

09
Распространение электромагнитных волн в электропроводящих графеноподобных углеродных нанолотропах

© Р.А. Браже, Р.М. Мефтахутдинов

Ульяновский государственный технический университет,
 432027 Ульяновск, Россия
 e-mail: mrm@ulstu.ru

(Поступило в Редакцию 10 мая 2016 г. В окончательной редакции 26 октября 2016 г.)

Исследовано распространение электромагнитных волн в углеродных графеноподобных электропроводящих кристаллах с симметрией $(C)_{4v}$ и $(C)_{6v}$. Показано, что в этих кристаллах могут существовать только волны ТМ поляризации. Проведен сравнительный анализ их свойств в различных структурах. Показано, что рассмотренные структуры имеют преимущество перед классическим графеном с точки зрения возбуждения в них электромагнитных волн.

DOI: 10.21883/JTF.2017.05.44452.1879

Введение

В последние годы большой интерес исследователей вызывают взаимодействия графена и графеноподобных материалов с электромагнитными волнами [1–3], причем они интересны не только с фундаментальной точки зрения, но и в связи с различными приложениями в нанoeлектронике, фотонике, оптоэлектронике и др.

В настоящей работе исследуется распространение электромагнитных волн в углеродных графеноподобных нанолотропах с симметрией $(C)_{4v}$ и $(C)_{6v}$ (рис. 1). Ранее нами были изучены их упругие и акустические [4–6], электронные и оптические свойства [7]. Рассматриваются лишь sp^2 -нанолотропы, в которых имеются свободные электроны. Следует отметить, что существование указанных структур при комнатной температуре и их термодинамическая устойчивость пока предсказаны теоретически, однако физические свойства и возможные практические применения этих альтернативных классическому графену двумерных нанолотропов углерода в последнее время интенсивно изучаются [8–13]. В частности, большое внимание уделяется так называемому октаграфену или Т-графену, обозначенному здесь как $(C)_{44}$ [9,10,12].

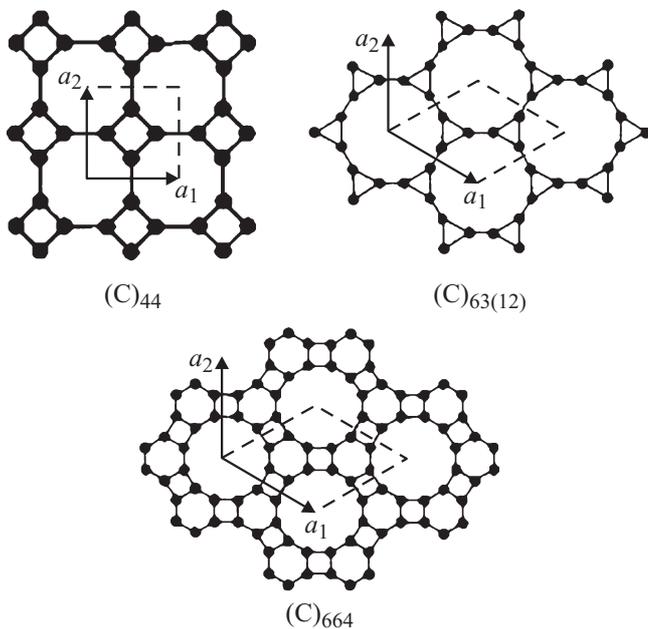


Рис. 1. Исследуемые структуры.

Исследуемые структуры

На рис. 1 показаны три типа исследуемых 2D супракристаллов, обладающих sp^2 -гибридизацией: $(C)_{44}$, содержащая 4 атома в элементарной ячейке (показана штриховой линией), $(C)_{63(12)}$, содержащая 6 атомов в элементарной ячейке, и $(C)_{664}$ с 12 атомами. Векторы a_1 и a_2 — базисные. Как показывают расчеты зонной структуры [14], они принадлежат к полуметаллам.

Будем рассматривать двумерные кристаллические листы, помещенные между двумя диэлектриками с проницаемостями ϵ_1 и ϵ_2 (рис. 2).

Будем рассматривать двумерные кристаллические листы, помещенные между двумя диэлектриками с проницаемостями ϵ_1 и ϵ_2 (рис. 2).

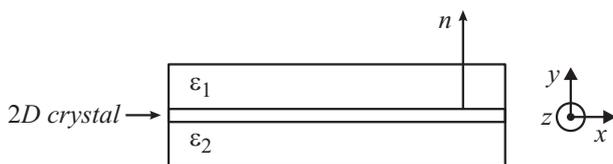


Рис. 2. Исследуемая система.

Постановка задачи

Спектр электромагнитных волн, распространяющихся вдоль кристаллических листов, находится из решения

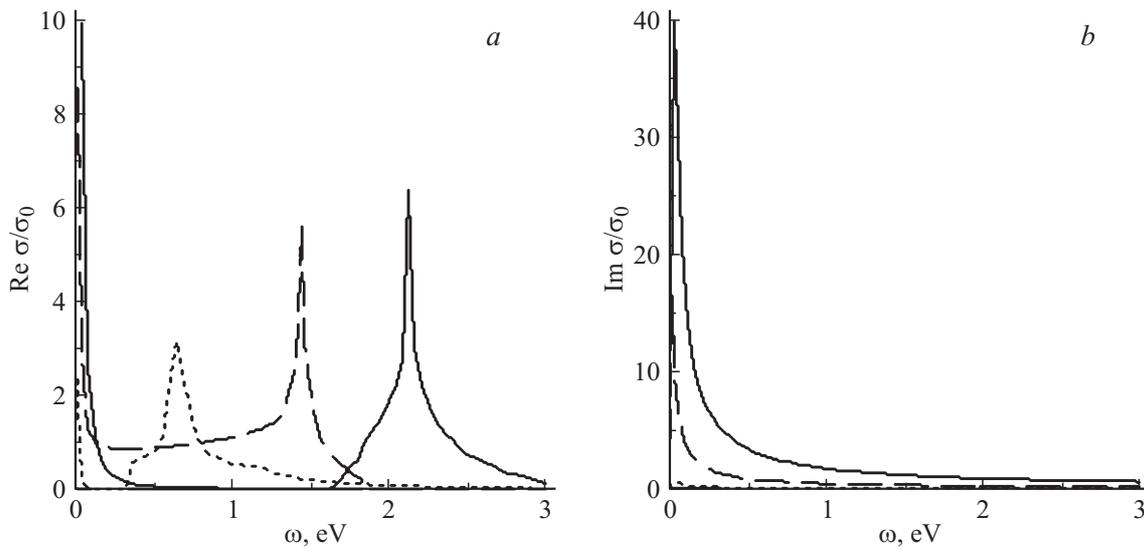


Рис. 3. Проводимость исследуемых структур: C_{44} — сплошная линия, $C_{63(12)}$ — штриховая линия, C_{664} — точки. *a* — действительная часть, *b* — мнимая часть, $\sigma_0 = e^2/4\hbar$.

уравнений Максвелла совместно с граничными условиями, которые имеют вид

$$\mathbf{E}_{1t} = \mathbf{E}_{2t}, \quad \mathbf{H}_{1t} - \mathbf{H}_{2t} = \mathbf{j}_s \times \mathbf{n}, \quad (1)$$

$$D_{1n} - D_{2n} = \rho_s, \quad B_{1n} = B_{2n}, \quad (2)$$

где $\mathbf{D} = \epsilon\epsilon_0\mathbf{E}$, $\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H}$. Плотности заряда и тока соответственно равны

$$\rho = \rho_s\delta(y), \quad \mathbf{j} = \mathbf{j}_s\delta(y).$$

Здесь ρ_s — поверхностная плотность заряда, т. е. заряд, приходящийся на единицу площади, $\mathbf{j}_s = \sigma\mathbf{E}_t$ — поверхностная плотность тока, т. е. ток на единицу длины поперечного сечения $2D$ кристалла, дельта-функция $\delta(y)$ имеет размерность длины.

Поверхностная проводимость кристаллических листов σ складывается из межзонной [7]

$$\sigma_{\text{inter}} = \frac{e^2}{2\pi m^2 \omega} \sum_{v,c} \iint (f(E_v) - f(E_c)) |P_{v,c}(\mathbf{k})|^2 \times \delta(E_c - E_v - \hbar\omega) d^2k \quad (3)$$

и внутризонной [7]

$$\sigma_{\text{intra}} = \frac{i\epsilon_0\omega_p^2}{\omega + i\Gamma} \quad (4)$$

проводимостей, где ω — частота падающей электромагнитной волны, $f(E)$ — функция распределения Ферми–Дирака, индексы v и c относятся к валентной зоне и зоне проводимости соответственно, $P_{v,c}(\mathbf{k})$ — матричные элементы оператора импульса, ω_p — плазменная частота, Γ — коэффициент затухания.

Отметим, что квадрат плазменной частоты в (4) имеет размерность m/s^2 [15]. Это связано с тем, что для

двумерных структур она определяется поверхностной плотностью зарядов, а не объемной, как для трехмерных структур.

Расчет частотной зависимости действительной и мнимой частей полной проводимости исследуемых структур проводился при следующих значениях параметров: $E_f = 0 \text{ eV}$, $\hbar\Gamma = 10 \text{ meV}$ и $kT = 25 \text{ meV}$ ($T = 300 \text{ K}$).

Что касается Γ , то теоретических моделей расчета коэффициента затухания пока не существует [15], но в силу важности этого параметра для внутризонной проводимости мы принимаем его равным 10 meV . Это связано с тем, что в графенах основным механизмом рассеяния носителей заряда является электрон-фононное взаимодействие, и время релаксации можно с достаточной точностью считать равным $\tau = 0.5 \cdot 10^{-13} \text{ s}$ [1], что, примерно, соответствует 10 meV .

Результаты расчета проводимости представлены на рис. 3.

TM волны

Дисперсионное соотношение, описывающее поверхностные TM волны, известные также как плазмон-поляритоны, имеет вид

$$\frac{\epsilon_1}{q_1} + \frac{\epsilon_2}{q_2} = -i \frac{\sigma}{\epsilon_0\omega}, \quad (5)$$

где коэффициенты q_1 и q_2 равны

$$q_1 = \sqrt{k^2 - \omega^2\epsilon_1/c^2}, \quad q_2 = \sqrt{k^2 - \omega^2\epsilon_2/c^2}.$$

Для диапазона частот от 0 до 15 meV уравнение (5) решалось численно с использованием пакета Maple 17. На рис. 4 показаны результаты расчетов для всех

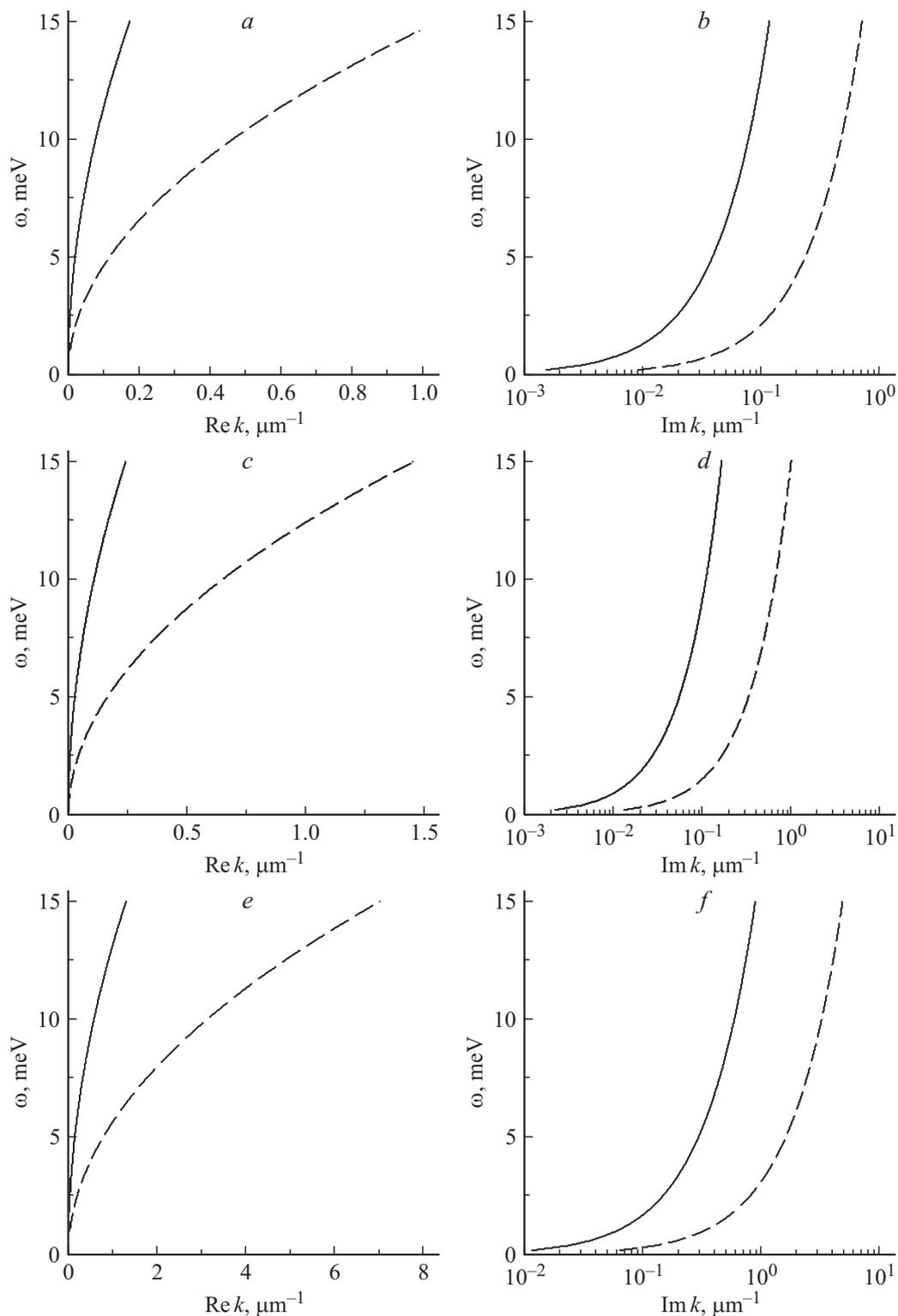


Рис. 4. Дисперсионные зависимости для волн ТМ поляризации: *a, b* — для C_{44} , *c, d* — для $C_{63(12)}$, *e, f* — для C_{664} . Сплошная линия для $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$, штриховая для $\varepsilon_1 = 1, \varepsilon_2 = 11$. Мнимые части волнового числа отображены в логарифмическом масштабе.

структур. Сплошная линия соответствует „подвешенным“ структурам, т.е. $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$, штриховая — $\varepsilon_1 = 1, \varepsilon_2 = 11$ (кремний в качестве подложки). Из рисунка видно, что поверхностные электромагнитные волны суще-

ствуют во всем представленном диапазоне частот. Для сравнения волн в разных структурах для частоты 4 меВ, что соответствует 1 ТГц, были рассчитаны следующие параметры: фазовая скорость ω/k , длина распростране-

Параметры волн ТМ поляризации в различных структурах

Структура	ε	$v_{ph}, \times 10^5, \text{ m/s}$	$1/\text{Im}(k), \mu\text{m}$	$1/\text{Re}(q), \mu\text{m}$
C ₄₄	1	3.25	32.26	95.28
	11	0.54	5.41	14.25
C ₆₆₄	1	0.43	4.35	10.90
	11	0.08	0.80	2.01
C ₆₃₍₁₂₎	1	2.35	23.25	64.20
	11	0.39	3.87	9.98
Графен	1	380.00	2.50	6.24
	11	63.30	0.42	1.04

ния $1/\text{Im} k$, расстояние в поперечном направлении, на котором поле волны уменьшается в e раз — $1/\text{Re}(q_1)$ для среды с диэлектрической проницаемостью ε_1 , и $1/\text{Re}(q_2)$ с диэлектрической проницаемостью ε_2 . Эти же самые параметры были рассчитаны для поверхностных плазмон-поляритонов в чистом графене ($E_f = 0 \text{ eV}$). При этом его проводимость определялась моделью Друде, в рассматриваемом диапазоне частот такое упрощение вполне оправдано.

Полученные результаты приведены в таблице. Из нее видно, что поверхностные электромагнитные волны в (C)₄₄ имеют большую скорость распространения, большую глубину проникновения, но меньшую локализацию, чем в других исследуемых структурах. Если сравнивать с классическим графеном, то фазовая скорость поверхностных плазмонов и их локализация в исследуемых структурах существенно меньше, чем в графене, однако глубина проникновения значительно больше. Последнее может иметь существенное преимущество с точки зрения их использования в устройствах обработки и передачи информации.

ТЕ волны

Решение уравнений Максвелла с граничными условиями дает следующее дисперсионное уравнение для ТЕ волн

$$\sqrt{k^2 - \varepsilon_1 \frac{\omega^2}{c^2}} - \sqrt{k^2 - \varepsilon_2 \frac{\omega^2}{c^2}} = i\omega\mu_0\sigma.$$

Полученное уравнение допускает действительные решения только в том случае, если мнимая часть проводимости отрицательна. Из рис. 3 видно, что вплоть до 3 eV для всех исследуемых структур мнимая часть проводимости положительна, и, следовательно, ТЕ моды в них распространяться не могут.

Заключение

В настоящей работе было рассмотрено распространение электромагнитных волн в графеноподобных проводящих структурах, расположенных как на кремниевой подложке, так и в подвешенном состоянии. Показано, что в исследуемых кристаллах могут существовать плазмонные моды только ТМ поляризации. Анализ исследованных электромагнитных волн в указанных кристаллах показал, что поверхностные электромагнитные волны в (C)₄₄ (рис. 1) имеют большую скорость распространения, большую глубину проникновения, но меньшую локализацию по сравнению с другими исследуемыми структурами. Исследуемые структуры имеют некоторое преимущество с точки зрения возбуждения в них электромагнитных волн перед графеном, поскольку глубина проникновения волн в них существенно больше.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ 2014/232 (проект № 1742).

Список литературы

- [1] Kotov O.V., Kol'chenko M.A., Lozovik Yu.E. // Opt. Express. 2013. Vol. 21. N 11. P. 13533–13546.
- [2] Буслаев П.И., Иорш И.В., Шадрин И.В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97. Вып. 9. С. 619–623.
- [3] Колесников А.А., Лозовик Ю.Е. // Труды МФТИ. 2013. Т. 5. N 1. С. 53–59.
- [4] Браже Р.А., Каренин А.А., Кочаев А.И., Мефтахутдинов Р.М. // ФТТ. 2011. Т. 53. Вып. 7. С. 1406–1408.
- [5] Браже Р.А., Кочаев А.И., Мефтахутдинов Р.М. // ФТТ. 2011. Т. 53. Вып. 8. С. 1614–1617.
- [6] Браже Р.А., Кочаев А.И. // ФТТ. 2012. Т. 54. Вып. 8. С. 1512–1514.
- [7] Браже Р.А., Мефтахутдинов Р.М. // ЖТФ. 2016. Т. 86. Вып. 5. С. 112–117.
- [8] Enyashin A.N., Ivanovskii A.L. // Phys. Stat. Sol. B. 2011. Vol. 248. N 8. P. 1879–1883.
- [9] Sheng X.-L. et al. // J. Appl. Phys. 2012. Vol. 112. P. 074315.
- [10] Liu Y. et al. // Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 108. P. 225505.
- [11] Беленков Е.А., Грешняков В.А. // ФТТ. 2013. Т. 55. Вып. 8. С. 1640–1650.
- [12] Подливаев А.И., Опенов Л.А. // ФТТ. 2013. Т. 55. Вып. 12. С. 2464–2467.
- [13] Fthenakis Z.G., Lathiotakis N.N. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2015. Vol. 17. P. 16418–16427.
- [14] Браже Р.А., Мефтахутдинов Р.М., Фатхутдинова К.Х. // Изв. вузов. Поволжский регион. 2015. № 1. С. 130–139.
- [15] Pedersen T.G. Electric, optical and magnetic properties of nanostructures. Aalborg university, 2015. 339 p.