частоты при других w. Например, для μ_c = 0.3 эВ, T = 300 К, τ = 1 пс при w = 5 мкм резонансная частота $f_{рез} \sim 3.26$ ТГц, откуда $\eta_w \sim 7.29$. На рисунке 3.27 пунктирные кривые построены по формуле (2.29) при η_w = 7.29, символы – результаты моделирования. При изменении периода d_x = d_y зависимость вида (2.29) сохраняется с другим коэффициентом η_w (рис. 3.27). При больших размерах ленты w, результаты моделирования дают заниженное значение резонансной частоты $f_{рез}$ (в сравнении с (2.29)). Это можно объяснить тем, что эквивалентная ширина ленты увеличивается вследствие электромагнитной связи между лентами соседних элементарных ячеек.

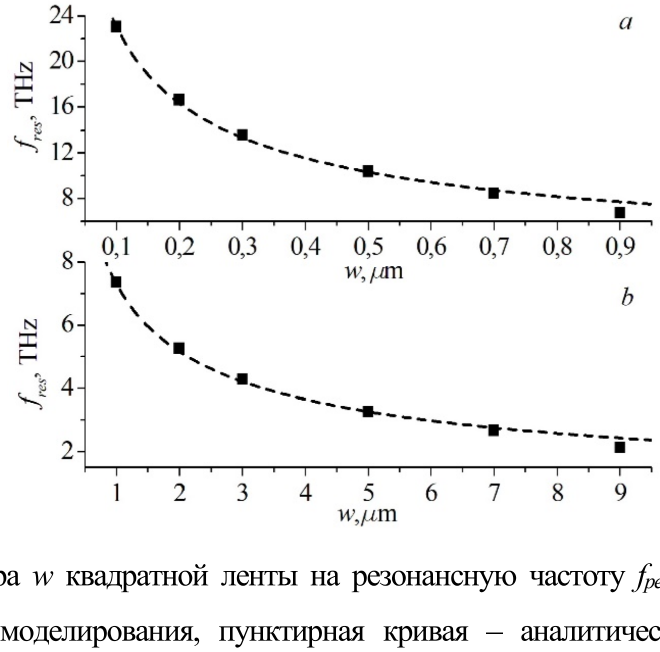
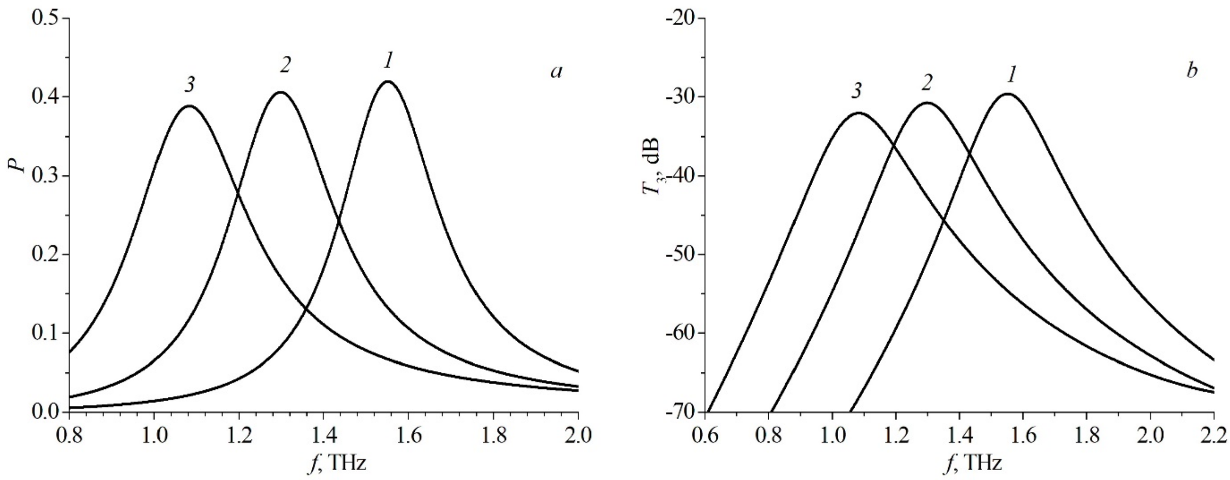


Рис. 3.27 Влияние размера w квадратной ленты на резонансную частоту $f_{рез}$ основной моды ДРГ. Символы – результаты моделирования, пунктирная кривая – аналитическое выражение (2.29). Параметры ДРГ в подписях к рис. 3.26

Следующий этап – исследование влияния размеров прямоугольных графеновых лент на электродинамические характеристики ДРГ. Здесь возможно 2 случая: изменение продольного размера, вдоль которого ориентирован вектор напряженности электрического поля (при *s*-поляризации это *l,* при *p*-поляризации это *w*) и случай, когда варьируется поперечный полю размер ленты (при *s*-поляризации это *w,* при *p*-поляризации это *l*).

На рис. 3.28, 3.29 представлены спектры поглощения и ГТГ при падении на ДРГ ЭМВ *s*-поляризации. Параметры графена и толщина диэлектрического слоя остаются неизменными. При увеличении длины *l*, как и для ДРГ с прямоугольными лентами, происходит снижение резонансной частоты основной моды ППП (рис. 3.28) по закону (2.29). Максимальный уровень ГТГ в прямом направлении T_3 имеет ДРГ с минимальной шириной лент (w = 5 мкм) за счет увеличения плотности тока.



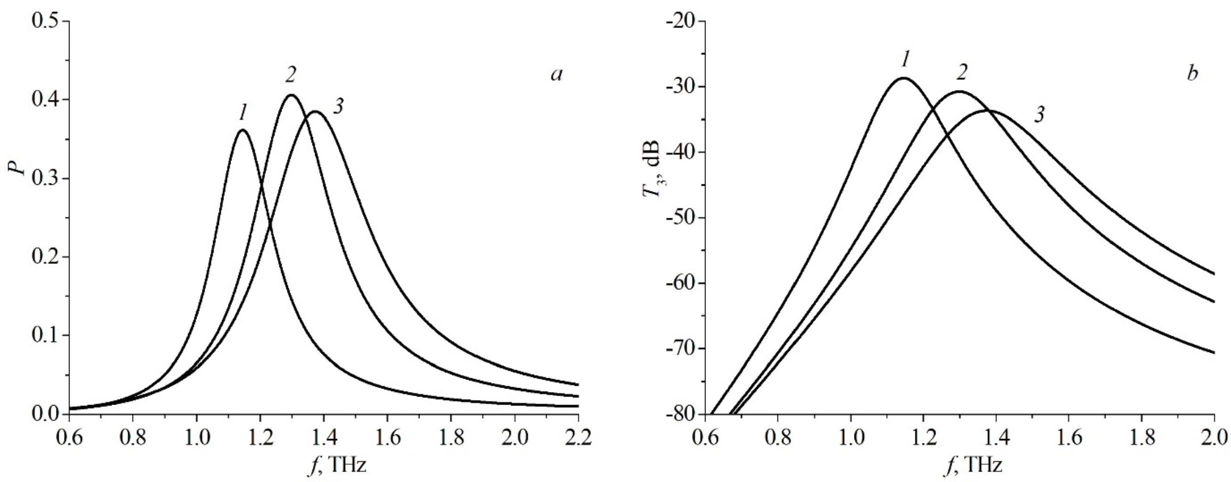
(а) (б)

Рис. 3.28 Влияние длины *l* прямоугольной графеновой ленты (а) на коэффициент поглощения *P* *s*-поляризованной ЭМВ и (б) уровень T_3 ГТГ, излучаемой в прямом направлении. Кривые (*1*) l = 20 мкм, (*2*) 25 мкм, (*3*) l = 30 мкм. Параметры ДРГ: w = 10 мкм, $d_x = d_y$ = 35мкм, d = 19 мкм, μ_c = 0.35 эВ. P_0 = 5 мВт/мм^2.

При увеличении ширины *w* резонансная частота увеличивается (рис. 3.29). Это происходит по той же причине, что и в случае близкого расположения двух полосок в одном слое – при увеличении ширины увеличивается эффективный показатель преломления. При этом увеличивается продольное волновое число ППП (см. выражение (1.6)), что приводит к снижению резонансной длины волны при фиксированной длине *l* ленты. Как и для ДРГ с прямоугольными лентами, можно заметить расширение пиков поглощения и ГТГ (рис. 3.29).

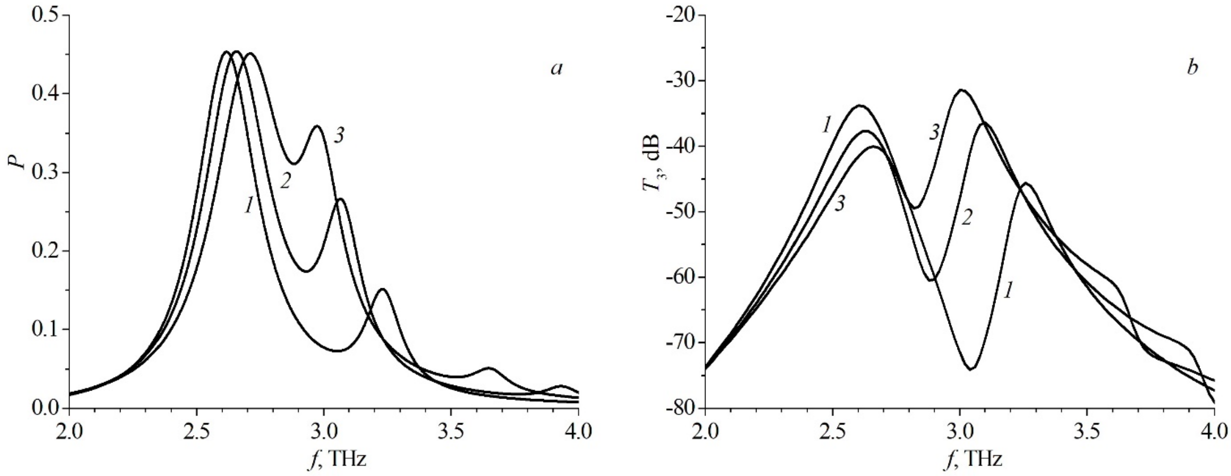
В случае падения *p*-поляризованной ЭМВ спектры содержат два близко расположенных резонанса высших мод ППП (рис. 3.30), которые при увеличении длины *l* сближаются.

При уменьшении ширины лент *w* наблюдается как сближение резонансов высших мод ППП, так и общее повышение частоты, что приводит к увеличению уровня ГТГ (рис. 3.31).



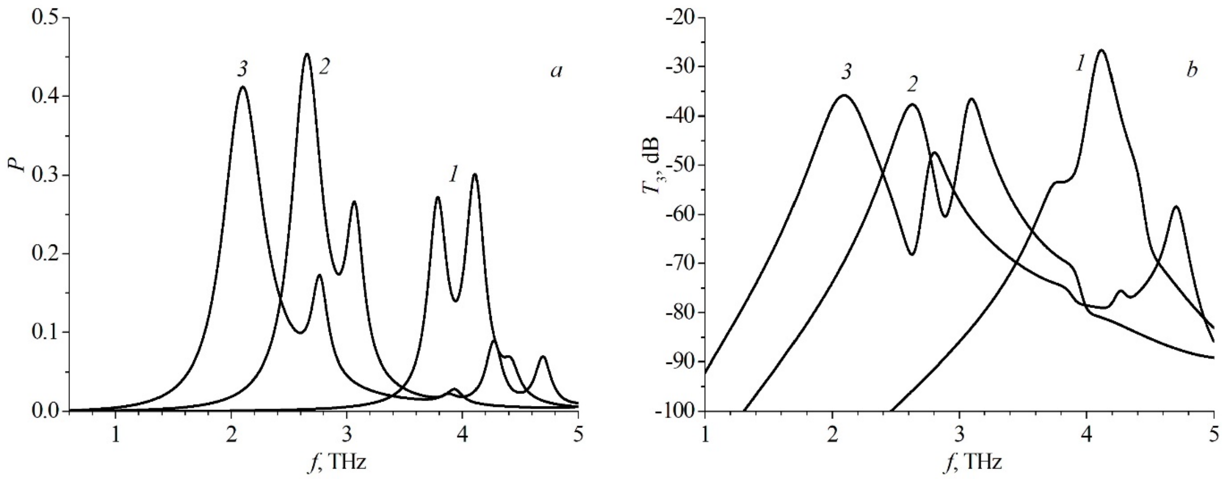
(а) (б)

Рис. 3.29 Влияние ширины *w* прямоугольной графеновой ленты (а) на коэффициент поглощения *P* *s*-поляризованной ЭМВ и (б) уровень T_3 ГТГ, излучаемой в прямом направлении. Кривые (*1*) l = 5 мкм, (*2*) 10 мкм, (*3*) l = 15 мкм. Параметры ДРГ: l = 25 мкм, $d_x = d_y$ = 35 мкм, d = 19 мкм, μ_c = 0.35 эВ. P_0 = 5 мВт/мм^2.



(а) (б)

Рис. 3.30 Влияние длины l прямоугольной графеновой ленты (а) на коэффициент поглощения P p-поляризованной ЭМВ и (б) уровень T_3 ГТГ, излучаемой в прямом направлении. Кривые (*1*) l = 20 мкм, (*2*) 25 мкм, (*3*) l = 30 мкм. Параметры ДРГ: w = 10 мкм, $d_x = d_y$ = 35 мкм, d = 19 мкм, μ_c = 0.35 эВ. P_0 = 5 мВт/мм^2.



(а) (б)

Рис. 3.31 Влияние ширины w прямоугольной графеновой ленты (а) на коэффициент поглощения P p-поляризованной ЭМВ и (b) уровень T_3 ГТГ, излучаемой в прямом направлении. Кривые (*1*) l = 5 мкм, (*2*) 10 мкм, (*3*) l = 15 мкм. Параметры ДРГ: l = 25 мкм, $d_x = d_y$ = 35 мкм, d = 19 мкм, μ_c = 0.35 эВ. P_0 = 5 мВт/мм^2.

3.2.2.4 Период элементарной ячейки

Результаты исследования влияния периода d_x (d_y = 1 мкм фиксирован) на линейные и нелинейные параметры ДРГ в ТГЦ и ИК диапазоне представлены на рис. 3.32. При уменьшении периодичности (увеличении плотности упаковки, сплошные кривые) резонансные частоты перемещаются для *s*-поляризации в сторону высоких и для *p*-поляризации низких частот, при этом уровень ГТГ, излучаемой в прямом направлении T_3, увеличивается. Причина такого поведения - большая дисперсия поверхностной проводимости графена.

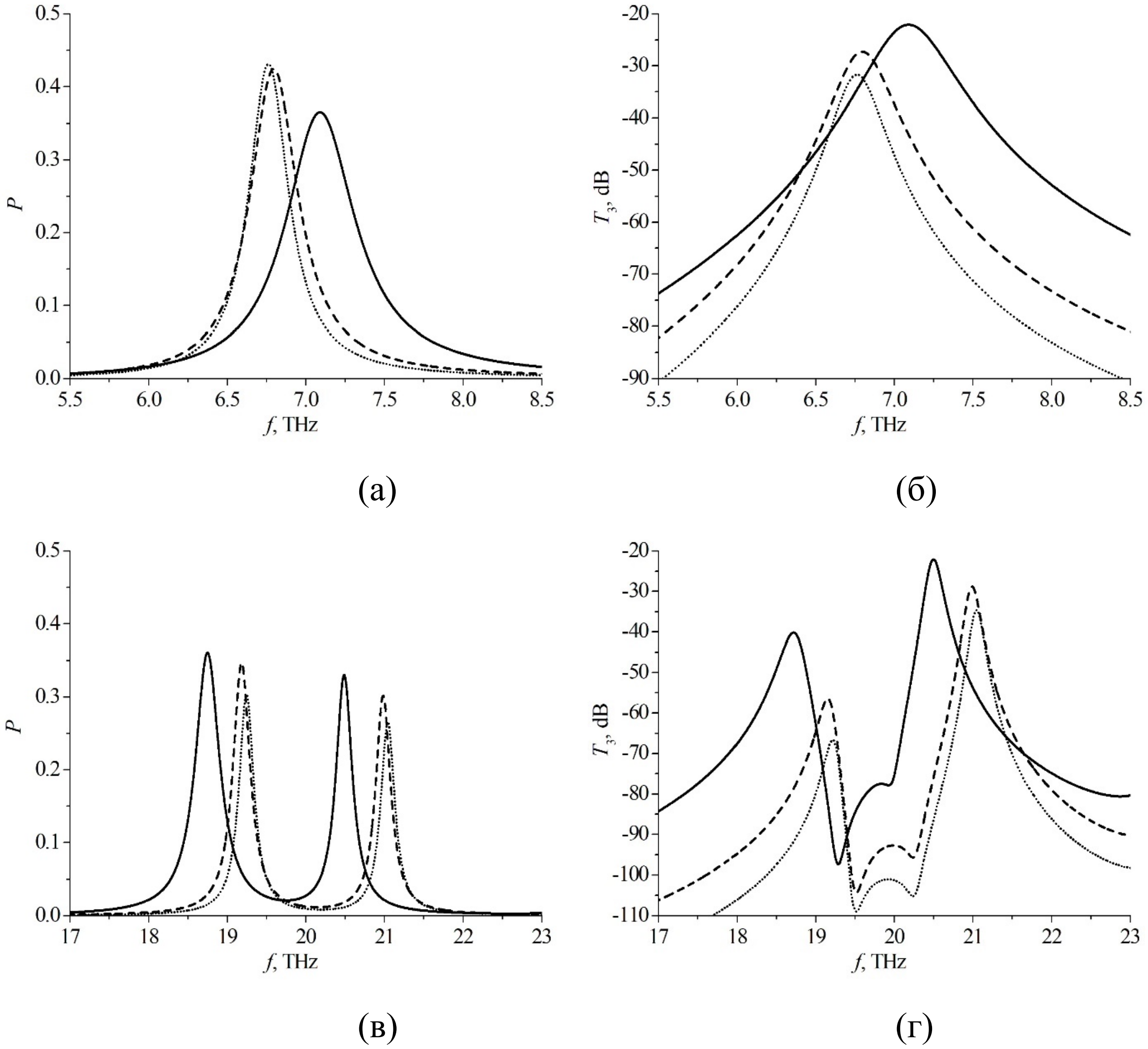


Рис. 3.32 Линейные спектры поглощения P (а, в) и уровня ГТГ T_3 (б, г) ДРГ с различным значением периода d_x при падении *s*- (а, б) и *p*-поляризованной (в, г) ЭМВ. Сплошные кривые - $d_x = 0.4$ мкм, штриховые - $d_x = 0.7$ мкм, пунктирные - $d_x = 1$ мкм, $w \times l = 0.2 \times 0.8$ мкм^2, $d_y = 1$ мкм, $d = 5$ мкм, $P_0 = 10^{-6}$ мВт/мм^2.

При увеличении периода (при условии, что распространяется одна пространственная гармоника) уменьшается связь между лентами. Из-за большой локализации ППП увеличение периода мало влияет на резонансную частоту (штриховые и пунктирные кривые рис. 3.32).

3.2.2.5 Химический потенциал

Как линейная, так и нелинейная, проводимости графена зависят от химического потенциала (уровня Ферми). Это свойство создает дополнительную степень свободы при проектировании линейных и нелинейных устройств на основе графена (поглотителей, генераторов, преобразователей частот и др.), предоставляя возможность управления радиофизическими характеристиками без изменения геометрии элементарной ячейки [10]. Такими параметрами являются резонансная частота ДРГ (которая определяется линейной проводимостью $\sigma^{(1)}$) и уровень генерации на частоте третьей гармоники и комбинационных частотах (определяемый проводимостью третьего порядка $\sigma^{(3)}$). Управление химическим потенциалом может осуществляться приложением внешнего электростатического поля смещения или химическим легированием.

На рис. 3.33 приведены ТГц и ИК спектры нелинейного прохождения T_3 (сплошные) и линейный спектр поглощения P (штриховые) ДРГ с квадратными графеновыми лентами при различных значениях μ_c. Уменьшая μ_c можно снизить резонансную частоту ДРГ и увеличить уровень ГТГ T_3 (R_3 ведет себя подобным образом и на графиках не приводится).

На рис. 3.34, 3.35 при фиксированных параметрах w, d_y, d_x, T, τ представлены графики зависимости резонансной частоты $f_{рез}$ (рис. 3.34), и коэффициентов R, T, P, R_3, T_3 (рис. 3.35) от химического потенциала. Пунктирным кривым на рис. 3.34 – соответствуют функции вида

$$f_{рез} \sim \eta_{\mu} \sqrt{\mu_c}\ , \tag{3.30}$$

где η_μ определяется из результатов моделирования. Каждой частотной точке графиков на рис. 3.34, 3.35 соответствует своя толщина $d = \lambda_{рез} / 4n$. Для заданных $w = 0.3$ мкм, $T = 300$ K, $\tau = 1$ пс при $\mu_c = 0.5$ эВ резонансная частота $f_{рез} \sim 17.55$

ТГц, откуда $\eta_\mu \sim 24.8$ (рис. 3.34а). Зная η_μ, по формуле (3.30) легко вычислить $f_{рез}$ при других значениях химического потенциала. При изменении периода ДРГ зависимость вида (3.30) сохраняется с другим коэффициентом η_w (рис. 3.34б)

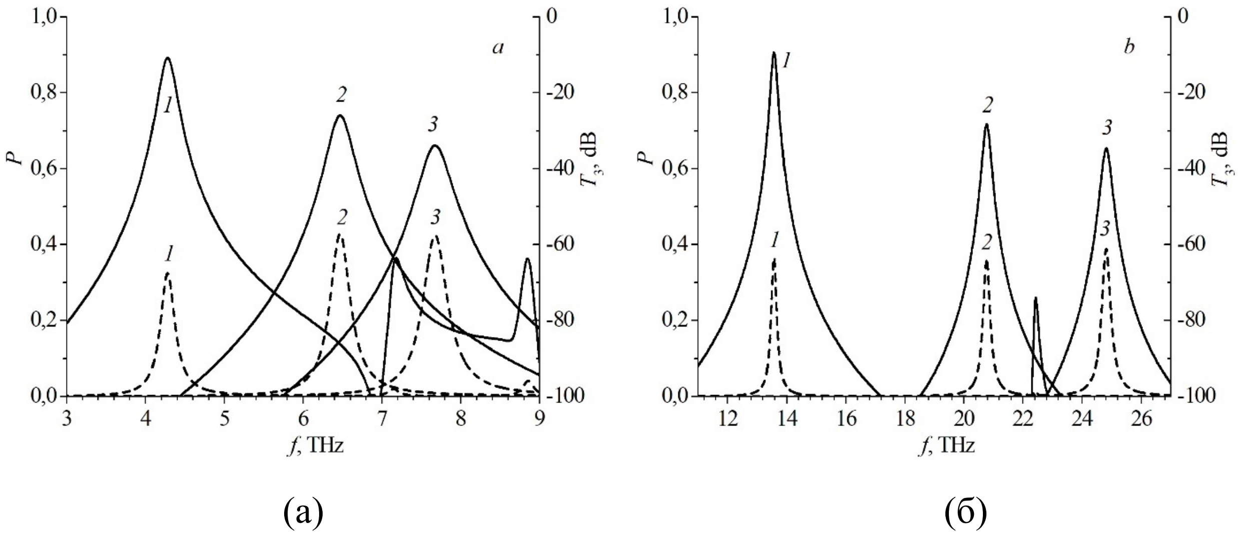


Рис. 3.33 Влияние химического потенциала графена μ_c на ТГц (a) и ИК (b) спектры P (штриховые), T_3 (сплошные) ДРГ. Кривые (*1*) $\mu_c = 0.3$, (*2*) 0.7, (*3*) 1 эВ. (a) $d_x = d_y = 10$ мкм, $w = 3$ мкм, $P_0 = 0.1$ мВт/мм^2, (b) $d_x = d_y = 1$ мкм, $w = 0.3$ мкм, $P_0 = 10^{-5}$ мВт/мм^2, $d = 5$ мкм.

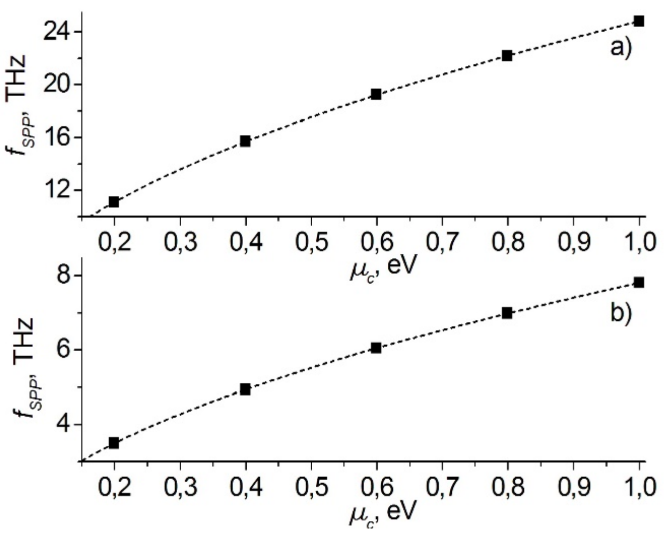
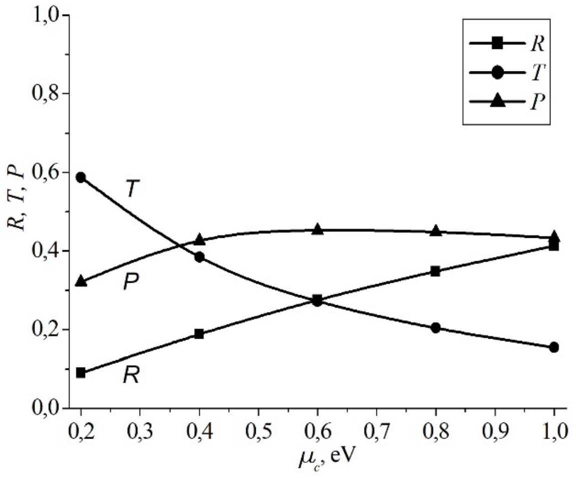


Рис. 3.34. Управление резонансной частотой $f_{рез}$ ДРГ с квадратными графеновыми лентами с помощью изменения химического потенциала графена μ_c. Символы – результаты моделирования, пунктирная кривая – аналитическое выражение (3.30). (a) $d_x = d_y = 1$ мкм, $P_0 = 10^{-5}$ мВт/мм^2; (b) $d_x = d_y = 10$ мкм, $P_0 = 0.1$ мВт/мм^2.

При μ_c > 0.4 эВ коэффициент поглощения достигает максимального значения P ~ 0.45 и практически не изменяется в диапазоне μ_c ~ 0.4…1 эВ (рис. 3.35a). При уменьшении химического потенциала снижается коэффициент отражения падающего поля R и значительно увеличивается коэффициент прохождения третьей гармоники T_3 (более чем на 30 дБ).



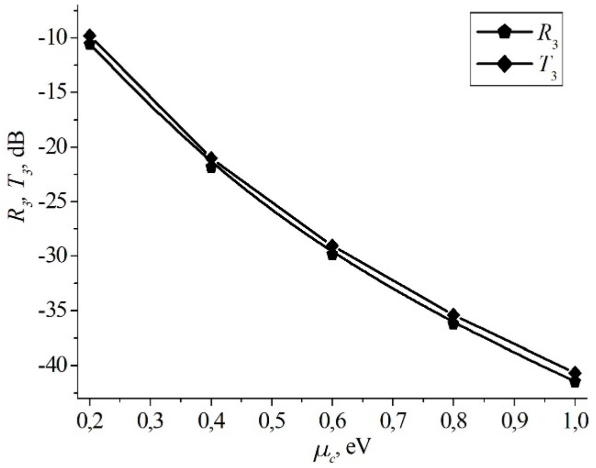
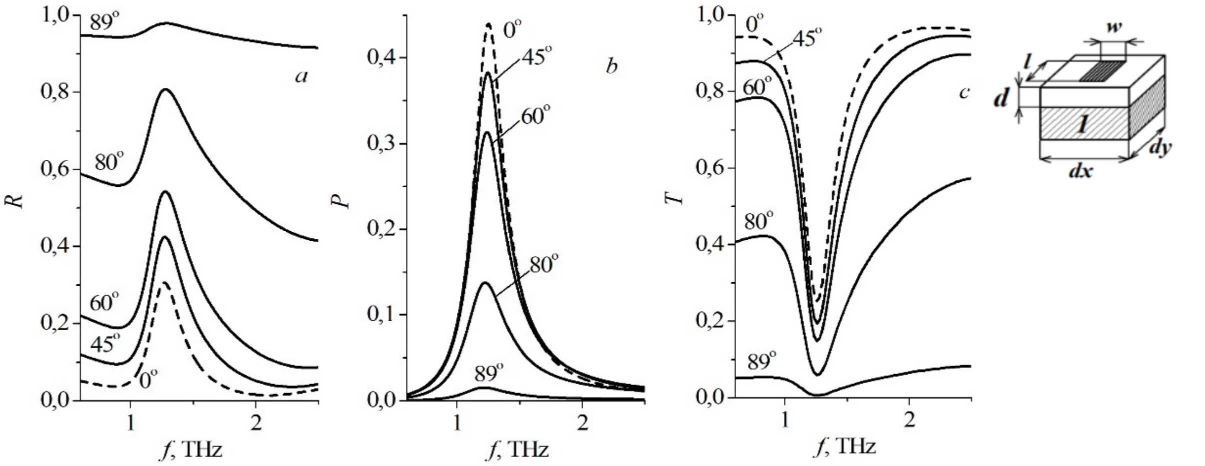


Рис. 3.35 Графики зависимости линейных (a) и нелинейных (b) параметров ДРГ квадратными графеновыми лентами (рис. 3.15) от химического потенциала графена μ_c. $d_x = d_y$ = 1 мкм, d = {5.2, 3.7, 3, 2.6, 2.3} мкм, w = 0.3 мкм, $P_0 = 10^{-5}$ мВт/мм^2.

3.2.2.6 Наклонное падение ЭМВ

Важным этапом при моделировании плазмонных устройств является изучение угловых зависимостей – радиофизических параметров от взаимной ориентации облучающего источника волн и исследуемой структуры. Во-первых, нормальное падение волн к поверхности структуры редко реализуемо и от реальных устройств требуется стабильность параметров в заданном диапазоне углов падения. К угловым отклонениям может приводить ряд факторов, например, нестабильность параметров при изготовлении самих решеток, так и например, технологические особенности измерительных установок. Во-вторых, в оптических системах облучающий источник и приемный модуль (потребитель) часто разнесены в пространстве и могут располагаться не на одной прямой (например, в дифракционных системах, работающих на отражение).

Под углом падения θ подразумеваем угол между волновым вектором падающей волны и нормалью к поверхности графена (осью z, рис. 2.1). Считаем $\phi = 0$ (угол между проекцией k_1 на плоскость xoy и осью x). На рис. 3.36, 3.37 представлены линейные спектры отражения и поглощения s– (рис. 3.36) и p–поляризованной (рис. 3.37) ЭМВ ТГц диапазона для различных углов падения.



(а) (б) (в)

Рис. 3.36 ТГЦ линейные спектры отражения R (а), поглощения P (б) и прохождения T (в) падающей волны s-поляризации ДРГ при различных значениях угла падения. Параметры ДРГ: $w \times l = 8 \times 25$ мкм^2, $d_x = d_y = 35$ мкм, $d = 30$ мкм. $P_0 = 1$ мВт/мм^2.

Для p-поляризации падающей волны (рис. 3.37) в линейных спектрах наблюдаются особенности. При увеличении угла падения увеличивается коэффициент прохождения T и при определенном значении достигает максимального значения. Этот режим известен как аномалия Рэлея, когда появляется новые дифрагированный порядок, соответствующий распространению новой пространственной гармонике. В нашем случае это пространственная гармоника с индексами p = -1, q = 0. Из условия распространения

$$k_1^2 n_\pm^2 - \alpha_p^2 + \beta_q^2 > 0,$$

где $\alpha_p = 2\pi p / d_x + k_1 \sin\theta \cos\varphi$, $\beta_q = 2\pi q / d_y + k_1 \sin\theta \sin\varphi$. Тогда условие распространения пространственной гармоники с индексами p = -1, q = 0

$$\sin\theta > \frac{c}{f_1\, d_x} - n_{\pm},\ \text{или}\ f_1 > \frac{c}{d_x(\sin\theta + 1.77)}$$

где $n_+ = 1, n_- = 1.77$.

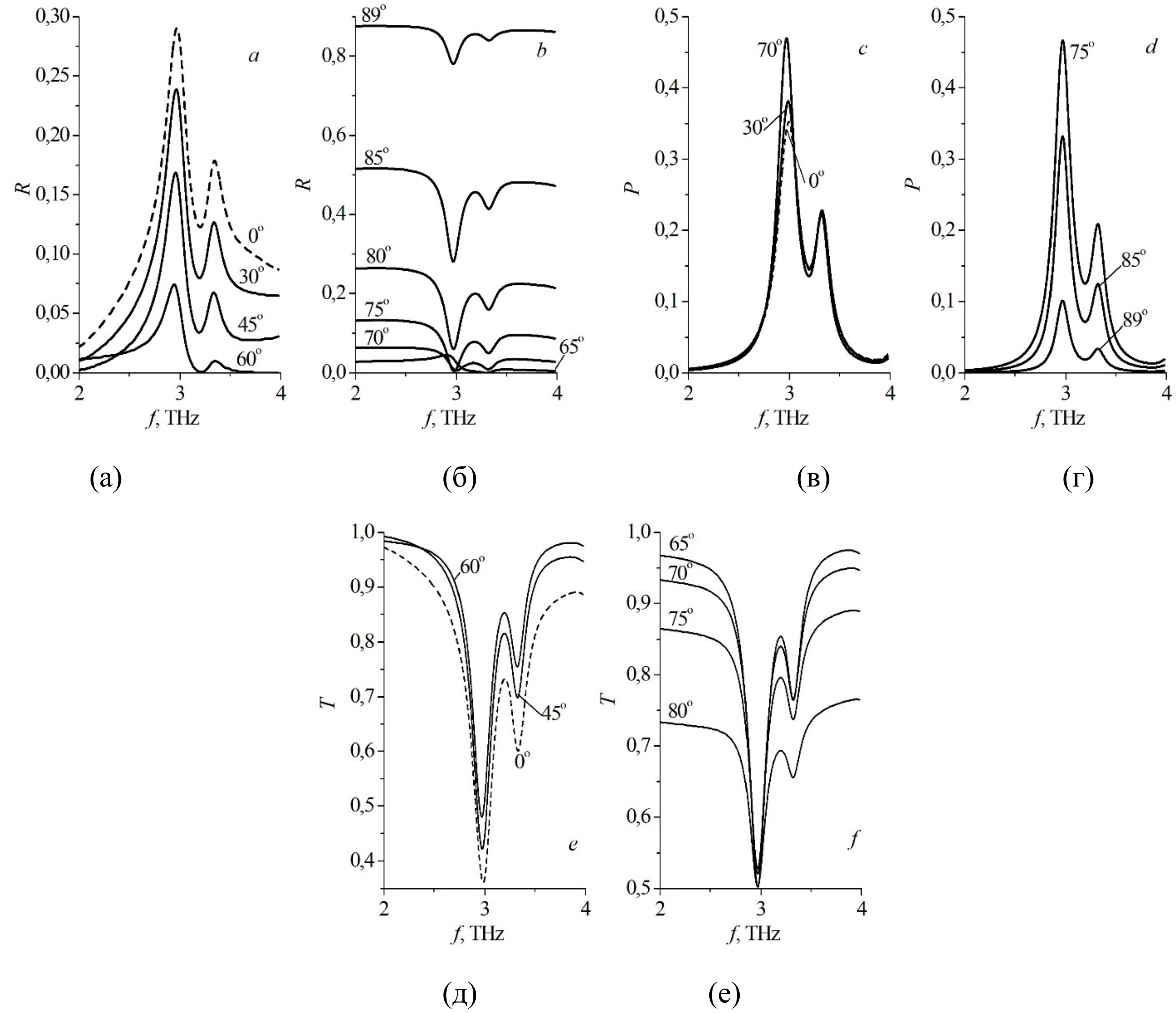
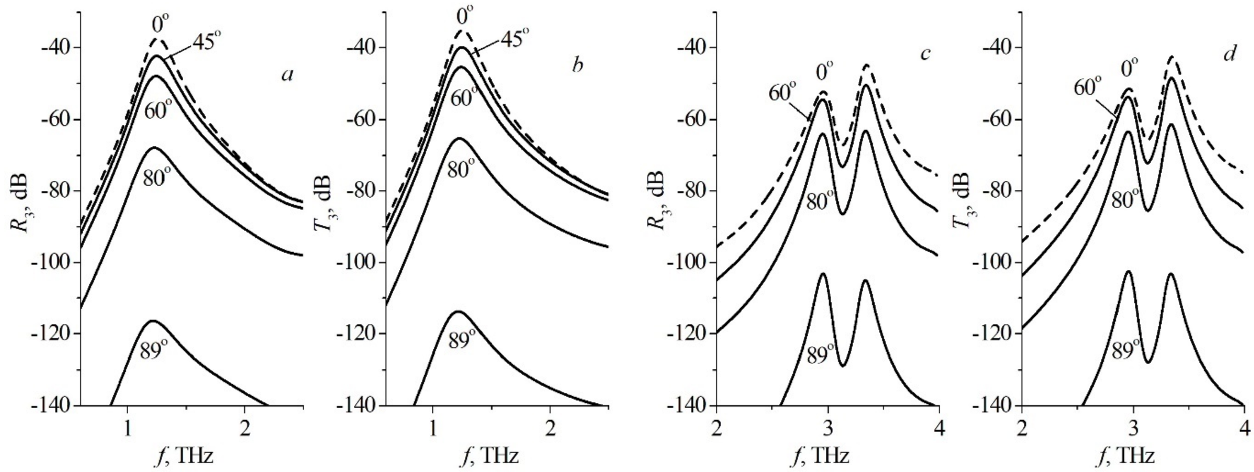


Рис. 3.37 Линейные спектры отражения R (а, б), поглощения P (в, г) и прохождения T (д, е) падающей волны p-поляризации ДРГ при различных значениях угла падения. Параметры ДРГ на рис. 3.36.

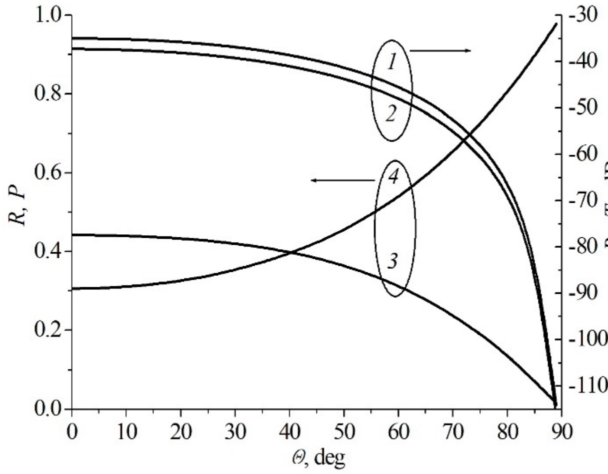
На рис. 3.38 представлены спектры ГТГ при различных углах падения ЭМВ для s- (3.38а,б) p- поляризации (3.38в,г). При увеличении угла падения аномалий не наблюдается – происходит снижение уровня генерируемой мощности на частоте ТГ.



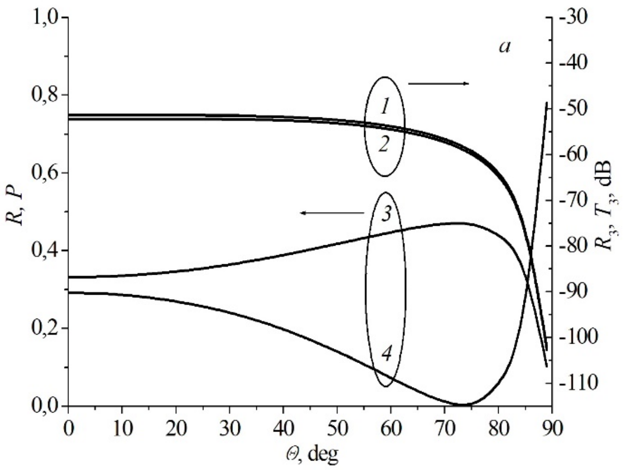
(а) (б) (в) (г)

Рис. 3.38. Спектры ГТГ ДРГ с параметрами рис. 3.36: в обратном R_3 (а, в) и прямом T_3 (б, г направлении при различных значениях угла падения. (а, б) *s*-, (в, г) *p*-поляризация.

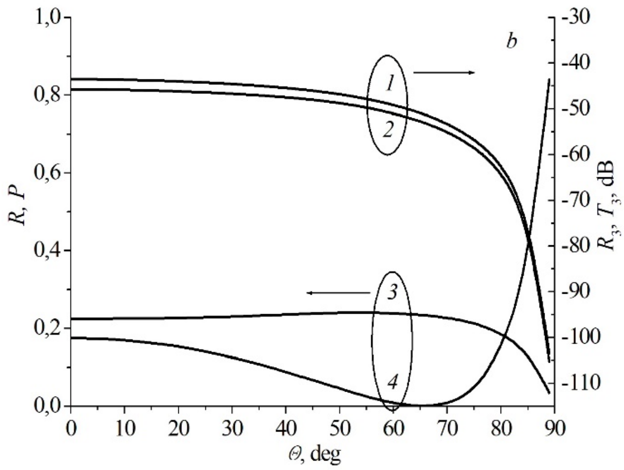
На рис. 3.39 исследованы угловые зависимости коэффициентов рассеяния ЭМВ в линейном режиме (R,P) уровня ГТГ (R_3, T_3) на фиксированных частотах 1.26, 2.96 и 3.32 ТГц соответствующих резонансам ППП. Для *p*-поляризации наблюдается лучшая угловая нечувствительность по уровню минус 3 дБ для уровня ГТГ и составляет значение не менее 50 градусов. Для *s*-поляризации - значительно меньше и составляет значение порядка 35 градусов. Однако максимальный уровень ГТГ более чем на 8 дБ ниже. На рис. 3.39б,в хорошо видны указанные выше аномалии Релея – минимумы R (кривые *4*).



(а)



(б)



(в)

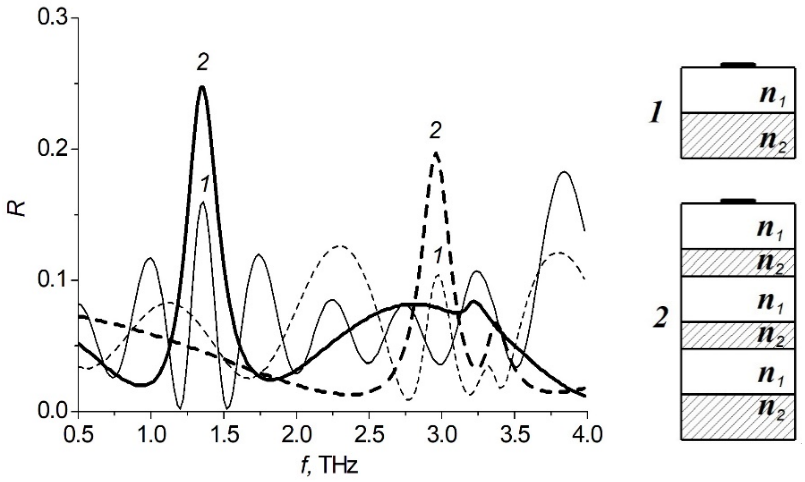
Рис. 3.39. Зависимости коэффициентов отражения R (*4*), поглощения P (*3*) и уровня ГТГ в обратном R_3 (*2*) и прямом T_3 (*1*) направлении ДРГ от угла падения θ ЭМВ с (а) *s*-поляризацией на частоте 1.26 и *p*-поляризацией на частоте (б) 2.96 и (в) 3.32 ТГц. Параметры ДРГ: $w \times l = 8 \times 25$ мкм^2, $d_x = d_y = 35$ мкм, $d = 30$ мкм, $\mu_c = 0.35$ эВ, $T = 300$ K, $\tau = 1$ пс. Плотность мощности падающей волны $P_0 = 1$ мВт/мм^2.

3.2.2.7 Применение диэлектрических и металлических зеркал

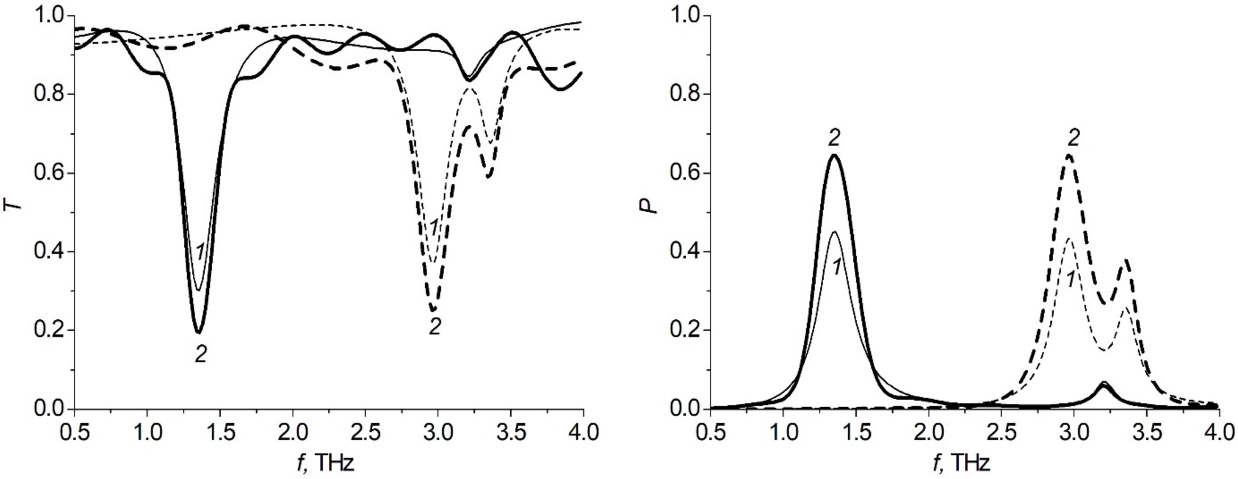
Одной из возможностей усиления взаимодействия ЭМВ с ДРГ и увеличения нелинейного отклика является применение отражающих элементов, в качестве которых предлагается использование диэлектрических зеркал (ДЗ), представляющее собой чередующиеся пары диэлектриков с разными показателями преломления ($n_1 = 1.45$ и $n_2 = 1.77$) четверть волновой толщины $h = \lambda_{рез} / 4n$, настроенные на резонансную частоту ДРГ. Для ДРГ, спектры которой представлены на рис (рис. 3.40) это 1.36 ТГц для *s*-, и, например, 2.96 ТГц для *p*-поляризованной ЭМВ. Применение ДЗ приводит к уменьшению линейный коэффициента прохождения *T,* возрастанию коэффициента поглощения *P* и увеличению мощности ГТГ T_3, R_3 (рис. 3.41).

На рис. 3.41 представлены спектры ДРГ с меньшими размерами лент и периодичностью. Как и для решеток, работающих в ТГц диапазоне, применение ДЗ способствует увеличению уровня ГТГ на ИК частотах (рис. 3.42).

Рис. 3.43 демонстрирует еще один эффект от применения ДЗ (конфигурация двухслойной ДР на вставке, n_1 = 1.45, n_2 (заштрихован) = 1.77). Для демонстрации этого эффекта построены линейные спектры и спектры ГТГ, нормированные на соответствующий коэффициент в линейном режиме $T_{3norm}=T_3/T$, $R_{3norm}=R_3/R$. ДРГ с двумя слоями графеновых лент на ДЗ. Толщины $d = \lambda_{рез} / 4n$. Для *s*-поляризации выбран пик поглощения 1.18 ТГц, для *p*- 2.92 ТГц. При уменьшении коэффициента прохождения *T,* возрастает поглощение *P* (рис. 3.43а) и увеличивается нормированная мощность ГТГ T_{3norm} (рис. 3.43б). Таким образом, ДЗ подавляет падающую ЭМВ не уменьшая уровень ГТГ T_3.

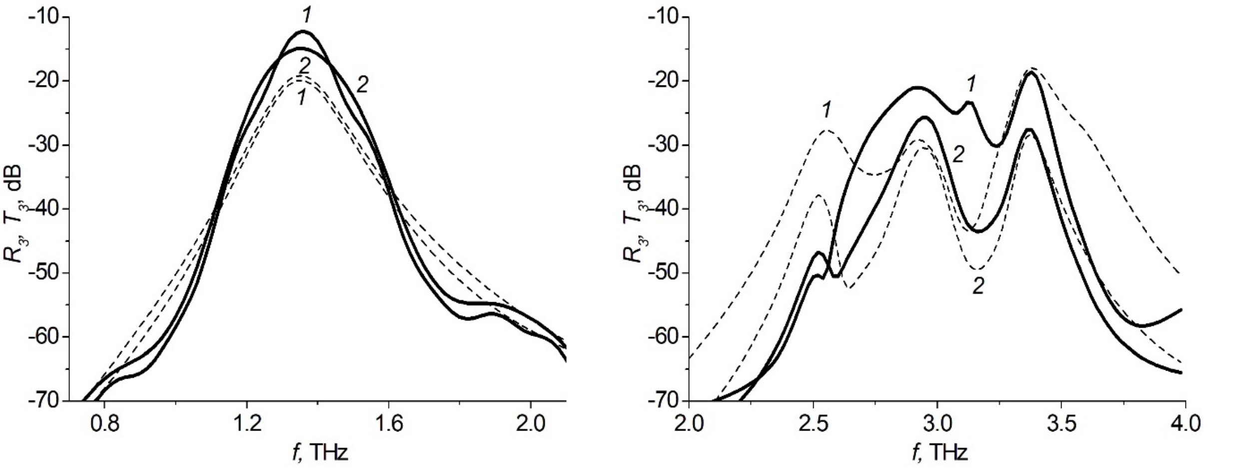


(a)



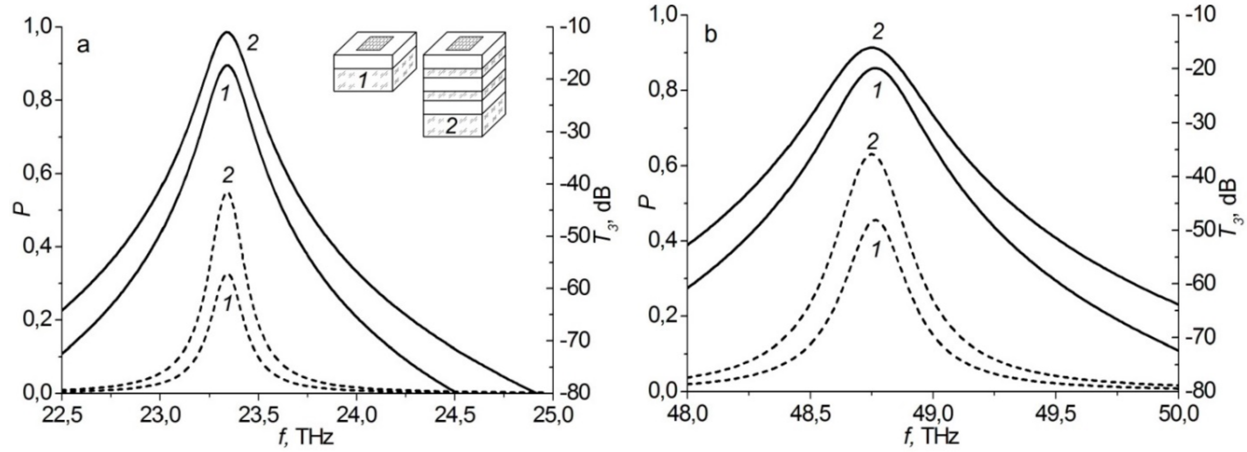
(б) (в)

Рис. 3.40. ТГц спектры линейного отражения R (а), прохождения T (б) и поглощения P (в) ЭМВ для ДРГ: кривые *1* – без ДЗ, *2* – с ДЗ. Сплошные линии - s-поляризация $d_{n1} = 38$ мкм, $d_{n2} = 31$ мкм; штриховые - p-поляризация $d_{n1} = 17$ мкм, $d_{n2} = 14$ мкм. $d_x = d_y = 30$ мкм, $w \times l = 7 \times 20$ мкм^2, $T = 300$ K, $\mu_c = 0.3$ эВ, $\tau = 1$ пс.



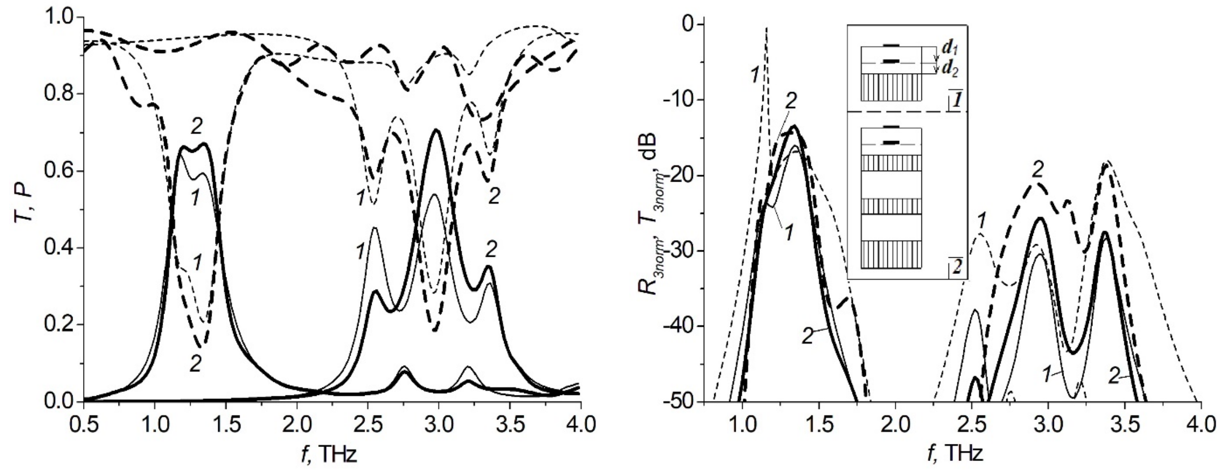
(а) (б)

Рис. 3.41. ТГц спектры нелинейного прохождения T_3 (кривые *1*) и отражения R_3 (*2*) для s- и p-поляризованной ЭМВ для ДРГ рис. 3.40. Штриховые кривые – без ДЗ, сплошные – с ДЗ. Плотность мощности падающей волны $P_0 = 5$ мВт/мм^2.



(а) (б)

Рис. 3.42. ИК спектры линейного поглощения P (штриховые линии) и нелинейной ГТГ T_3 (сплошные) ДРГ с квадратными лентами. Кривые *1* – без ДЗ, *2* – с ДЗ. ДРГ среднего ИК (а) $d_x = d_y = 400$ нм, $d_{n1} = 2.2$ мкм, $d_{n2} = 1.8$ мкм, $w = 100$ нм, $P_0 = 10^{-7}$ мВт/мм^2; ближнего ИК (б) $d_x = d_y = 40$ нм, $d_{n1} = 1$ мкм, $d_{n2} = 0.85$ мкм, $w = 20$ нм, $\mu_c = 0.3$ эВ, $P_0 = 10^{-11}$ мВт/мм^2; $T = 300$ K, $\mu_c = 0.3$ эВ, $\tau = 1$ пс.



(а) (б)

Рис. 3.43. Эффект применения ДЗ в двухслойной ДРГ. (а) Линейные спектры прохождения T (пунктирные линии) и поглощения P (сплошные) ЭМВ и (б) нелинейные спектры ГТГ T_3 (сплошные линии) и R_3 (пунктирные). Кривые *1* – без ДЗ, кривые *2* – с ДЗ. $d_x = d_y = 30$ мкм, $w \times l = 7 \times 20$ мкм^2. *S*-поляризация $d_1 = 30$ мкм, $d_2 = 14$ мкм, $d_{n1} = 44$ мкм, $d_{n2} = 36$ мкм; *p*-поляризация $d_1 = 12$ мкм, $d_2 = 6$ мкм, $d_{n1} = 18$ мкм, $d_{n2} = 15$ мкм, $P_0 = 1$ мВт/мм^2, $T = 300$ K, $\mu_c = 0.3$ эВ, $\tau = 1$ пс.

Генерируемая мощность третьей гармоники T_{3norm} возрастает при увеличении числа слоев диэлектрического зеркала и мощности падающей волны (рис. 3.44).

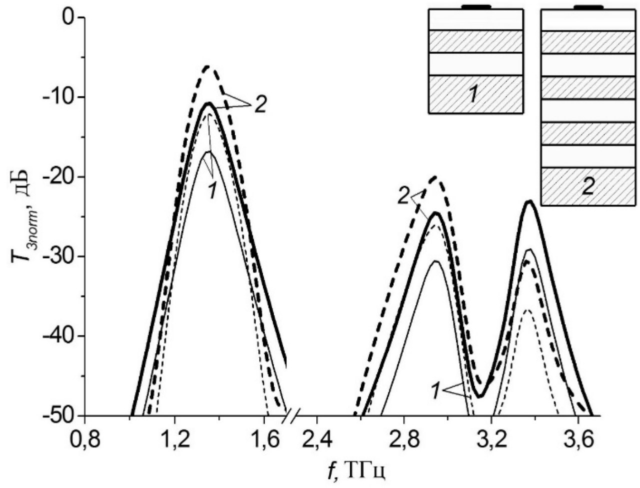


Рис. 3.44. Влияние мощности падающей ЭМВ s- и p-поляризации на уровень ГТГ T_3. Для ДРГ с ДЗ. Кривые (*1*) $P_0 = 1$ мВт/мм^2, (*2*) - 2 мВт/мм^2. Конфигурации №*1* (показана на вставке) (сплошные кривые) и №*2* (пунктирные). *S*-поляризация $d_{n1} = 38$ мкм, $d_{n2} = 31$ мкм; *p*-поляризация $d_{n1} = 18$ мкм, $d_{n2} = 15$ мкм, Параметры графеновых лент и период как на рис. 3.43.

В плазмонных устройствах, работающих в режиме отражательной геометрии, широко применяются металлические зеркала (МЗ). На рис. 3.45 представлены линейные и нелинейные характеристики ДРГ расположенных на полубесконечной подложке (*1*) и тонкой металлической пленке из золота (*2*). Применение МЗ позволяет значительно повысить эффективность взаимодействия падающего поля с ДРГ - при этом на резонансных частотах поглощается более 80% энергии ЭМВ и более чем на 15 дБ увеличивается уровень ГТГ.

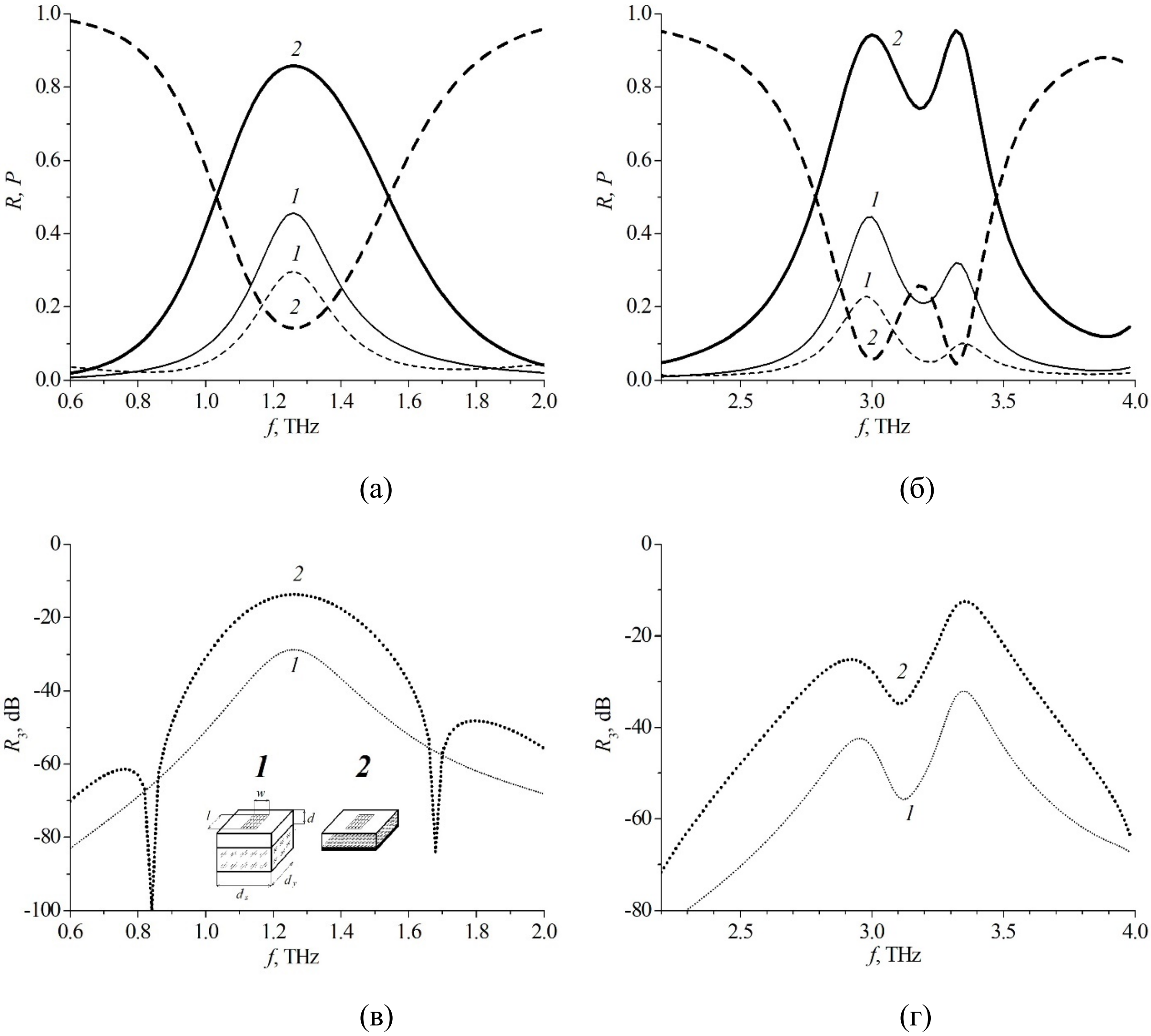


Рис. 3.45. Спектры линейного отражения R (штриховые линии), поглощения P (сплошные) и нелинейные спектры ГТГ в обратном направлении R_3 (точечные линии) s- (а, в) и p-поляризованной (б, г) ЭМВ для ДРГ без МЗ (кривые *1*) и с МЗ (*2*). Для s-поляризации $d = 41$ мкм, для р-поляризации $d = 17$ мкм. Параметры ДРГ: $w\times l = 8\times 25$ мкм^2, $d_x = d_y = 35$ мкм, $\mu_c = 0.35$ эВ, T = 300 K, $\tau = 1$ пс. $P_0 = 5$ мВт/мм^2.

3.2.3 Преобразование частоты

Разработанная математическая модель нелинейной дифракции позволяет проводить моделирование процессов смешения при воздействии на ДРГ полем двух ЭМВ. Рассматривается преобразование частот с повышением и понижением частоты. Частоты ЭМВ могут быть как близкими, так и находится в разных частях ТГц и ИК диапазонов.

Благодаря одноатомной толщине графена задача смешения значительно упрощается из соображений фазового синхронизма двух волн, а исследованные ранее линейные спектры показали многомодовость и продемонстрировали резонансный характер увеличения нелинейности при исследовании эффекта ГТГ. На основании полученных ранее результатов, предлагается использовать эту многомодовость и выбирать частоты взаимодействующих с решеткой ЭМВ ТГц и ИК диапазона вблизи резонансов ППП. Результаты исследований могут быть полезны для моделирования резонансных плазмонных преобразователей частот, поэтому поставлена цель изучить процессы понижающего и повышающего преобразования частот для различных частотных комбинаций источников ЭМВ в условиях плазмонного резонанса. Структура исследуемой бесконечной ДРГ с прямоугольными лентами представлена на рис. 3.15 №*1*.

Алгоритм исследований аналогичный моделированию эффекта ГТГ. На первом этапе исследуются линейные спектры при воздействии одной ЭМВ на ДРГ (рис. 3.46). Графики построены для различным значений химического потенциала и обеих поляризаций падающей ЭМВ. Представленные спектры поглощения обеспечивают широкий выбор высокодобротных резонансов ТГц и ИК диапазона. Рассматривается нормальное падение ЭМВ. Спектры, которые занимают нижнюю часть ИК диапазона и ТГц частоты (рис. 3.46а,в) соответствуют резонансам тока вдоль длинной стороны ленты (*s*- поляризация), спектры поглощения *p*-поляризованной расположены выше по частоте (рис. 3.46б, 3.46г), поскольку резонанс тока устанавливается вдоль узкой стороны ленты. Выбранные размеры ДРГ обеспечивают удачную комбинацию спектров, позволяя перестраивать их изменением химического потенциала. Спектры *p*-поляризованной ЭМВ содержат больше пиков поглощения, поскольку резонансы соответствуют модам высших порядков и предлагают больше вариантов для моделирования преобразователей.

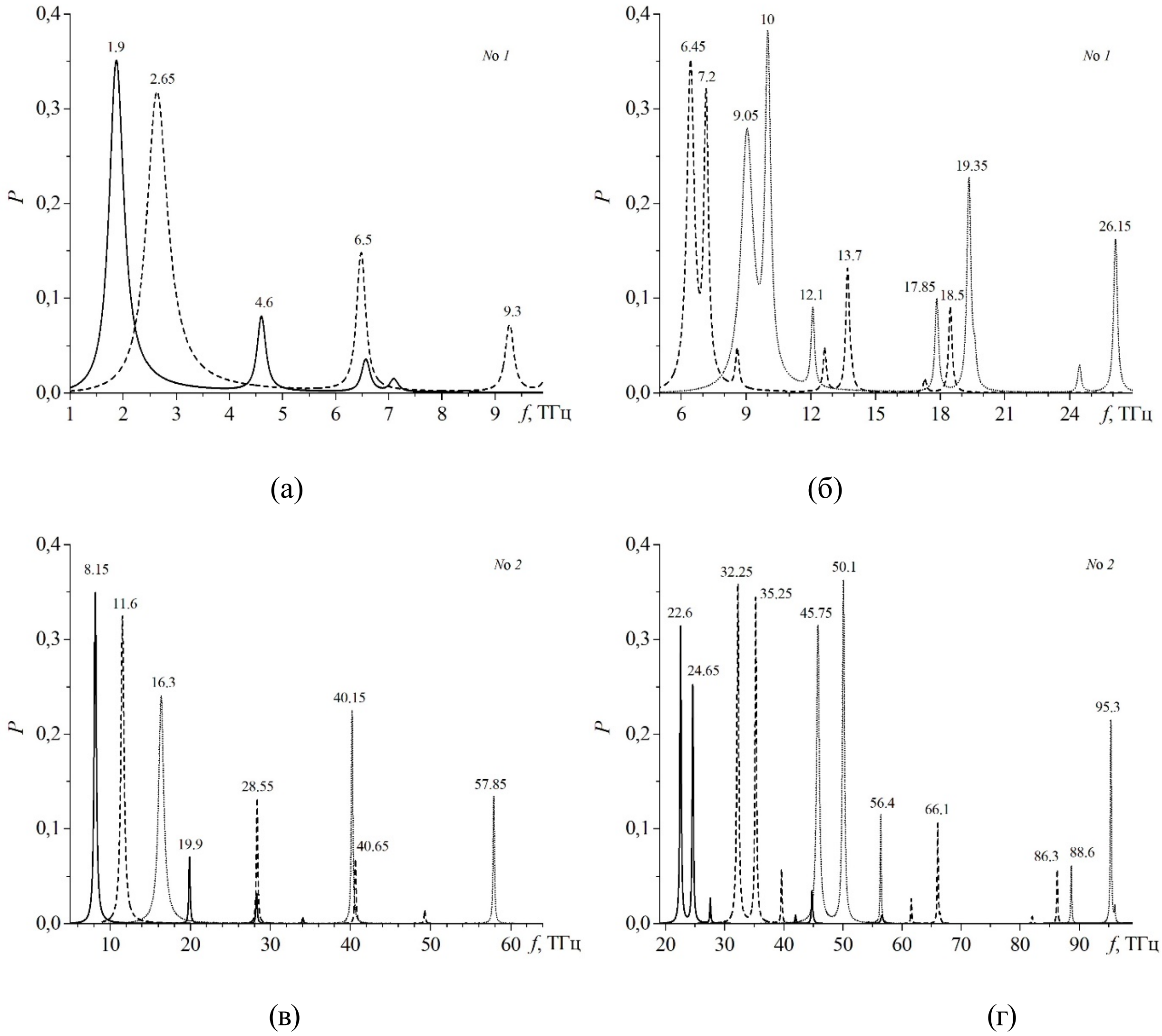


Рис. 3.46 Многомодовые ТГц и ИК линейные спектры поглощения P: сплошные - μ_c = 0.25 эВ, штриховые – 0.5 эВ, пунктирные – 1 эВ. (а, в) s-поляризация; (б, г) p-поляризация. Параметры решеток: №*1* (а, б) $A \times B = 8 \times 2.5$ мкм^2, dx = 10 мкм, dy = 7 мкм, h = 2 мкм; №*2* (в, г) $A \times B = 400 \times 100$ нм^2, d_x = 500нм, d_y = 300 нм, h = 300 нм, τ = 1 пс, T = 300 К. Числа над кривыми – резонансная частота.

Следующий этап моделирования преобразователей – исследование нелинейных спектров. Рассматривается нелинейную дифракцию двух ЭМВ – накачки и сигнала частотами ω_1,ω_2, соотвественно, причем амплитуда накачки значительно превышает амплитуду сигнальной ЭМВ, т.е. $E_1 >> E_2$. Из возможных нелинейных процессов самовоздействия, кросс-модуляции, ГТГ исследуем вырожденное ЧВС с генерацией волн на комбинационных частотах $\omega_3 = 2\omega_1 - \omega_2$ и $\omega_3 = 2\omega_1 + \omega_2$. При учете нелинейной проводимости графена, нелинейный ток

$$\vec{j}_n(2\omega_1 \pm \omega_2) = \frac{1}{4}\sigma_3(2\omega_1 \pm \omega_2)\left|\vec{E}_1(\omega_1)\right|^2 \vec{E}_2(\omega_2)\cos\left[2(\omega_1 t + \varphi_1) \pm (\omega_2 t + \varphi_2)\right].$$

На основании результатов, представленных в главе 1, в ТГц и ИК диапазоне при ненулевом значении химического потенциала нелинейная проводимость графена является чисто межзонной, поэтому для расчетов может быть использована формула (1.19), либо в общем случае (1.18). Расчетам на комбинационной суммарной частоте соответствует знак «+» перед ω_2, на разностной знак «-».

Для возбуждения генерируемых ЭМВ на комбинационных частотах $\omega_3 = 2\omega_1 \pm\omega_2$ с высоким уровнем желательно выполнение следующих условий. Основное условие – высокий ток в лентах на частоте накачки ω_1. Для этого необходимо, чтобы на этой частоте линейный спектр имел резонанс одной из мод ППП. Это может быть настроено как выбором геометрии элементарной ячейки ДРГ, так и частотной настройкой изменением химического потенциала (подробно рассмотрено ранее). Другое условие – частота сигнала ω_2 также должна находиться вблизи резонанса одной из мод ППП. Последнее условие -подобрать параметры ДРГ, так чтобы максимум коэффициентов прохождения и отражения соответствовал и комбинационной частоте $\omega_3 = 2\omega_1 \pm\omega_2$. Это легко осуществимо, когда частоты накачки и сигнала ω_1, ω_2 близки. В другом случае, когда ω_1, ω_2 располагаются далеко друг от друга обеспечить резонанс на комбинационной частоте трудно. К тому же, распределение токов которое возбуждает падающая и генерируемая волна при условии равенства частот – разные.

На основании промоделированных линейных спектров, исследованы нелинейные процессы смешения в условия резонанса частот накачки и сигнала:

- генерации ТГц волн при смешении двух ЭМВ среднего ИК диапазона;

- повышающее преобразование частоты из ТГц в средний ИК и из среднего в ближний ИК;

-преобразование близких частот в ТГц и ИК диапазонах.

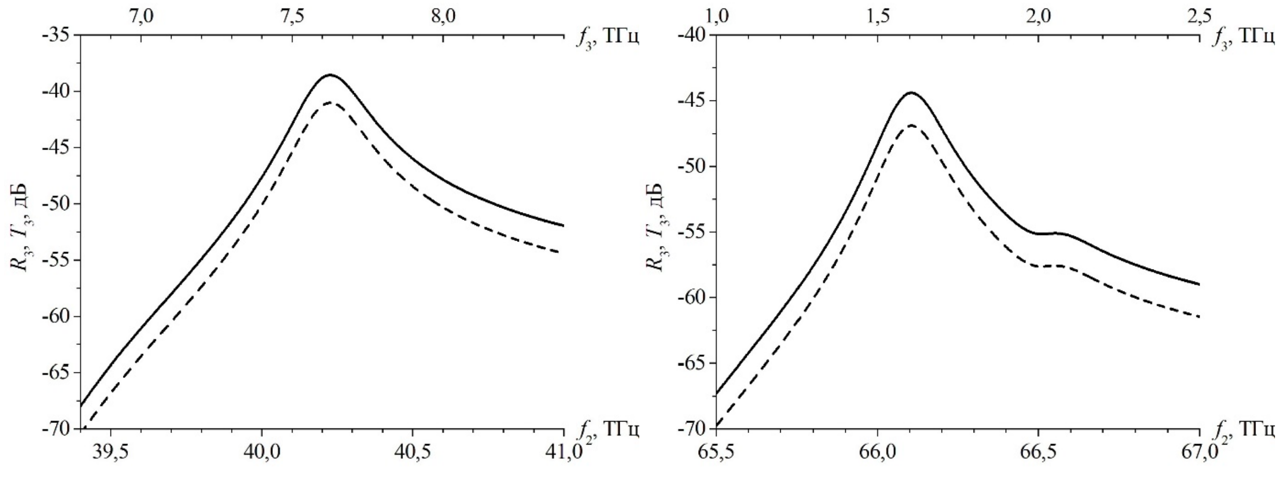
С учетом сформулированных требований для исследований процессов повышающего и понижающего преобразования, требуется, чтобы линейные спектры содержали достаточно удаленные по частоте резонансы. Это обеспечивается в основном размером лент. В ТГц диапазоне эти размеры от нескольких единиц до десятков мкм, в среднем ИК – меньше одного микрометра [10, 14], а при приближении к ближнему ИК размеры уменьшаются до нескольких десятков нанометров (рис. там где ДЗ). Однако такие малые размеры графеновых лент приводят к возникновению квантовых эффектов [15], которые разработанная математическая модель не учитывает.

3.2.3.1 Генерация ТГц волн

Идея генерации ТГц волн достаточно актуальная ввиду нехватки и сложности источников этого диапазона. Для исследования этого нелинейного процесса использованы линейные спектры рис. 3.46в при μ_c= 1 эВ и рис. 3.46г при μ_c= 0.5 эВ. Они наиболее походят, поскольку имеют удачное расположение резонансов в ИК диапазоне, на которые можно настроить частоты волн сигнала и накачки.

На рис. 3.47 показаны результаты моделирования нелинейных спектров генерации на комбинационной разностной частоте $f_3 = 2f_1 - f_2$. Коэффициенты излучаемой мощности в прямом T_3 и отраженном R_3 направлении нормированы на плотность мощности волны накачки. Значительное увеличение генерируемой мощности (коэффициента преобразования частот) наблюдается в резонансных условиях, когда частоты ЭМВ f_1, f_2 расположены в области резонансов основной или высших мод ППП. Частота накачки f_1 во всех случаях фиксирована, частота сигнала f_2 перестраивается. На рис. 3.47а f_1 = 16.3 ТГц, f_2 = 39.4...41 ТГц. В результате такого выбора частот и конфигурации ДРГ обеспечивается генерация на границе ТГц и ИК в диапазоне f_3 = 6.8...8.4 ТГц и максимумом на частоте 7.6 ТГц. На рис. 3.47б выбор частот f_1 = 32.25 ТГц, f_2 = 65.5...67 ТГц обеспечивает генерацию ТГц волн в диапазоне f_3 = 1...2.5 ТГц и максимумом на частоте 1.6 ТГц.

Таким образом, подбирая геометрию элементарной ячейки и параметры графена (химический потенциал), можно реализовать управляемые генераторы во всем ТГц диапазоне частот.



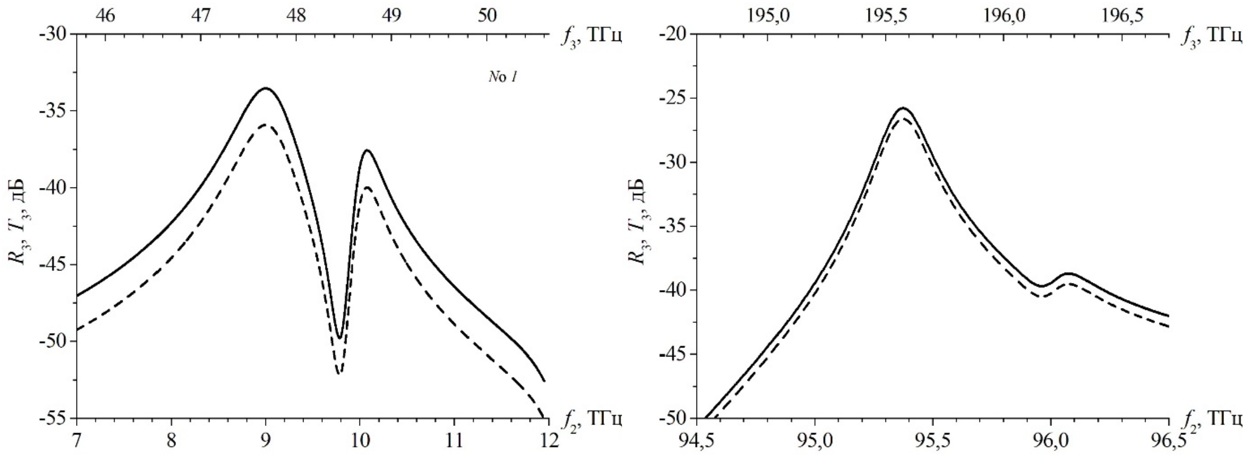
а) б)

Рис. 3.47. Генерация ТГц волн ДРГ при понижающем преобразовании частот. Нелинейные спектры генерируемой комбинационной частоты $f_3 = 2f_1 - f_2$. Сплошные кривые – прямое направление генерации T_3, штриховая - обратное R_3. (а) f_3 = 6.8...8.4 ТГц, μ_c = 1 эВ; (б) f_3 = 1...2.5 ТГц, μ_c = 0.5 эВ. Параметры ДРГ (а) рис. 3.46в; (б) рис. 3.46г, $P_1 = 10^{-5}$ мВт/мм^2.

3.2.3.2 Повышающее преобразование частоты из ТГц в средний ИК и из среднего в ближний ИК

Обратная задача преобразовании ТГц частот в средний ИК является также актуальной, поскольку реализует возможность визуализации ТГц волн. При моделировании этого процесса резонансные спектры должны удовлетворять следующему условию: иметь резонансы как в ТГц диапазоне, так и в ИК. Под это требование подходят спектры рис 3.46б при μ_c= 0.5 и μ_c= 1 эВ. Здесь резонанс основной моды - на ТГц частотах, высших мод - в ИК.

На рис. 3.48а показаны результаты моделирования нелинейных спектров генерации на комбинационной суммарной частоте $f_3 = 2f_1 + f_2$. Частота ЭМВ сигнала f_2 = 7...12ТГц находится в области резонанс основной моды, волна накачки настроена резонанс высшей моды f_1 = 19.35 ТГц f_1, f_2. Получено. значительное увеличение генерируемой мощности на частоте f_3 = 45.7...50.65ТГц в резонансных условиях. Аналогично проведено моделирование преобразования частоты из среднего в ближний ИК (рис. 3.48б, 3.48в) с использованием спектров рис. 3.46б,г.



(а) (б)

Рис. 3.48. Повышающее преобразования частоты из ТГц в средний ИК (а) и из среднего ИК в ближний (б). Нелинейные спектры генерируемой комбинационной частоты $f_3 = 2f_1 + f_2$. Сплошные кривые – прямое направление генерации T_3, штриховая - обратное R_3. (а) f_3 = 45.7...50.65 ТГц, f_2 = 7...12 ТГц f_1 = 19.35 ТГц, μ_c = 1 эВ. (б) f_3 = 194.7...196.7 ТГц, f_2 = 94.5...96.5 ТГц, f_1 = 50.1 ТГц, μ_c = 0.5 эВ. Параметры ДРГ (а) рис. 3.46б; (б) рис. 3.46г, $P_1 = 10^{-5}$ мВт/мм^2.

3.2.3.3 Преобразование близких частот в ТГц и ИК диапазонах

Наиболее простым случаем является моделирование процесса преобразования частот, когда частота сигнала f_2 и накачки f_1 расположены близко. Тогда комбинационная разностная частота $f_3 = 2f_1 - f_2$ оказывается близко расположенной к f_1, f_2 и условия нахождения всех трех частот в резонансе легко выполняются, что приводит к значительному увеличению уровня генерируемой волны (рис. 3.49).

Одним из недостатков предложенных преобразователей является необходимость изменения параметров ДРГ (изменение геометрии или химического потенциала) для настройки на другую рабочую частоту. Одним из путей решения, который был использован при исследовании поглотителей и эффекта ГТГ увеличение количества лент и расположения рядом лент близких длин. Предлагается использовать пятислойную структуру ДРГ с вертикальным расположением лент. Для получения широкополосного спектра поглощения (рис. 3.50а) размеры лент на внутренних слоях были настроены. В такой конфигурации ДРГ реализованы многополосные спектры преобразования частот ИК диапазона (рис. 3.50). При фиксированных параметрах решетки реализована возможность переноса спектра сигнала λ_2 с резонансным увеличением уровня путем изменения длины волны накачки λ_1.

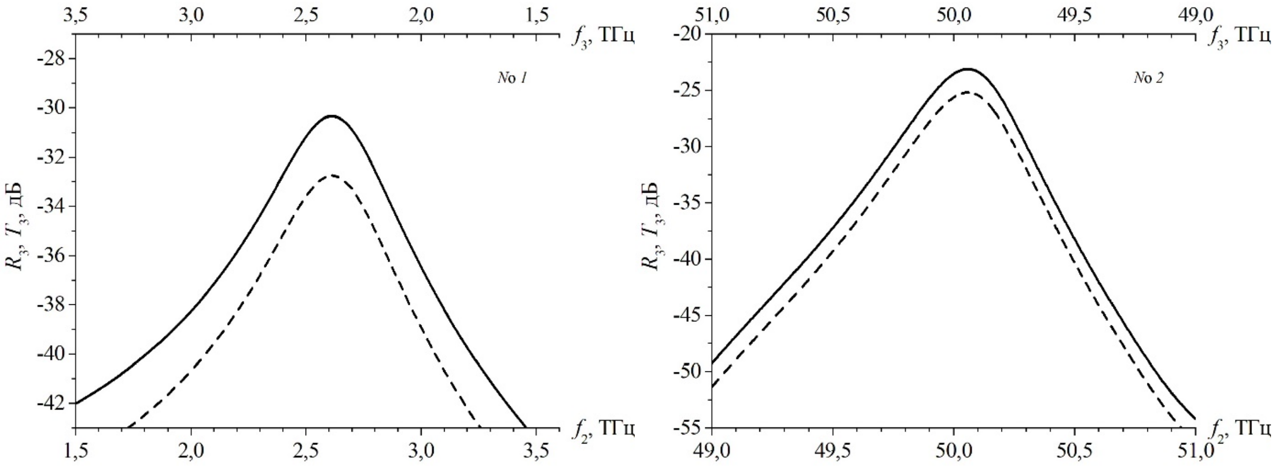
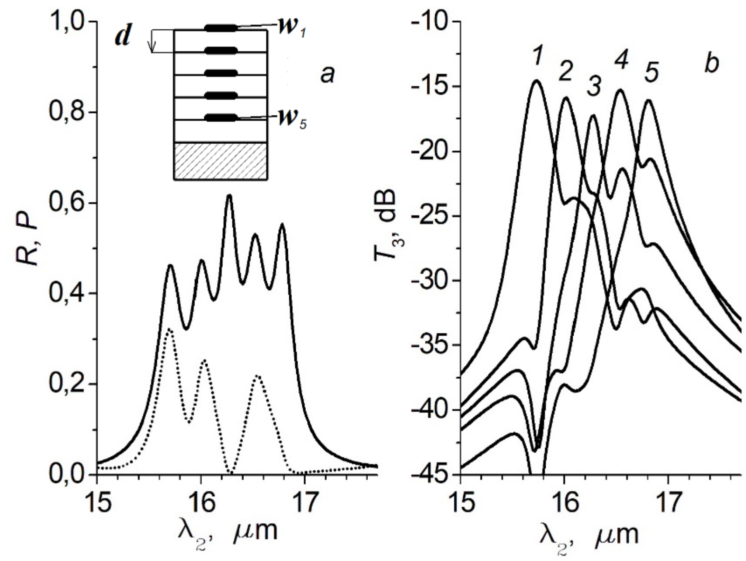


Рис. 3.49. Преобразование частоты на ТГц (а) и ИК частотах (б). Нелинейные спектры генерируемой комбинационной разностной частоты $f_3 = 2f_1 - f_2$. Сплошные кривые – прямое направление генерации T_3, штриховая - обратное R_3. (а) f_3 = 3.5...1.6 ТГц, f_2 = 1.5...3.6 ТГц f_1 = 2.5 ТГц, μ_c = 0.5 эВ, P_1 = 0.1 мВт/мм^2. (б) f_3 = 51...49 ТГц, f_2 = 49...51 ТГц, f_1 = 50 ТГц, μ_c = 1 эВ, P_1 = 10^{-6} мВт/мм^2. Параметры ДРГ (а) рис. 3.46а; (б) рис. 3.46г.



(а) (б)

Рис. 3.50. Многополосное преобразование частоты на основе пятислойной ДРГ с квадратными лентами. (а) Спектры отражения R (точечная кривая) и поглощения P (сплошная) и (б) нелинейные спектры генерируемой мощности T_3. Кривая (*1*) λ_1 = 15.7 мкм, (*2*) 15.99 мкм, (*3*) 16.27 мкм, (*4*) 16.52 мкм, (*5*) 16.79 мкм; μ_c = 0.4 эВ, w_1 = 200 нм, w_2 = 170 нм, w_3 = 165 нм, w_4 = 160 нм, w_5 = 155 нм, $d_x = d_y$ = 500 нм, d = 2.8 μm, $P_1 = 10^{-6}$ мВт/мм^2.

Выводы

На основе запрограммированной математической модели линейной и нелинейной дифракции исследованы радиофизические характеристики бесконечных двумерно-периодических дифракционных решеток на основе графеновых лент. В результате исследования линейных спектров отражения, прохождения и поглощения падающей ЭМВ обнаружены области, которые соответствуют резонансам ППП основной и высших мод в графеновых лентах. Резонансное поведение линейных спектров наблюдается в диапазоне от ТГц до ИК. В этих резонансных областях может поглощаться более 30% мощности падающих волн *p*- и *s*-поляризации для однослойных ДРГ. На основании обнаруженного эффекта проведено моделирование плазмонных поглотителей. При размещении нескольких лент близкой длины и дополнительных сплошных графеновых удалось достичь поглощения более 90% падающей энергии с относительной шириной около 20% в ТГц диапазоне. Показана возможность использования таких структур в качестве поляризаторов с высокой развязкой по коэффициенту отражения.

Проведены исследования дифракции на графеновых ДР в нелинейном режиме при воздействии полем ЭМВ одной частоты. Полученные нелинейные спектры демонстрируют значительное увеличение мощности ТГ, когда частота падающей ЭМВ близка к резонансным частотам основной или высших мод ППП. Как результат этот резонансный механизм приводит к увеличению ближнего поля и нелинейности ДР.

Рассмотрено влияние параметров диэлектрика, графеновых лент и структуры элементарной ячейки на электродинамические характеристики ДРГ в линейном режиме и при моделировании эффекта генерации ТГ. При исследовании влияния количества и расположения графеновых лент, продемонстрирована возможность значительного увеличения коэффициента поглощения и уровня ГТГ при увеличении количества слоев графен – диэлектрик. Оптимизируя толщины диэлектрических слоев, можно добиться как синфазности, так и противофазности многократно отраженных волн, тем самым увеличив или уменьшив эффективность линейного и нелинейного отклика ДР. Еще одним механизмом управления частотно-селективными и нелинейные свойствами ДР является варьирование размерами графеновых лент и периодичностью их расположения. При уменьшении периодичности решетки и ширины графеновых лент (резонанса тока вдоль длинной стороны ленты) для решеток с высокой плотностью упаковки резонансные частоты перемещаются в сторону более высоких ТГц частот, и максимумы интенсивности ТГ.

Одним из наиболее значимым результатов исследования является возможность управления проводимостью графена без изменения геометрии ДР. При изменении химического потенциала, который может быть перестроен приложением внешнего электрического поля, возможно управлять резонансной частотой ДР и уровнем генерации ТГ.

Представлена дополнительная возможность усиления взаимодействия ЭМВ с ДР и уровня нелинейных эффектов – применение многослойных диэлектрических и металлических зеркал. Например, квазипериодическая диэлектрическая подложка (ДЗ) может подавлять волны первой гармоники, и увеличивать излучаемую мощность третьей гармоники. Применение МЗ позволяет значительно увеличить мощность ТГ, излучаемой в отраженном направлении и получить эффект полного поглощения на резонансных частотах.

Разработанный пакет электродинамического моделирования позволяет исследовать процессы нелинейного смешения двух волн. Представлены результаты моделирования многомодовых линейных спектров в диапазоне от ТГц до ИК. При использовании полученных линейных спектров проведены исследования преобразования частот. Продемонстрированы возможности:

- генерации ТГц волн при смешении двух ЭМВ среднего ИК диапазона;
- повышающего преобразования частоты из ТГц в средний ИК и из среднего в ближний ИК;
- преобразование близких частот в ТГц и ИК диапазонах.

Показано, что значительное увеличение генерируемой мощности $f_3 = 2f_1 \pm f_2$ТГц, когда частоты ЭМВ f_1, f_2 расположены в области резонансов основной или высших мод ППП. Представленные в данной главе численные результаты могут быть полезны для проектирования широко спектра плазмонных устройств ТГц и ИК диапазонов, а именно поглотителей, поляризаторов, генераторов ТГ, преобразователей частот, систем регистрации и визуализации ТГц волн, а также при разработке маршрутизации близко расположенных по частоте каналов в беспроводных ТГц-системах связи.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основными результатами диссертационного исследования являются разработанная математическая модель линейной и нелинейной дифракции ЭМВ на бесконечных ДРГ и полученные на ее основе результаты моделирования плазмонных устройств в ТГц и ИК диапазоне. Разработанный пакет программ электродинамического анализа позволяет проводить исследования линейных спектров отражения, прохождения и поглощения ЭМВ, а также нелинейных спектров излучаемой мощности в прямом и отраженном направлении на частоте третьей гармоники, суммарных и разностных комбинационных частотах в задаче смешения двух волн.

Глава 1. При исследовании оптических свойства графена продемонстрирована возможность взаимодействия с полем ЭМВ в широком диапазоне частот - от ТГц до оптики. Показано, что концентрацией носителей в широких пределах можно управлять перестройкой химического потенциала, которая может осуществляться как допированием, так и электрическим управлением. Таким образом, имеется возможность управления оптической проводимостью материала. На ТГц и ИК частотах для легированного графена возможны условия, когда действительная часть эквивалентной проницаемости отрицательна. В этом случае на границе раздела графен – диэлектрик может распространяться локализованный ППП, который на порядки усиливает взаимодействие поле падающей ЭМВ с материалом. Благодаря свойству линейности энергетического спектра, графен проявляет выраженный нелинейный отклик, который описывается нелинейной проводимостью третьего порядка. Представлены теоретические модели, которые прогнозируют ряд нелинейных явлений в ДР на основе графена – в частности генерацию ТГ, ЧВС и другие процессы. Обозначены области применимости формул проводимости третьего порядка и приведены экспериментальные подтверждения исключительной нелинейности графена на ТГц и ИК частотах, делая графен одним из лучших кандидатов для моделирования высокоэффективных нелинейных устройств. Проведенный обзор актуальных научных исследований плазмонных устройств на основе графена показал высокую эффективность поглотителей, генераторов третьей гармоники и преобразователей частот на основе многослойных дифракционных решеток графеновых лент.

Глава 2. Разработан и численно реализован алгоритм решения двумерной линейной краевой задачи дифракции, который использует ИГУ для электрического поля вблизи неоднородностей (графеновых, импедансных, идеально проводящих). В качестве базисных функций в разложении тока применяются полиномы Лежандра и Гегенбауэра, которые учитывают особенностей распределения тока на прямоугольных графеновых лентах. Полученная система ПСУ решается методом Галеркина. Представлен алгоритм сведения двумерной задачи к одномерному случаю. Проведена верификация результатов расчета представленной математической модели сравнением с результатами расчетов методом ОИДУ. Получено практически полное совпадение.

Решена нелинейная краевая задача дифракции методом возмущения. Основной идеей метода является использование поля, полученного в линейном режиме и учет нелинейной проводимости третьего порядка графена на этапе удовлетворения ИГУ. Задача разделена на два случая - нахождение поля на утроенной частоте при падении одной ЭМВ и случай смешения двух ЭМВ (мощной волны накачки и сигнальной волны меньшей амплитуды) для нахождения поля на комбинационных суммарных и разностных частотах. Приведена оценка погрешности метода возмущения.

Глава 3. С помощью разработанного пакета программ электродинамического анализа исследованы радиофизические характеристики бесконечных ДРГ при воздействии полем ЭМВ одной или двух частот. Линейные спектры отражения, прохождения и поглощения падающей ЭМВ демонстрируют резонансы в диапазоне от ТГц до ИК. Этот резонансный механизм приводит к увеличению ближнего поля вблизи графеновых лент и усилению взаимодействия с ЭМВ. Приведены новые результаты расчетов широкополосных ТГц поглотителей с коэффициентом поглощения более 90% и относительной шириной 20%, которые также могут применяться в качестве поляризаторов с развязкой более 20 дБ по коэффициенту отражения.

В нелинейных спектрах показано увеличение уровня генерации ТГ, когда частота падающей ЭМВ близка к резонансным частотам основной или высших мод ППП. Показаны способы усиления взаимодействия с внешним полем и увеличения уровня генерации частотных и комбинационных гармоник:

- применение графеновых лент конечных размеров в качестве резонаторов ППП;
- выбор рабочих частот ДР в области резонанса основной или высших мод ППП;
- увеличение количества слоев графен-диэлектрик для увеличения общей оптической проводимости ДРГ;
- оптимизация толщины разделительного диэлектрического слоя для дополнительной частотной селекции;
- применение диэлектрических и металлических зеркал,
- увеличение плотности упаковки графеновых лент (уменьшение периода ДР),

а также механизмы управления резонансной частотой ДРГ и уровнем нелинейных эффектов:

- изменение размера графеновой ленты,
- перестройка химического потенциала графена.

Представлены результаты моделирования процесса преобразования частот при смешении двух ЭМВ ТГц и ИК диапазона. Получено значительное повышение уровня генерируемых ТГц, ИК ЭМВ, когда частоты сигнала и накачки выбираются вблизи резонансных частот мод ППП основного и высшего порядков. Приведены новые результаты расчетов генераторов ЭМВ ТГц диапазона, повышающих преобразователей частот из ТГц в ИК (визуализатор

ТГц излучения) и из среднего ИК в ближний, а также преобразователей частот в пределах одного частотного диапазона.

Таким образом, предложенные ДРГ обеспечивают способ реализации эффективных управляемых плазмонных широкополосных линейных и нелинейных устройств будущего, таких как поглотители, поляризаторы, умножители и генераторы ТГц и ИК частот, устройства четырехволнового смешения для нелинейной ТГц спектроскопии и неинвазивных ТГц процессоров, смесителей, модуляторов для применений в системах безопасности, обнаружения, телекоммуникации, оптической связи и оптической обработке сигналов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hou Y., Jiang C. Ultrahigh-efficiency Enhanced Four-wave-mixing in Si-Ge-Graphene Photonic Crystal Waveguide // Current Chinese Physics. 2021. V. 1. №3, P. 299-305.
2. Nagatsuma T., Horiguchi Sh., Minamikata Y. et al. Terahertz wireless communications based on photonics technologies // Optics Express. 2013. V. 21. № 20. P. 23736-47.
3. Hajian H., Ghobadi A., Butun B., Ozbay E. Tunable, omnidirectional, and nearly perfect resonant absorptions by a graphene // Optical Society of America under the terms of the OSA. 2018. V. 26, №13. P. 16940
4. Pan F., Fei L., Guang R. A broadband metamaterial absorber based on multi-layer graphene in the terahertz region // Optics Communications 2018. P. 62-66.
5. Chen Z., Cai P., Wen Q. et al. Graphene Multi-Frequency Broadband and Ultra-Broadband Terahertz Absorber Based on Surface Plasmon Resonance // Electronics. 2023. V. 12. P. 2655.
6. Longfang Y., Yao C., Guoxiong C. et al. Broadband absorber with periodically sinusoidally-patterned graphene layer in terahertz range // Optics Express. 2017. V. 25. №10. P. 11223.
7. Yijun C., Kai-Da X. Tunable broadband terahertz absorber based on multilayer graphene sandwiched plasmonic structure // Optics Express. 2018. V. 26. №24. P. 31693.
8. Chen D., Yang J., Zhang J., Huang J., Zhang Z. Tunable broadband terahertz absorbers based on multiple layers of graphene ribbons // Scientific Reports. 2017. V. 7. №1.
9. Tang, X., Jia, et al. A Tunable Terahertz Absorber Based on Double-Layer Patterned Graphene Metamaterials // Materials. 2023. V. 16. P. 4166.
10. Jianying G. Design and Simulation of a Dual-Band Terahertz Metamaterial Absorber Based on a Slot-Patterned Monolayer Graphene Structure // Journal of Electronic Materials. 2022. P. 6475-6480.

11. Sun L., Liu D., Su J. et al. Near Perfect Absorber for Long-Wave Infrared Based on Localized Surface Plasmon Resonance // Nanomaterials. 2022. V. 12. P. 4223.
12. Parmar J., Patel S.K., Katkar V. Graphene-based metasurface solar absorber design with absorption prediction using machine learning // Sci Rep. 2022. V. 12. P.2609.
13. Chen H., Chen Z., Yang H. et al. Multi-mode surface plasmon resonance absorber based on dart-type single-layer graphene // RSC Adv. 2022. V. 12. P. 7821.
14. Kai-Da X., Yijun C., Xianbo C. et al. Multi-band THz absorbers using T-shaped slot-patterned graphene and its complementary structure // Optical Society of America. 2020. V. 37. №10.
15. Yan L., Rui H., Zhengbiao O. Numerical Investigation of Graphene and STO Based Tunable Terahertz Absorber with Switchable Bifunctionality of Broadband and Narrowband Absorption // Nanomaterials August 2021. V. 11. №8.
16. Mahdi R., Soheil N., Saeed G., Hamed B., Hamid V. A Tunable Perfect THz Metamaterial Absorber with Three Absorption Peaks Based on Nonstructured Graphene // Plasmonics. 2021. P. 1665–1676.
17. Mahdi R., Hamid R., Ali A. Multilayer graphene-based metasurfaces: Robust design method for extremely broadband, wide-angle and polarization-insensitive terahertz absorbers // Applied Optics January 2018. V. 57. №4. P. 959-968.
18. Ren Q., You J., Panoiu N. Comparison Between the Linear and Nonlinear Homogenization of Graphene and Silicon Metasurfaces // IEEE Access. 2020.
19. Bahareh A., Zahra A. Two new broadband and tunable terahertz pyramid patch/disk absorbers based on graphene metasurface // Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications August 2022. V. 52. №6.
20. Longfang Y., Fang Z., Yong Z. et al. Frequency-Reconfigurable Wide-Angle Terahertz Absorbers Using Single- and Double-Layer Decussate Graphene Ribbon Arrays // Nanomaterials October 2018. V. 8. №10. P. 834.

21. Ding J., Arigong B., Ren H. et al. Mid-Infrared Tunable Dual-Frequency Cross Polarization Converters Using Graphene-Based L-Shaped Nanoslot Array // Plasmonics. 2015. V. 10. P. 351–356.
22. Yang C., Luo Y., Guo J. et al. Wideband tunable mid-infrared cross polarization converter using rectangle-shape perforated graphene // Opt Express. 2016. V. 24. P. 16913-16922.
23. Chen M., Sun W., Cai J. et al. Frequency-Tunable Mid-Infrared Cross Polarization Converters Based on Graphene Metasurface // Plasmonics. 2017. V. 12. P. 699–705.
24. Tianhe Q., Xiaoqing Ch., Hui Y. et al. Dual tunable terahertz polarization conversion enabled by Double-Layer Graphene Metasurface // Optics Communications. 2022. V. 521. P. 128575.
25. Tavakol R., Rahmani B., Khavasi A. Terahertz Quarter Wave-Plate Metasurface Polarizer Based on Arrays of Graphene Ribbons // IEEE Photonics Technology Letters. 2019. V. 31, №12. P. 931-934.
26. Mabrouk A.M., Seliem A.G., Donkol A.A. Reconfigurable graphene-based metamaterial polarization converter for terahertz applications // Opt Quant Electron. 2022. V. 54. P. 769.
27. Fallahi A., Perruisseau-Carrier J. Design of tunable biperiodic graphene metasurfaces // Physical Review. 2012. V. 86. P. 195408.
28. Salmon A., Bouchon P., Rommeluere S., Haidar R. Terahertz imaging by THz→IR conversion // Conference: 2019 44th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves September 2019.
29. Jian Y., Zhihao L., Panoiu N. Four-wave mixing of topological edge plasmons in graphene metasurfaces // Science Advances March 2020. V. 6. №13.
30. Kundys D., Duppen B., Marshall O. P. et al. Nonlinear light mixing by graphene plasmons // Nano Letters May 2017. V. 18. №1.

31. Kim S., Min S., Brar V. et al. Electronically tunable extraordinary optical transmission in graphene plasmonic ribbons coupled to subwavelength metallic slit arrays // Nature Communications August 2016. V. 7. P. 12323.
32. Malevich Y.M., Ergoktas S., Gokhan B. et al. Video-speed Graphene Modulator Arrays for Terahertz Imaging Applications // ACS Photonics August 2020.
33. Jian W., Panoiu N.C. Tunable and Dual-broadband Giant Enhancement of SHG and THG in a Highly-engineered Graphene-Insulator-Graphene Metasurface // Physical Review B September 2020.
34. Nasari H., Abrishamian M. Nonlinear terahertz frequency conversion via graphene microribbon array // Nanotechnology July 2016. V. 27. №30.
35. Jian W., Jie Y., Weismann M., Panoiu N.C. Double-resonant enhancement of third-harmonic generation in graphene nanostructures // Philosophical Transactions of The Royal Society A Mathematical Physical and Engineering Sciences March 2017. V. 375. №2090
36. Boyuan J., Tianjing G., Argyropoulos C. Enhanced third harmonic generation with graphene metasurfaces // Journal of Optics April 2017 V. 19. №9.
37. Geim A.K., Novoselov The Rise of Graphene // Nature Materials April 2007. V. 6. №3. P. 183-191.
38. Chuanbao L., Yang B., Ji Z., Qian Z., Lijie Q. A Review of Graphene Plasmons and its Combination with Metasurface // Journal of the Korean Ceramic Society. 2017. V. 54. №5. P. 349~365.
39. Luo X., Qiu T., Ni Z., Lu W. Plasmons in graphene: Recent progress and applications // Materials Science and Engineering: R Reports. 2013. V. 74. №11. P. 351-376.
40. Koppens F. H., Chang D.E., García de Abajo F.J. Graphene plasmonics: A platform for strong light-matter interaction // Nano Lett 2011. V. 11. №8. P. 3370-7.
41. Yao Y., Kats M.A., Genevet P., Yu N. et al. Broad Electrical Tuning of Graphene-Loaded Plasmonic Antennas // Nano Lett. 2013. V. 13. P. 1257–1264.

42. Liu P.Q., Luxmoore I.J., Mikhailov S.A. et al. Highly tunable hybrid metamaterials employing split-ring resonators strongly coupled to graphene surface plasmons // Nat. Commun. 2015. V. 6. P. 8969.
43. Yao Y., Shankar R., Kats M.A. et al. Electrically tunable metasurface perfect absorbers for ultrathin mid-infrared optical modulators // Nano Lett. 2014. V. 14. P. 6526–6532.
44. www.quantummadesimple.com
45. Yijun C., Kai-Da X., Rongrong G., Qing H. Graphene-Based Plasmonic Tunable Dual-Band Bandstop Filter in the Far-Infrared Region // IEEE Photonics Journal October 2018.
46. Chen C.-F., Park C.-H., Boudouris B.W. et al. Controlling Inelastic Light Scattering Quantum Pathways in Graphene // Nature. 2011. V. 471. №7340. P. 617.
47. Dmitriev V., Nobre F. et al. Nonreciprocal dynamically tunable power dividers by three (1x3) based on graphene for terahertz region // Optics Communications. 2022. V. 506. P. 127312.
48. Stern E., Ferrell R.A. Surface Plasma Oscillations of a Degenerate Electron Gas // Physical Review. 1959. V. 120. №1. P. 130-136.
49. Ritchie R.H. Plasma Losses by Fast Electrons in Thin Films // Physical Review. 1957. V. 106. №5. P. 874-881.
50. Xiaoguang L., Teng Q., Weibing L., Zhenhua N. Plasmons in graphene: Recent progress and applications // Materials Science and Engineering R Reports September 2013. V. 74. №11.
51. Названов В.Ф. Поверхностные электромагнитные волны оптического диапазона (плазмоны-поляритоны): свойства, применение// Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика 2015. V. 15. №1. P. 5–14.
52. Майер С.А. Плазмоника: теория и приложения: пер. с англ. - М.; Ижевск: R&C Dynamics, 2011. - 277 с.

53. Allen S.J., Tsui D., Logan R. Observation of the Two-Dimensional Plasmon in Silicon Inversion Layers // Physical Review Letters. 25 April 1977.
54. Климов В.В. Наноплазмоника . 2-е изд., испр. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010 - 480 с. - ISBN 978-5-9221-1205-5.
55. Xiao Y. and Rui L. Comparison of Graphene-Based Transverse Magnetic and Electric Surface Plasmon Modes // IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. 2014. V. 20. №1. P. 62–67.
56. Gong J. Graphene - Synthesis, Characterization, Properties and Applications. InTech, 2011. doi: 10.5772/1742.
57. Bonaccorso F., Lombardo A., Hasan T. Et al. Production and processing of graphene and 2d crystals // Materialstoday. 2012. V. 15. P. 564-589.
58. Kim K.S., Zhao Y., Jang H. Et al. Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes // Nature. 2009. V. 457. P. 706-710.
59. Eletskii A. V., Iskandarova I. M., Knizhnik A.A., Krasikov D.N. Graphene: Fabrication methods and thermophysical properties // Physics-Uspekhi March 2011. V. 54. №3. P. 233.
60. Godwin A., Selvamani S., Shri M.K. Mini review on graphene – synthesis, properties and applications // International Journal of Research inEngineering and Bioscience. 2015. V. 3. №5. P. 01-10
61. Ju L., Geng, B., Horng J. et al. Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials // Nat. Nanotechnol. 2011. V. 6. №10. P. 630.
62. Hu H., Yang X., Zhai F. et al. Far-field nanoscale infrared spectroscopy of vibrational fingerprints of molecules with graphene plasmons // Nat. Commun. 2016. V. 7. P. 12334.
63. Z. Fang, S. Thongrattanasiri et al.// Gated Tunability and Hybridization of Localized Plasmons in Nanostructured Graphene. ACS Nano. 2013. V. 7. P. 2388.
64. Liangze W., Jia Z., Na L. et al. Fast patterned graphene ribbons via soft–lithography // Procedia CIRP December 2016. V. 42. P. 428-432.

65. Ji F., Wenbin L., Xiaofeng Q. et al. Patterning of graphene // Nanoscale July 2012. V. 4. №16. P. 4883-4899.
66. Chen Z., Akimitsu N., Müllen K. Graphene Nanoribbons: On-Surface Synthesis and Integration into Electronic Devices // Advanced Materials November 2020. V. 32. №45. P. e2001893
67. Keong Y., Ashraf A., Kang P., Nam S. Rapid Stencil Mask Fabrication Enabled One-Step Polymer-Free Graphene Patterning and Direct Transfer for Flexible Graphene Devices // Scientific Reports April 2016. V. 6. №1. P. 24890.
68. Jiao Chi Efficient mid-infrared wavelength converter based on plasmon-enhanced nonlinear response in graphene nanoribbons // Journal of Physics D Applied Physics November 2021. V. 55. №11.
69. Shobhit K.P., Mayurkumar L., Vishal S., Tianjing G. Graphene based tunable grating structure // Materials Research Express October 2018. V. 6. №2.
70. Theodosi A., Tsilipakos O., Soukoulis M.C. et al. 2D-patterned Graphene Metasurfaces for Efficient Third Harmonic Generation at THz Frequencies // Optics Express December 2021. V. 30. №1. P. 460-472.
71. Low T., Avouris P. Graphene Plasmonics for Terahertz to Mid-Infrared Applications // ACS Nano. 2014. V. 8. №2. P. 1086-1101.
72. Cui L., Wang J., Sun M. Graphene plasmon for optoelectronics // Reviews in Physics February 2021. V. 6. №5. P. 100054
73. Watts C.M., Liu X., Padilla W.J. Metamaterial Electromagnetic Wave Absorbers // Advanced Materials. 2012. V. 24. № 23. P. OP98.
74. Das A., Talghader J.J. Enhanced absorption per unit mass for infrared arrays using subwavelength metal–dielectric structures // Journal of the Optical Society of America B. 2020. V. 24. №23. P. OP98-OP120.
75. Hakim M.L., Hanif A. et al. Ultra-thin Ultra-width Band Polarization-Independent Nano-2 architectonics Perfect Metamaterial Absorber for Visible and 3 Infrared Optical Window Applications // Materials. 2022. V.15.

76. D’Aloia A.G., D'Amore M., Sarto M.S. Low-Terahertz Transparent Graphene-Based Absorber // Nanomaterials April 2020. V. 10. №5. P. 843.
77. Argyropoulos C. Enhanced transmission modulation based on dielectric metasurfaces // Optics Express July 2015. V. 23. №18.
78. Zhang R.Z., Zhang Z.M. Tunable positive and negative refraction of infrared radiation in graphene-dielectric multilayers // Appl. Phys. Lett. 9 November 2015. V. 107. №19. P. 191112.
79. Rahman M., Raza A., Younes H. et al. Hybrid graphene metasurface for near-infrared absorbers // Opt. Express 2019. V. 27. P. 24866-24876.
80. Yao Y., Shankar R., Kats M.A. et al. Electrically Tunable Metasurface Perfect Absorbers for Ultrathin Mid-Infrared Optical Modulators // Nano Letters October 2014. V. 14. №11. P. 6526-6532.
81. Ju L., Geng B., Horng J. et al. Graphene plasmonics for tunable terahertz metamaterials // Nature Nanotechnology September 2011. V. 6. №10. P. 630-634.
82. Ooi K.J.A., Leong P.C., Ang L.K., Tan D.T.H. All-optical control on a graphene-on-silicon waveguide modulator // Scientific Reports. 2017. V. 7. №1. P. 12748.
83. Li G., Semenenko V., Perebeinos V., Liu P. Q. Electrically Tunable Terahertz Plasmonic Metasurfaces Employing Multilayer Graphene // Conference on Lasers and Electro-Optics, OSA Technical Digest (Optica Publishing Group). 2020.
84. Mikhailov S.A. Non-linear electromagnetic response of graphene // EPL. 2007. V. 79. №2. P. 27002.
85. Mikhailov S.A., Ziegler K. Nonlinear electromagnetic response of graphene: Frequency multiplication and the self-consistent-field effects // Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. V. 20. №38. P. 256-259.
86. Dragoman M., Neculoiu D., Deligeorgis G. et al. Millimeter-wave generation via frequency multiplication in graphene // Applied Physics Letters. 2010. V. 97. №9. P. 093101-3.
87. Hendry E., Hale P.J., Moger J. et al. Coherent Nonlinear Optical Response of Graphene // Physical Review Letters. 2010. V. 105. №9. P. 097401.

88. Hafez H.A., Turchinovich D., Bonn M. et al. Terahertz Nonlinear Optics of Graphene: From Saturable Absorption to High-Harmonics Generation // Adv. Opt. Materials. 2019. V. 7. №19. P. 1900771.
89. Wu R., Zhang Y., Yan S. et al. Purely Coherent Nonlinear Optical Response in Solution Dispersions of Graphene Sheets // Nano Letters. 2011. V. 11. №12. P. 5159-5164.
90. Zhang H., Virally S., Bao Q. et al. Z-scan measurement of the nonlinear refractive index of graphene // Optics Letters. 2012. V. 37. №11. P. 1856-1858.
91. Kumar N., Kumar J., Gerstenkorn C. et al. Third harmonic generation in graphene and few-layer graphite films // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. 2013. V. 87. №12. P. 121406.
92. Hong S.-Y., Dadap J.I., Osgood Jr. et al. Optical Third-Harmonic Generation in Graphene // Physical Review X. 2013. V. 3. №2. P. 021014.
93. Soavi G., Wang G., Purdie D.G. et al. Broadband, electrically tunable third harmonic generation in graphene // Nature Nanotechnology. 2018. V. 13. №7. P. 583 - 588.
94. Dremetsika E., Kockaert P. Enhanced optical Kerr effect method for a detailed characterization of the third order nonlinearity of 2D materials applied to graphene // Phys. Rev. B. 2017. V. 96. №23. P. 235422.
95. Dremetsika E., Dlubak B., Gorza S.-P. et al. Measuring the Nonlinear Refractive Index of Graphene using the Optical Kerr Effect Method // Opt. Lett. 2016. V. 41. №14. P. 3281-3284.
96. Kundys D., Marshall O.P., Rodriguez F. et al. Nonlinear Light Mixing by Graphene Plasmons // Nano Letters. 2018. V. 18. №1. P. 282-287.
97. Gu T., Petrone N., McMillan J. F. et al. Regenerative oscillation and four-wave mixing in graphene optoelectronics // CLEO: Science and Innovations 2012. San Jose. California. United States. 6–11 May 2012.
98. Zhou R., Guo T., Huang L., Ullah K. Engineering the harmonic generation in graphene // Materials Today Physics. 2022. V. 23. P. 100649.

99. König-Otto J.C., Wang Y., Belyanin A. et al. Four-Wave Mixing in Landau-Quantized Graphene // Nano Letters. 2017 V. 17. № 4. P. 2184-2188.
100. Alexander K., Savostianova N. A., Mikhailov S. A. et al. Electrically Tunable Optical Nonlinearities in Graphene-Covered SiN Waveguides Characterized by Four-Wave Mixing // ACS Photonics. 2017. V. 4. №12. P. 3039–3044.
101. Mikhailov S.A. Theory of the giant plasmon-enhanced second-harmonic generation in graphene and semiconductor two-dimensional electron systems // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. №4.
102. Boyd R.W. Nonlinear optics. San Diego. CA: Academic Press, 2008.
103. Pitilakis A., Chatzidimitriou D., Kriezis E.E. Theoretical and numerical modeling of linear and nonlinear propagation in graphene waveguides // Opt Quant Electron. 2016. V. 48. P.243.
104. Lin I-T., Fan C., Liu J.-M. Propagating and Localized Graphene Surface Plasmon Polaritons on a Grating Structure // IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. 2017. V. 23. №1. P. 4600704.
105. Jin B., Argyropoulos C. Nonlinear graphene metasurfaces with advanced electromagnetic functionalities // Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering 16, Design, Materials Fabrication, Characterization, and APlications. 2018. P. 107221.
106. Linder J., Halterman K. Dynamical tuning between nearly perfect reflection, absorption, and transmission of light via graphene/dielectric structures // Scientific Reports. 2016. V. 6. P. 38141
107. Shareef S., Ang Y.S., Zhang C. Room-temperature strong terahertz photon mixing in graphene // J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys. 2012. V. 29. №3. P. 274.
108. Smirnova D.A., Shadrivov I.V., Kivshar Y.S., Smirnov A.I. Dissipative plasmon-solitons in multilayer graphene // Laser & Photonics Reviews. 2014. V. 8. №2. P.291-296.
109. Gorbach A.V. Nonlinear graphene plasmonics: amplitude equation // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. №1. P. 013830.

110. Cheng J.L., Vermeulen N., Sipe J.E. Third order optical nonlinearity of graphene // New J. Phys. 2014. V. 16. P. 053014.
111. Cheng J.L., Vermeulen N., Sipe J.E. Third order nonlinearity of graphene: effects of phenomenological relaxation and finite temperature // Phys. Rev. B. 2015 V. 91. №23. P. 235320.
112. Mikhailov S.A. Quantum theory of the third-harmonic generation in graphene // Physical Review B. 2014. V. 90. №24. P. 241301.
113. Mikhailov S.A. Quantum theory of the third-order nonlinear electrodynamic effects of graphene // Physical Review B. 2016. V. 93. №8. P. 085403.
114. Xenogiannopoulou E., Aloukos P., Couris S. et al. Third-order nonlinear optical properties of thin sputtered gold films // Optics Communications. 2007. V. 275. №1. P. 217-222.
115. Marini A., Conforti M., della Valle G. et al. Ultrafast nonlinear dynamics of surface plasmon polaritons in gold nanowires due to the intrinsic nonlinearity of metals // New J. Phys. 2013. V. 15. №1. P. 013033.
116. König-Otto J.C., Wang Y., Belyanin F. et al. Four-Wave Mixing in Landau-Quantized Graphene // Nano Letters. 2017. V. 17. №4. P. 2184-2188.
117. Hafez H.A., Kovalev S., Deinert J.C. et al. Extremely efficient terahertz high-harmonic generation in graphene by hot Dirac fermions // Nature. 2018. V. 561. P. 507–511.
118. Savostianova N.A., Mikhailov S.A. Third harmonic generation from graphene lying on different substrates: Optical-phonon resonances and interference effects // Optics Express. 2017. V. 25. №4. P. 3268-3285.
119. Savostianova N.A., Mikhailov S.A. Giant enhancement of the third harmonic in graphene integrated in a layered structure // Applied Physics Letters. 2015. V. 107. №18. P. 181104.
120. Wang H., Hu F. et al. 3 bit terahertz coder based on a graphene composite metasurface // J. Opt. Soc. Am. B. 2023. V. 40. P. 1350-1358.

121. Deinert J-C., Iranzo D.A., Pérez R. et al. Grating-Graphene Metamaterial as a Platform for Terahertz Nonlinear Photonics // ACS Nano 2021 V. 15. №1. P. 1145-1154.
122. Лерер А.М., Иванова И.Н. // Применение приближенных граничных условий для расчета планарных двумерно-периодических наноплазмонных структур// РЭ. 2016. Т. 61. № 5. С. 435.
123. Силин Р.А., Сазонов В.П. Замедляющие системы // М.: Советское радио. 1966. 631 с.
124. Лерер А.М. Теоретическое исследование двумерно-периодических наноплазмонных структур// РЭ. 2012. Т. 57. № 11. С.1160.
125. Glazov M.M., Ganichev S.D. High frequency electric field induced nonlinear effects in graphene // Physics Reports. 2014. V. 535. №15 P. 101-138.
126. Лерер А.М. Численная оценка погрешности метода возмущения при решении задачи об отражении электромагнитной волны от нелинейного графенового слоя// РЭ. 2022. Т. 67. № 9. С. 855-858.
127А. Черепанов В.В. Нелинейная поверхностная проводимость графена: формулы и экспериментальные данные // Физические основы приборостроения. 2020. Т. 9. №4. С. 2-17.
128А. Лерер А.М., Иванова И.Н., Макеева Г.С., Черепанов В.В. Оптимизация параметров и характеристик широкополосных терагерцовых поглотителей на основе 2d решеток графеновых лент на многослойных подложках // Оптика и спектроскопия. 2021. Т. 129. №3. С. 342-349.
129А. Лерер А.М., Макеева Г.С., Черепанов В.В. Генерация третьей гармоники терагерцовых волн нелинейной графеновой многослойной метаповерхностью // Оптика и спектроскопия. 2021. Т. 129. №1. С. 89-91.
130А. Лерер А.М., Макеева Г.С., Черепанов В.В. Нелинейное взаимодействие терагерцовых волн с наноструктурированным графеном в резонансных многослойных плазмонных структурах // Радиотехника и электроника. 2021. Т. 66. №6. С. 543-551.

131A. Лерер А.М., Макеева Г.С., Черепанов В.В. Преобразователи частоты терагерцового и инфракрасного диапазонов на основе двухмерно-периодических графеновых решеток // Радиотехника и электроника. 2023. Т. 68. №1. С. 30-36.

132A. Lerer A.M., Makeeva G.S., Cherepanov V.V. Numerical Simulation of Nonlinear Effects in Multilayer Graphene Metasurfaces in Terahertz and Infrared Ranges // Engineering World. 2021. V. 3. P. 1-5.

133A. Лерер А.М., Макеева Г.С., Черепанов В.В. Численно-аналитический метод математического моделирования периодических структур с нелинейными графеновыми включениями // Аналитические и численные методы моделирования естественно-научных и социальных проблем: материалы XV Междунар. науч.-техн. конф. г. Пенза, Россия, 1–4 декабря 2020. С. 177.

134A. Лерер А.М., Черепанов В.В. Генерация третьей гармоники многослойной плазмонной графеновой структурой в дальнем инфракрасном диапазоне // Труды Девятого Международного молодежного симпозиума "Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование эко-систем." г. Ростов-на-Дону. 23 - 27 ноября 2020. С. 253.

135A. Lerer A.M., Makeeva G.S., Cherepanov V.V. Electronically Tunable Broadband THz Frequency Multipliers Based on Multilayer Nonlinear Graphene Metasurfaces // 2020 International Conference on Actual Problems of Electron Devices Engineering (APEDE). Saratov. Russia. 2020. P. 269.

136A. Lerer A.M., Makeeva G.S., Ivanova I.N., Cherepanov V.V. Efficiency of the Third Harmonic Generation in Multilayer Graphene Plasmon THz Structures // 2020 7th All-Russian Microwave Conference (RMC). Moscow. Russia. 2020. P. 196.

137A. Makeeva G.S., Cherepanov V.V. Efficient Tunable THz Frequency Convertors Based on Multilayer Graphene Metasurfaces // IEEE, Conference Proceedings - 2021 Radiation and Scattering of Electromagnetic Waves (RSEMW). 2021. P. 103.

138A. G.S. Makeeva, V.V. Cherepanov. Multiband Nonlinear Mid-Infrared Wave Mixing by Multilayer Graphene Plasmonic Structures // IEEE, Conference Proceedings - 2021 Radiation and Scattering of Electromagnetic Waves (RSEMW). 2021. P. 39.

139A. Лерер А.М., Макеева Г.С., Черепанов В.В., Иванова И.Н. Электрически перестраиваемые ТГц умножители частоты на основе многослойных решеток графеновых микролент // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии 30-я Международная конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Севастополь. Крым. Россия. 6-12 сентября 2020. С.286.

140A. Лерер А.М., Макеева Г.С., Черепанов В.В. Математическое моделирование нелинейных явлений в графеновых метаповерхностях в терагерцовом и инфракрасном диапазонах частот // Математическое и компьютерное моделирование естественно-научных и социальных проблем. материалы XV Международной научно-технической конференции молодых специалистов, аспирантов и студентов. Пенза. 2–4 июня 2021. С. 65.

141A. Lerer A.M., Makeeva G.S., Cherepanov V.V. et al. Electrically Controllable Infrared Frequency Conversion in Nonlinear Multilayer Graphene Ribbon Arrays // Progress in Electromagnetics Research Symposium (PIERS), Hangzhou, China, 2021, 2021-November, P. 663.

142A. Лерер А.М., Черепанов В.В., Макеева Г.С. Нелинейное преобразование частот терагерцового и инфракрасного диапазонов плазмонными метаповерхностями на основе графена // Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование эко-систем (Анализ современного состояния и перспективы развития). Ростов-на-Дону, 2021. С. 266.

143A. A.M. Lerer, G.S. Makeeva, V.V. Cherepanov. Broadband generation of terahertz waves via infrared frequency nondegenerate parametric down-conversion by nonlinear graphene Arrays // XXV Annual Conference Saratov Fall

Meeting 2021; and IX Symposium on Optics and Biophotonics 2021. Saratov. Russian Federation. 29 April 2022.

144A. Lerer A.M., Makeeva G.S., Cherepanov V.V. Terahertz-to-Infrared Up-Conversion by Plasmonic-Enhanced Sum Frequency Generation in Graphene Gratings // 2022 International Conference on Actual Problems of Electron Devices Engineering (APEDE). Saratov. Russian Federation. 22-23 September 2022, P. 96.

145A. Lerer A.M., Makeeva G.S., Cherepanov V.V. Optimization of Characteristics of Reconfigurable Nonlinear THz and IR Devices Based on 1D Reflective Graphene Gratings // 2022 8th All-Russian Microwave Conference (RMC). Moscow. Russia. 23-25 November 2022.

146A. Lerer A.M., Makeeva G.S., Cherepanov V.V. Reconfigurable Parametric Mid-Infrared Frequency Up/Down Conversion Using Multimode Plasmon Resonances in Graphene Ribbon Metasurfaces // 2022 52nd European Microwave Conference (EuMC). Milan. Italy. 27-29 September 2022. P. 266.

147A. Лерер А.М., Черепанов В.В., Макеева Г.С. Математическое моделирование нелинейно-оптических процессов смешения терагерцовых волн в графеновых метаповерхностях // Математическое и компьютерное моделирование естественно-научных и социальных проблем. Материалы XVI Всероссийской с международным участием научно-технической конференции молодых специалистов, аспирантов и студентов. Пенза. 01–04 июня 2022. С. 30.

148A. Лерер А.М., Черепанов В.В., Макеева Г.С. Математическое моделирование реконфигурируемых конвертеров частоты инфракрасного диапазона на основе графеновых решеток // Математическое и компьютерное моделирование естественно-научных и социальных проблем. материалы XVI Всероссийской с международным участием научно-технической конференции молодых специалистов, аспирантов и студентов. Пенза. 1−4 июня 2022. С. 41.

149A. Лерер А.М., Черепанов В.В., Крестьянинова О.В., Рейзенкинд Я.А. Дифракция электромагнитных волн терагерцового диапазона на графеновой щелевой решетке // Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование эко-систем (Анализ современного состояния и перспективы развития). Труды Одиннадцатого Международного междисциплинарного молодежного симпозиума «LFPM-2022». Южный федеральный университет. Ростов-на-Дону. 26–28 декабря 2022. С. 141.

150A. Lerer A.M., Makeeva G.S., Cherepanov V.V, Ivanova I.N. Reconfigurable broadband terahertz perfect absorbers and generators based on multilayer graphene ribbon plasmonic structures // Progress in Biomedical Optics and Imaging - Proceedings of SPIE 11846. Saratov. Russia. 4 May 2021.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Полагаем, что функции

$$U_{m,pq}(z)=\begin{cases}M^{\pm}_{m,pq}(z),\\ \mathrm{E}^{\pm}_{m,pq}(z),\end{cases}\quad \hat{U}_{m,pq}(z)=\begin{cases}\hat{M}^{\pm}_{m,pq}(z),\\ \hat{\mathrm{E}}^{\pm}_{m,pq}(z),\end{cases}$$

непрерывны на границах слоев кроме слоя $z = z_m$.. Вид $\hat{\mathrm{E}}^{\pm}_{m,pq}$, $\hat{M}^{\pm}_{m,pq}$ определен в (2.10). $U_{m,pq}(z)$ являются решениями уравнения Гельмгольца

$$\left(\frac{d^2}{dz^2}+k^2\varepsilon(z)-\chi^2_{pq}\right)U_{m,pq}(z)=0.$$

На границе слоев $z=z_m$ $(z_1=0,\, z_{m+1}=z_m-h_m)$ функции $U_{m,pq}(z)$ и $\hat{U}_{m,pq}(z)$ должны быть непрерывны $(m=2,..N+1)$ и $U_{1,pq}(0)=1$.

Для упрощения $U_{pq}(z)$ запишем в виде:

$$\left.\begin{aligned}&U_{m,pq}(z)=X\frac{\left\{-D_{m+1}\mathrm{sh}\left[k_{m,pq}(z-z_m)\right]+D_m\mathrm{sh}\left[k_{m,pq}(z-z_{m+1})\right]\right\}}{\mathrm{sh}\kappa_{m,pq}h_m},\quad z_m\ge z\ge z_{m+1},\\ &U_{N+1,pq}(z)=-XD_{N+1}\exp\left[k_{N+1,pq}(z-z_{N+1})\right],\quad z\le z_{N+1},\end{aligned}\right\}$$

где $(m=1,..N)$, X, D - неизвестные коэффициенты, $k_{m,pq}=\sqrt{\chi^2_{pq}-k^2\varepsilon_m}$. В таком случае выполнение ГУ для $U_{m,pq}(z)$ упрощается, и они непрерывны на границах раздела слоев. Из требований непрерывности $\hat{U}_{m,pq}(z)$ приходим к рекуррентной схеме

$$D_mQ_{m,pq}=D_{m+1}\left(T_{m,pq}+T_{m+1,pq}\right)-D_{m+2}Q_{m+1,pq},\ m=N,N-1,...1,$$

где

$$D_{N+2}=0,\ Q_{m,pq}=\frac{\xi_m k_{m,pq}}{\mathrm{sh}\left(k_{m,pq}h_m\right)},\ T_{m,pq}=\begin{cases}\xi_m k_{m,pq}\mathrm{cth}\left(k_{m,pq}h_m\right), m\ne N+1,\\ \xi_m k_{m,pq}, m=N+1.\end{cases}$$

($\xi=1$ для s - поляризации, $\xi=\dfrac{1}{\varepsilon}$ для p – поляризации, μ =1). Считая $D_{N+1}=1$, находим остальные D_m. Из $U_{1,pq}(0)=1$ вычисляем X: $U^{-}_{n}(0)=XD_1=1$. Следовательно, все неизвестные коэффициенты найдены.