

石墨烯为下一代表面等离子激元铺平道路

仿真工具将二维材料中的复杂物理场与表面等离子激元结合在一起，带来了光电设备的变革。

作者: DEXTER JOHNSON

2004年，人们首次成功合成了单原子层厚的石墨薄膜，并将其命名为石墨烯。十几年过去了，现在，石墨烯已被广泛用于光伏、下一代电池和电子器件等产品中。

石墨烯拥有许多优秀属性，比如电导率和导热系数。起初，人们只是将它用于电子器件，却忽略了它同样优秀的光电性能。很快人们就发现，石墨烯作为透明导体电极同样拥有惊人的潜力，可以代替常用的铟锡氧化物（ITO）。除了结构强度与灵活性，石墨烯还提供了能与ITO相媲美甚至更优秀的光电性能。它还可以用于其他各种应用，例如触摸屏和光伏中的透明导体（见图1）、用于探测病毒或蛋白质的芯片设备、改进型夜视仪、中红外成像应用以及太阳能电池。

» 石墨烯与表面等离子激元

除光电元件外，当人们将石



图1: 可弯曲、更轻薄的智能手机与笔记本电脑的屏幕，这仅是石墨烯诸多应用中的一个示例；它还能用于能源、计算、工程以及健康技术与设备等领域。

墨烯用于表面等离子激元这一光子学分支领域时，它更是大放光芒；近年来，

由于人们对更小尺度光学应用及其特性的不断探索，表面等离子激元行业发展迅猛。

传统上，光子一直用于处理微米尺度结构，由于光的衍射极限特性，将光挤进更小尺度的难度很高。表面等离子激元帮助解决了这一难题，甚至支持将光约束在纳米尺度内。

这种方法将入射光耦合到名为等离子激元的电子振荡，这也是表面等离子激元名称的由来。今天，表面等离子激元已经成为光子学中一个正积极发展的重要分支，主要用于处理等离子激元的有效激励、控制与使用。

» 石墨烯实现了表面等离子激元在实际设备中的应用

在普渡大学（Purdue University）的Birck纳米技术中心的电气和计算机工程学院，Alexander V. Kildishev副教授带领下的计算纳米光子学研究工作一直处于领先水平，他们在研究中结合了石墨烯与表面等离子激元，使其更接近实际光电应用。

Kildishev和他的同事们在石墨烯研究中遇到了一个基本问题：现在很难生产高质量的大面积石墨烯薄膜。在石墨烯的生产工艺改进之前，Kildishev和他的团队只能借助仿真工具来设计和优化石墨烯器件。

利用仿真和实验测试，Kildishev和他的同事们验证了纳米天线阵列中等离子体共振的可调谐石墨烯的辅助阻尼，这对于设计中红外波段可调谐光子元件非常重要

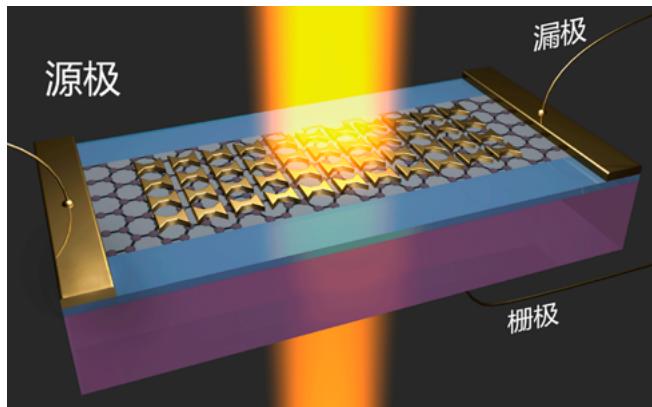


图 2：在单层石墨烯板上设计的法诺共振表面等离激元天线，利用 COMSOL 软件及波动光学模块进行优化，希望在 $2\mu\text{m}$ 的波长实现共振。实验使用离子凝胶顶部电解质门控成功验证了设计的可调谐性²。

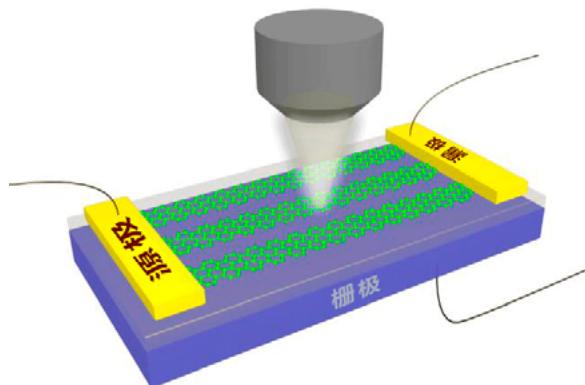


图 3：用于研究石墨烯纳米带（GNRs）中等离子共振实验装置的 3D 效果图，在 COMSOL Multiphysics 软件中使用表面电流方法模拟。GNRs 晶格取向为非等比例绘图，仅作参考展示目的。

要。许多分子的基本振动共振会驻留在中红外波段，因此，对于传感和成像领域的应用而言，能开发出可以在此波段工作的可调谐表面等离激元器件至关重要。

另一方面，波长更短的红外（IR）波段对电信和光学处理也非常重要，比如电信波段。普渡大学的研究团队已经证实，在近红外波长，可以对石墨烯-金属表面等离激元复合结构中的法诺共振进行有效地动态控制。法诺共振常见于经特定耦合的共振光学系统的传输中，研究人员正将法诺共振的属性应用于滤光器、传感和调节器（见图 2）。

Kildishev 认为，在设计下一代表面等离激元和复合纳米光子芯片器件中的可调谐单元时，比如设计传感器和光电探测器，COMSOL Multiphysics® 软件模型的预测功能是其中的重要环节。在

多色夜视和热成像中，将最终能够使用光电探测器来感应红外电磁辐射。另一项可能的应用是生物传感，表面等离激元单元的共振线被调谐到和病毒或蛋白质的光谱响应相匹配的谐振频率。

在普渡大学研究人员的研究中，他们将石墨烯的特有属性与表面等离激元纳米天线相结合，用于调制天线的光学属性。就像电路中的晶体管一样，光路中的可调谐共振单元对光电元件也非常重要。

“结合纳米图案石墨烯与电子门控（见图 3），我们能够模拟空间中带有非平行空间解析度的光通量。” Kildishev 之前的博士生 Naresh Emani 博士介绍说，后者现就职于新加坡 DSI 研究院，“石墨烯表面等离激元单元中的降维与半金属行为，为我们提供了许多重要的属性，其中最关键

的一项便是电可调谐性。这个关键功能在常规金属表面等离激元中是无法实现的。”

基于贵金属的表面等离激元器件往往不具备这种对电可调谐性的控制水平。贵金属导带中包含大量的电子，因此不能方便地调制金属的电导率。但石墨烯是一种可调谐半金属，在原始状态下，导带中不包含任何电子。因此，可以对它的电子浓度进行化学调制，电调制，甚至光学调制，进而调制它的电导率。

» 仿真与模拟所扮演的角色

对于研究人员而言，数值建模是一项非常重要的工具，这使他们能够免受纳米制造的昂贵成本及其他各种限制的影响，能够方便地对设计进行优化。

“与实验工作相比，数值建模的成本很低，帮助我们减少了验证设计输出所需的原型机数量，为我们提供

了不错的预测能力，还可以针对需要的功能进行优化。” Kildishev 解释道。

在这样一个石墨烯材料质量差别很大的领域，要想更好地理解所有设计变量的影响，紧密关联数值结果与实验是关键。

“大多数情况下，通过拟合模型参数与实验结果，我们可以得到给定过程的实际物理场。” Kildishev 说道，“拥有这样一个经过验证的数学模型，我们能更好地理解与解释。当你借助数学模型理解这些现象之后，就能完整了解那些可用于其他新想法的整套机制。”

当然，数学建模也有自己的缺点。“不幸的是，很多问题并不具备解析解，因此我们必须采用其他方案。”他补充道。根据 Kildishev 团队高性能计算专家 Ludmila Prokopeva 博士的说法，数值技巧就是清除这些障碍的强大工具。经过合理设计的仿真工具可以提供较好的稳定性、精度以及速度。通常需要非常高性能的计算机，特别是对需要全三维（3D）仿真的纳米结构器件而言。

“计算纳米光子学的多物理场和多尺度本质决定了我们必须使用强大的仿真工具。” Kildishev 说道。

没有仿真工具能适合所有的场景。“我们自己有一整套的专有软件和商用软件，但我们始终都在寻找其他能加入那些很有意思的新物理场的方法。” Kildishev 介绍，“十多年来，我们一直很

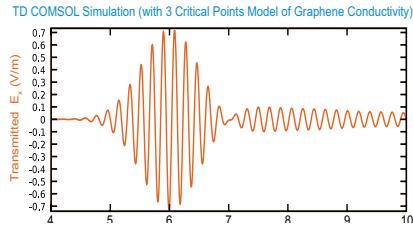


图 4: 由石墨烯纳米带阵列发射的高斯脉冲瞬态电场。

依赖 COMSOL Multiphysics 软件，它的主要优势在于，我们能在它独有的方程驱动型框架内进行灵活操作，这非常特别。”

他补充说：“COMSOL 允许用户耦合多个物理场接口，从而能够分享相同的网格，甚至支持使用不同的网格。我们也可以将求解器链接至复杂的材料函数：例如，我的团队已经针对石墨烯实现了多个复杂 MATLAB® 介电模型，COMSOL® 软件可以将这些模型无缝集成进去。对于简单的显式输入，如果使用简单的计算或查找表，将无法处理其中的一些介电函数。我们还能引入非线性效应，耦合至一个传热分析，增加量子发射器等，而且可以一直加下去。”

“COMSOL 的另一大优势在于软件本身支持利用表面电导率（例如，表面电流）模拟二维（2D）材料。” Prokopeva 注意到，“因为原子厚度的关系，石墨烯的表现类似于二维材料，但许多研究人员因为软件本身不支持二维材料，会加入一个很薄的人为设定的厚度，将仿真转换成三维模型。三维方法会带来一些非物理变化，增加优化过程的不确定性，同时还会显著增加数值计算的复杂度。”

在制造技术逐渐成熟的过程中，

普渡大学的团队使用一个理论模型来实现石墨烯的最优电导率，并在 COMSOL 中模拟了器件的响应，以便从数值角度对系统属性进行分析（见图 2 和图 4）。

“很幸运，在普渡大学的 Birck 纳米技术中心，我们能与相邻实验团队的 Yong Chen 教授、Alexandra Boltasheva 教授、Vlad Shalaev 教授、Ashraf Alam 教授、David Janes 教授和 Gary Chen 教授合作。与 C-PHOM NSF MRSEC 中心 Ted Norris 和 Vinod Menon 团队的合作也给了我们很大的帮助。实验研究聚焦于新型石墨烯应用的各种方面，例如红外传感器、混合光电电极，以及其他二维材料，这为我们验证新建模型方法奠定了良好的基础。他们向我们提供了有关实际中石墨烯基纳米结构制造及其光学特性的重要反馈。”

» 对量子光学、更好的夜视镜及柔性触摸屏的未来展望

普渡大学团队还在继续他们的仿真工作，希望能理解和预测石墨烯的性能，并最终将它用于太阳光电、光调制器等器件，他们甚至希望有一天能把它用在柔性触摸屏上。他们正在尝试制作石墨烯纳米带，希望获得一个初级光调制设备^{3,4}。

“目前，能够在中红外波长实现这一功能的器件往往非常笨重，或者不可调谐。我们预想了一款原型机器件，它能够动态更改入射光脉冲或光束的频谱。这将为夜

COMSOL 的另一大优势是能够使用表面电流项模拟二维材料。”

— LUDMILA PROKOPEVA, BIRCK 纳米科技中心高性能计算专员

视仪和中红外成像应用提供更高的灵敏度。”

他们还有更长远的宏大目标，希望探索石墨烯在量子光学领域的表面等离激元属性。Kildishev 和他的同事们相信量子光学领域将是光学的下一个发展前沿，但目前在中红外波长范围对它的研究相对较少。

“如果我们能成功解决石墨烯研究中的一些难题，它的表现最终可能超越半导体量子阱。如果能够实现，这将显著缩小许多器件的尺寸。”他们正继续探索这一充满了许多未知的的前沿领域，朝着包含无尽可能的未来大步前进。🕒



Alexander V. Kildishev, 普渡大学 Birck 纳米科技中心副教授。

参考文献

- 1 N. K. Emani et al., Nano Lett. 12, 5202–5206 (2012).
- 2 N. K. Emani et al., Nano Lett. 14, 78–82 (2014).
- 3 D. Wang et al., “Plasmon Resonance in Single- and Double-layer CVD Graphene Nanoribbons,” in CLEO: 2015, p. FTu1E.3.
- 4 L. Prokopeva and A. V. Kildishev, “Time Domain Modeling of Tunable Graphene-Based Pulse-Shaping Device (invited),” in ACES 2014.

石墨烯模拟

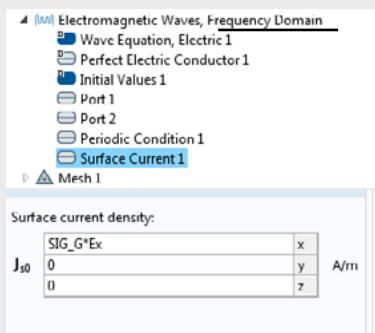
作者: ANDREW STRIKWERDA

模拟石墨烯的最佳方法是什么？或者更具体地说，应该将石墨烯作为二维层还是极薄的三维材料进行模拟？大多数研究人员选择了第二种方法，因为他们使用的数值软件仅支持三维材料。但在 COMSOL Multiphysics® 的帮助下，您可以任意选择这两种方法。正如文章中提到的，Kildishev 教授和他的同事们发现，将石墨烯作为二维材料进行模拟的结果与实验结果更一致。让我们仔细看一下如何在 COMSOL® 软件中进行操作。

根据欧姆定律，在频域，电流密度只是电导率和电场的乘积：

$$J = \sigma E$$

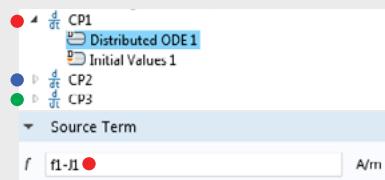
在 COMSOL Multiphysics 中，这可以通过表面电流边界条件在二维中实现，根据欧姆定律，感应电流表示为石墨烯电导率（例如，利用随机相位近似计算）与切向电场的乘积。



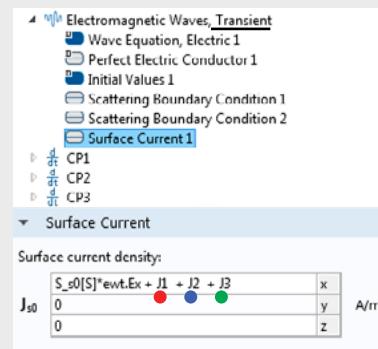
在时域仿真中，所需表面电流密度的计算难度会高一些，因为欧姆定律现在是电场与电导率的卷积：

$$J(t) = \int \sigma(t - \tau) E(\tau) d\tau$$

为了在 COMSOL 中实现这一点（见图 4），Kildishev 教授的团队使用帕德近似来表征石墨烯中依赖于频率的光导率。随后，他们对帕德极数中的这些项应用傅里叶变换，从而得到能够在 COMSOL 中求解的时域二阶偏微分方程。



这些方程的解代表了对瞬态表面电流的贡献，能够链接到表面电流边界条件。



如果您希望了解更多有关如何模拟石墨烯的内容，欢迎前往 comsol.com/webinars 页面观看由 Alexander Kildishev 主持的网络研讨会，您还可以在 comsol.com/community/exchange/361 页面下载他的 COMSOL 模型。