

文章编号: 1001-3806(2021)05-0642-05

周期性石墨烯盘表面拓扑边界传输态研究

廖秋雨¹, 张煜熔¹, 吴智杭¹, 叶婷¹, 张克非^{2*}

(1. 西南科技大学 理学院, 绵阳 621010; 2. 西南科技大学 计算机科学与技术学院, 绵阳 621010)

摘要: 为了提高光学器件的传输性能, 推动微型光学器件及大规模集成光路的发展, 提出了一种新型 2-D 石墨烯等离子体光子晶体结构。通过周期性排列蜂窝状的石墨烯盘, 调整一个周期内两个石墨烯圆盘的直径, 打开狄拉克点; 基于有限元法, 运用 COMSOL 仿真光场传播、计算光子带隙, 打破时间反演对称性, 实现能带拓扑效应。结果表明, 该设计的晶格常数等均处于纳米量级, 相较于自由空间波长减小近 30 倍, 具有小型化、高集成化等优势; 该结构可在 15.3THz ~ 15.8THz 频段范围进行动态调制。此研究为设计具有鲁棒性的纳米量级光子器件提供了参考, 有望在波导频率的调控、光开关等领域拓展应用。

关键词: 光电子学; 石墨烯; 直径; 光子晶体; 能带拓扑效应

中图分类号: TN29 **文献标志码:** A **doi:**10.7510/jgjs.issn.1001-3806.2021.05.018

Research on topological boundary transmission state on the surface of periodic graphene disk

LIAO Qiuyu¹, ZHANG Yurong¹, WU Zhihang¹, YE Ting¹, ZHANG Kefei²

(1. School of Science, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China; 2. School of Computer Science and Technology, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

Abstract: In order to improve the transmission performance of optical devices and promote the development of micro-optical devices and large-scale integrated optical circuits, a new type of 2-D graphene plasma photonic crystal structure was proposed. By periodically arranging the honeycomb-shaped graphene discs, the diameter of two graphene discs in a period was adjusted to open the Dirac point; based on the finite element method, the propagation of the light field was simulated by COMSOL and the photonic band gap was then calculated. Through breaking the time inversion symmetry, the band topology effect was achieved. The results show that the lattice constants of this designed are all on the order of nanometers, which is nearly 30 times smaller than the free space wavelength with the advantages of miniaturization and high integration. The structure can be dynamically modulated in the 15.3THz ~ 15.8THz frequency range. This research provides a reference for the design of robust nano-scale photonic devices, and is expected to be applied to waveguide frequency control, optical switches and other fields.

Key words: optoelectronics; graphene; diameter; photonic crystals; band topology effect

引言

光子晶体 (photonic crystal, PC) 具有操纵光子和

控制光波传输的能力, 但光在其中传播仍有一定的散射和损耗。将拓扑态引入光子系统中^[1], 革新了传统光波的传输和控制。受拓扑保护的光子器件具有强鲁棒性, 可对结构缺陷免疫, 但由于衍射极限的存在使得器件的微型化受到工程限制。石墨烯是由单层碳原子经 sp^2 杂化组成的新型 2 维纳米材料^[2], 具有独特的电学和光学特性^[3-5], 可充当一种实现量子霍尔效应的理想平台, 在纳米量级尺度上实现拓扑保护的光子态。表面等离子体有很强的局域性, 可突破衍射极限, 为实现纳米尺寸的光电器件和全光集成电路提供了可能^[6-9]。与传统的贵金属相比, 将石墨烯作为表面等离子体材料不仅成本更低, 还具有可调性等许多优点。

基金项目: 四川省大学生创新创业训练基金资助项目 (S202010619076); 西南科技大学校级重点教育教学改革与研究项目 (19xnz21); 四川省高等教育人才培养质量和教学改革基金资助项目 (JG2018-507); 西南科技大学素质类教改专项基金资助项目 (19szjg03); 西南科技大学大学生创新基金资助项目 (CX20-029)

作者简介: 廖秋雨 (2000-), 男, 大学本科, 主要从事石墨烯拓扑边界态研究。

* 通讯联系人。E-mail: zhangkefeijike@163.com

收稿日期: 2020-08-19; 收到修改稿日期: 2020-09-29

2009年, OCHIAI 等人^[10]在石墨烯蜂窝晶格光子晶体中讨论了狄拉克点、拓扑边界等内容,并研究了其拓扑相变。2013年, KHANIKAEV 等人^[11-12]通过实验使2维光子拓扑绝缘体和光的量子自旋霍尔效应得以实现。2015年, CONSTANT 等人^[13]在石墨烯中通过红外光的近场散射激发表面等离子体激元。2016年, SLOBOZHANYUK 等人^[14]设计了一种超材料光子晶体,具有工程各向异性,实现了拓扑保护态,并证明了拓扑结构下的强鲁棒性和无背向散射的特性。2017年, MA 等人^[15]用数值方法研究了石墨烯和1维光子晶体的复合结构对光波的吸收属性,发现复合结构吸收谱具有类似1维光子晶体通带结构的吸收带结构。2018年, LU 等人^[16]基于3-D磁性Weyl光子晶体,设计了一种单向光纤的传输模式,通过打破了时间反演对称性,实现了拓扑保护。同年, SONG^[17]基于石墨烯提出了拓扑光子晶体平板结构,实现拓扑边界态并验证其鲁棒性,证明了此结构在60THz~120THz范围的可调谐性。2019年, GAO 等人^[18]实现了光子晶体拓扑边界态光子自旋引导机制的光波导,有效提高了波导的传输效率,加强了波导结构的光子局域性,抑制背向散射,实现鲁棒性好的单向拓扑传输。2020年, HAN 等人^[19]基于石墨烯在中红外和太赫兹波段可以产生表面等离子激元,设计了一种共振可调结构,从而在纳米尺度上有效控制石墨烯与光的相互作用。同年, BI 等人^[20]发明了一种硅基集成基于拓扑保护机理的光隔离器件,通过拓扑平台结构,有效减小了器件体积,且具有较小损耗等优势。

综上所述,光学拓扑态的实现可更好地控制光在特定通道内进行传播,同时具有高传输效率和低损耗的优势,引入石墨烯等离子体为把光集中在纳米尺度进行研究提供了依据。本文中基于石墨烯等离子体,提出一种新型2维光子晶体结构,通过调节一个周期内两个石墨烯圆盘的直径大小,最终实现拓扑边界传输态。研究结果可为在纳米量级设计具有对结构缺陷免疫的可调谐光子传输器件提供理论依据,给光学器件领域的研究注入新的活力。

1 理论分析与计算

空间反演对称性和时间反演对称性保护着狄拉克锥,但当任意一个被破坏时,狄拉克简并将被打开,产生拓扑带隙。

量子霍尔效应基于时间反演对称性被破坏,用第一陈数 C 来描述此系统情况下的拓扑性质,其表征整

数量子霍尔效应的拓扑不变量,它只能在能隙闭合的地方才会改变。引入 Z_2 不变量^[10]表征具有时间反演对称性系统的拓扑性质:

$$Z_2 = \frac{1}{2\pi} \left[\oint_{\partial B^+} A(\mathbf{k}) d\mathbf{l} - \int_{B^+} \Omega(\mathbf{k}) d\mathbf{k}^2 \right] \text{mod } 2 \quad (1)$$

式中, \mathbf{k} 是波矢, $A(\mathbf{k})$ 是贝里联络, $\Omega(\mathbf{k})$ 是贝里曲率, B^+ 表示半个布里渊区^[21], ∂B^+ 为沿着半个布里渊区 B^+ 的边界, $d\mathbf{l}$ 表示在半个布里渊区里的路径积分微元, $\text{mod } 2$ 表示除以2取余数, $Z_2 = 0$ 为普通绝缘体, $Z_2 = 1$ 为拓扑绝缘体。

在霍尔电导实验中,垂直电导 R_{xx} 为零,霍尔电阻 R_{xy} 确定为定值量子化常数 $R_H = h/ve^2$, v 为填充数。对于整数量子霍尔效应,霍尔电导为:

$$\sigma_{xy} = N \frac{e^2}{h} = N/(25812.807572\Omega) \quad (2)$$

式中, h 是普朗克常数, e 是电子电荷, N 为正整数。

本文中采取调节石墨烯圆盘的直径大小来破坏晶格的时间反演对称性来打开狄拉克点,获得拓扑带隙,产生具有免疫结构缺陷和背向散射的拓扑边界保护态。

为控制同一周期内两个石墨烯圆盘的化学势一致,运用单层石墨烯上横向磁(transverse magnetic, TM)模的色散关系,在非延迟体系中 $\beta \gg k_0$, 即:

$$\beta = \epsilon_0 \frac{\epsilon_{\text{air}} + \epsilon_{\text{SiO}_2}}{2} \frac{2i\omega}{\sigma_g} \quad (3)$$

式中, $\epsilon_{\text{air}} = 1$, $\epsilon_{\text{SiO}_2} = 3.9$, 分别是空气和二氧化硅的介电常数,对应于本研究中的表层材料和基底材料, ϵ_0 是自由空间的真空介电常数, $k_0 = \omega/c$ 为自由空间中的波数, β 是在表面等离子体激元在石墨烯层上的传播常数, σ_g 为石墨烯的表面电导率, ω 是等离激元的角频率, c 是光速。

而石墨烯的带间电导率为:

$$\sigma_{\text{inter}} = \frac{ie^2}{4\pi\hbar} \ln \left[\frac{2|\mu_c| - \hbar(\omega + i/\tau)}{2|\mu_c| + \hbar(\omega + i/\tau)} \right] \quad (4)$$

式中, \hbar 是还原的普朗克常数, μ_c 是化学势, τ 是电子动量弛豫时间。

由上式可知,可通过施加外部电压来控制两个石墨烯圆盘的化学势保持相同。基于控制变量法,仅调节两个石墨烯圆盘的直径大小来破坏时间反演对称性。

2 石墨烯光子晶体结构

本文中提出一种周期性蜂窝状石墨烯表面等离激

元光子晶体结构。通过设置晶格常数 $a = 50\text{nm}$, 石墨烯圆盘直径 $d = 0.42a$, 石墨烯圆盘圆心之间的距离 $R = 3^{1/2}a/3$, 构建出三角晶格的六格点原胞, 如图 1 中正六边形所示, 蜂巢晶格的初始两格点原胞如图 1 中菱形所示。为增加对称性, 提高筒并度, 以包含两个石墨烯盘的菱形晶格为一个周期。其中 3-D 基底可采用 SiO_2 材料, 平面上的基底为石墨烯等离子体, 周期性排列于基底上的圆盘均为石墨烯材料, 共同组成蜂巢光子晶体结构。

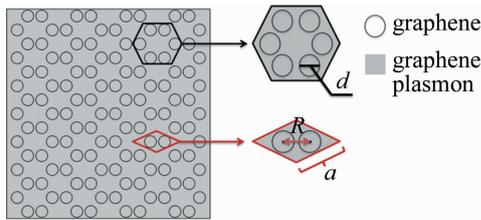


Fig. 1 Graphene plasmon honeycomb photonic crystal structure diagram

如图 2 所示, 是三角晶格原胞结构, 在倒格矢空间相对应的布里渊区 (Brillouin zone, BZ) 如图 3 所示, Γ - M - K - Γ 所围成的区域作为不可约布里渊区。

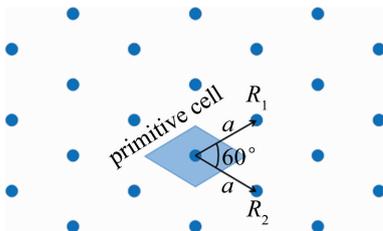


Fig. 2 Structure of primitive cell

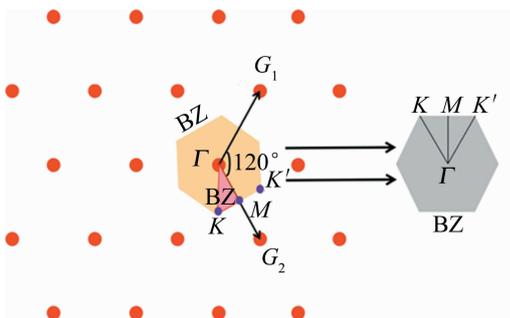


Fig. 3 Establishment of the BZ

3 仿真与分析

3.1 直径调节与能带拓扑效应

对石墨烯等离子体光子晶体结构的研究中发现, 石墨烯圆盘的大小可打开狄拉克点, 对带隙进行改变, 可实现能带拓扑效应。本小节中将研究直径调节与能带拓扑效应的关系, 将菱形晶格中的两个石墨烯圆盘直径分别设置为 d_1 (左) 和 d_2 (右), 如图 4 所示。



Fig. 4 Graphene disks diameter setting

将背景基底的石墨烯等离子体的化学势 μ_3 设置为 0.62eV , 同一周期内的两个石墨烯圆盘化学势保持一致, 设置 $\mu_1 = \mu_2 = 0.4\text{eV}$, 即 $\delta\mu = 0$, 避免化学势差值对仿真结果的影响, 其中, μ_1 和 μ_2 分别是以 d_1 和 d_2 为直径的石墨烯圆盘化学势。当 $d_1 = d_2 = 0.42a$, 即 $\delta d = 0$ 时, 仿真分析得其光场分布与能带结构如图 5 所示。

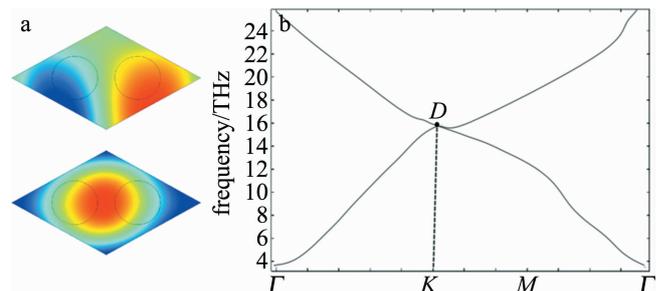


Fig. 5 Light field distribution and band structure

a—light field distribution at $\delta\mu = 0, \delta d = 0$ b—band structure at $\delta\mu = 0, \delta d = 0$

如图 5b 所示, 能带图中不存在带隙, 但在布里渊区角点 K/K' 相交形成的锥形色散, 即狄拉克锥; D 点为二重简并点, 被称作狄拉克点。

当两石墨烯圆盘直径 $d_1 = 0.4a, d_2 = 0.44a$ 时, 仿真结果如图 6 所示。狄拉克点被成功打开, 在 $15.3\text{THz} \sim 15.8\text{THz}$ 频率范围内, 获得间隙为 0.5THz 的带隙。

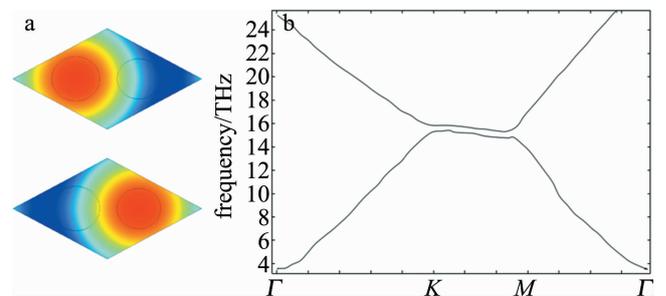


Fig. 6 Light field distribution and band structure

a—light field distribution at $d_1 = 0.4a, d_2 = 0.44a$ b—band structure at $d_1 = 0.4a, d_2 = 0.44a$

当两石墨烯圆盘直径 $d_1 = 0.38a, d_2 = 0.46a$ 时, 仿真结果如图 7 所示。可见狄拉克点仍可被成功打开, 在 $15.3\text{THz} \sim 15.77\text{THz}$ 频率范围内, 获得间隙为 0.47THz 的带隙。

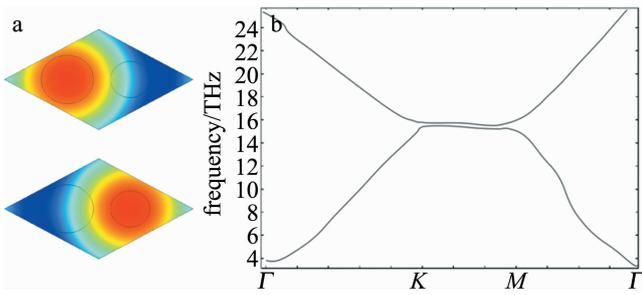


Fig. 7 Light field distribution and band structure

a—light field distribution at $d_1 = 0.38a, d_2 = 0.46a$ b—band structure at $d_1 = 0.38a, d_2 = 0.46a$

当两石墨烯圆盘直径 $d_1 = 0.36a, d_2 = 0.48a$ 时, 仿真结果如图 8 所示。可见狄拉克点仍被成功打开, 在 15.3THz ~ 15.75THz 频率范围内, 获得间隙为 0.45THz 的带隙。

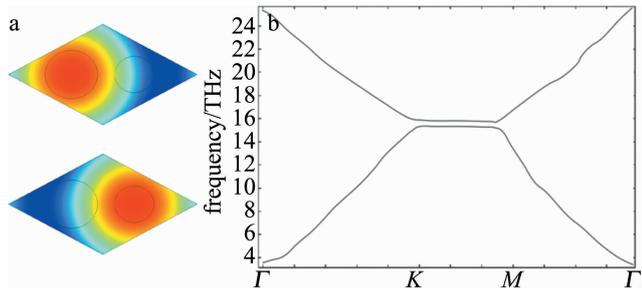


Fig. 8 Light field distribution and band structure

a—light field distribution at $d_1 = 0.36a, d_2 = 0.48a$ b—band structure at $d_1 = 0.36a, d_2 = 0.48a$

此后还分别模拟分析 $d_1 = 0.34a, d_2 = 0.5a$ 和 $d_1 = 0.52a, d_2 = 0.32a$ 时的光场分布和能带结构, 狄拉克点都可被成功打开, 并分别获得了 0.4THz 与 0.38THz 的带隙。

3.2 动态可调谐分析

在第 3.1 节的研究分析中, 基于周期内石墨烯圆盘相同化学势的状态下, 通过调节其石墨烯两圆盘的大小能打开狄拉克点, 实现能带拓扑效应, 同时得到不同频率范围的带隙。

当直径差值 δd 分别于 $0.04a, 0.08a, 0.12a, 0.16a, 0.2a$ 动态变化时, 分别打开了位于 15.3THz ~ 15.8THz, 15.3THz ~ 15.77THz, 15.3THz ~ 15.75THz, 15.3THz ~ 15.7THz, 15.5THz ~ 15.688THz 范围内的带隙。基于上述研究, 对带隙范围和间隙大小的数据进行统计分析。

由图 9 和图 10 可见, 当一个周期内的两个石墨烯圆盘的直径大小差值逐渐增加时, 带隙频率范围逐渐下移, 通过直径差值于 $0.04a \sim 0.2a$ 间以步长为 $0.04a$ 进行调节, 在频率范围 15.3THz ~ 15.8THz 间实

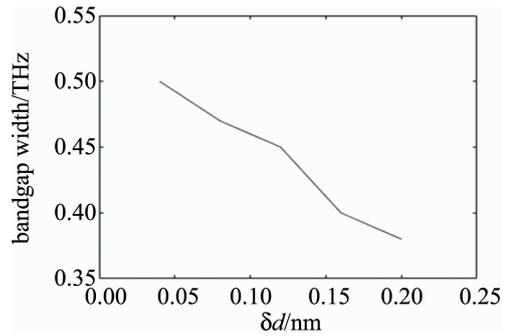


Fig. 9 Relationship between disc size adjustment and gap

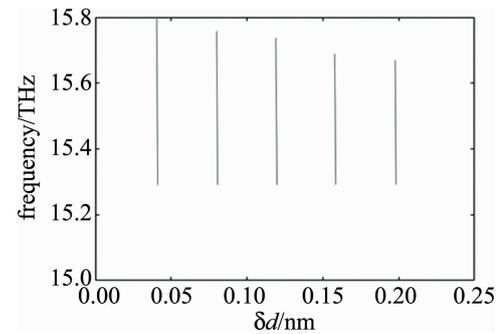


Fig. 10 Region of band gap change

现可调谐。随着圆盘大小差值增大, 获得带隙宽度逐渐变窄。

实验表明, 通过调节石墨烯圆盘的直径, 可在保持化学势不变的状态下, 实现石墨烯拓扑光子器件在 15.3THz ~ 15.8THz 频段的工作范围。

4 结论

拓扑效应革新了光子晶体中传统光学传输的认知, 在光子学领域具有巨大潜力。本文中提出一种新型石墨烯的等离激元光子晶体表面结构, 基于石墨烯圆盘直径大小的调节, 实现在 15.3THz ~ 15.8THz 频段内动态调制, 具有工作的灵活性。理论计算分析表明, 相较于普通的拓扑光子器件, 引入了石墨烯后, 可有效提高光传播性能; 晶格常数及模式体积均降至纳米量级, 比自由空间波长小了近 30 倍, 为纳米量级的高集成度光子传输器件的设计提供全新而有价值的理论依据。

作者下一步将在本文中提出的结构基础上, 设想一种拓扑边界传输通道的方案。为更大程度地实现器件的灵活性和可重构性, 通过调节以图 1 菱形为周期的两个石墨烯圆盘的直径大小, 于两个石墨烯圆盘中间的结构表面构建通道, 局域特定频段的电磁波, 实现拓扑边界传输。

关于动态控制的工作方式, 提出控制通断的光开关功能: 基于上述提出的通道, 研究石墨烯圆盘的直径

差值,设计实现通道打开的枢纽:当一个周期内两个石墨烯圆盘的面积存在差值时,该通道为导通状态;当直径差值恢复为 0 时,通道关闭。

参 考 文 献

- [1] LU L, JOANNOPOULOS J D, SOLJAČIĆ M. Topological photonics [J]. *Nature Photonics*, 2014, 8(11): 821-829.
- [2] NOVOSELOV K S. Electric field effect in atomically thin carbon films [J]. *Science*, 2004, 306(5696): 666-669.
- [3] XIAO S Sh. Graphene nanophotonics: From fundamentals to applications [C]// 2016 Progress in Electromagnetic Research Symposium (PIERS). New York, USA: IEEE, 2016: 3130.
- [4] BO X, ZHOU M, GUO L. Electrochemical sensors and biosensors based on less aggregated graphene [J]. *Biosensors & Bioelectronics*, 2017, 89(Pt 1):167-186.
- [5] CINTI S, ARDUINI F. Graphene-based screen-printed electrochemical (bio) sensors and their applications: Efforts and criticisms [J]. *Biosensors & Bioelectronics*, 2017, 89(Pt 1): 107-122.
- [6] MAIER S A, BARCLAY P E, JOHNSON T J, *et al.* Low-loss fiber accessible plasmon waveguide for planar energy guiding and sensing [J]. *Applied Physics Letters*, 2004, 84(20): 3990-3992.
- [7] WANG L. Research on optical properties of precious metal nanostructures and enhancement of optical effects by surface plasmons [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2011:1-128 (in Chinese).
- [8] REN M X, XU J J. Principle and application of surface plasma stimulus to enhance nonlinearity [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2013, 50(8):080002 (in Chinese).
- [9] WEI Zh N. Nano-plasma catalytic sensing research [D]. Chongqing: Chongqing University, 2018:1-139 (in Chinese).
- [10] OCHIAI T, ONODA M. Photonic analog of graphene model and its extension—Dirac cone, symmetry, and edge states [J]. *Physical Review*, 2012, B80(15):155103.
- [11] KHANIKAEV A B, HOSSEIN MOUSAVI S, TSE W K, *et al.* Photonic topological insulators [J]. *Nature Materials*, 2013, 12(3): 233-239.
- [12] MA T, KHANIKAEV A B, MOUSAVI S H, *et al.* Guiding electromagnetic waves around sharp corners: Topologically protected photonic transport in metawaveguides [J]. *Physical Review Letters*, 2015, 114(12):127401.
- [13] CONSTANT T J, HORNETT S M, CHANG D E, *et al.* All-optical generation of surface plasmons in graphene [J]. *Nature Physics*, 2015, 12(2):124-127.
- [14] SLOBOZHANYUK A P, KHANIKAEV A B, FILONOV D S, *et al.* Experimental demonstration of topological effects in bianisotropic metamaterials [J]. *Scientific Reports*, 2016, 6(1):22270-22275.
- [15] MA R K, ZHANG Y Ch, FANG Y T. Broadband THz absorbers based on graphene and 1-D photonic crystal [J]. *Laser Technology*, 2017, 41(5): 723-727 (in Chinese).
- [16] LU L, WANG Z. Topological one-way fiber of second Chern number [J]. *Nature Communications*, 2016, 9(1): 821-829.
- [17] SONG Z D. Topological photonic crystal design and research based on graphene [D]. Xi'an: University of Chinese Academy of Sciences (Xi'an Institute of Optical Precision Machinery, Chinese Academy of Sciences), 2018: 1-70 (in Chinese).
- [18] GAO Y F, JIANG Zh, LIU K Y, *et al.* Optical waveguide for photonic crystal topological boundary state photonic spin guidance mechanism: CN110007398A [P]. 2019-07-12 (in Chinese).
- [19] HAN J, GAO Y, JIAO W Y, *et al.* Mid-infrared plasmon control based on graphene nanoribbons [J]. *Chinese Journal of Optics*, 2020, 13(3): 627-636 (in Chinese).
- [20] BI L, YANG Y C, QIN J, *et al.* A silicon-based integrated optical isolation device based on topological protection mechanism: CN110941109A [P]. 2020-03-31 (in Chinese).
- [21] LIANG FU, KANE C L. Time reversal polarization and a Z_2 adiabatic spin pump [J]. *Physical Review*, 2006, B74(19):195312.