

**ЭЛЕКТРОДИНАМИКА
И РАСПРОСТРАНЕНИЕ РАДИОВОЛН**

УДК 621.371.334:537.874.6

**ЧИСЛЕННАЯ ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ МЕТОДА ВОЗМУЩЕНИЯ
ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ ОБ ОТРАЖЕНИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ
ВОЛНЫ ОТ НЕЛИНЕЙНОГО ГРАФЕНОВОГО СЛОЯ**

© 2022 г. А. М. Лерер*

*Южный федеральный университет,
ул. Зорге, 5, Ростов-на-Дону, 344090 Российская Федерация*

*E-mail: lerer@sfedu.ru

Поступила в редакцию 04.03.2022 г.

После доработки 04.03.2022 г.

Принята к публикации 25.04.2022 г.

Решение поставленной задачи сведено к решению системы нелинейных алгебраических уравнений третьей степени. Система решена численно и методом возмущения. Дана оценка области применимости метода возмущения.

DOI: 10.31857/S0033849422090091

Графен обладает исключительно сильной нелинейностью третьего порядка в сравнении с широко используемыми диэлектриками и металлами, а также сильным плазмонным откликом и гораздо меньшими потерями в ИК- и ТГц-диапазонах. Как линейная, так и нелинейная проводимости графена хорошо управляются с помощью электрического поля или химического легирования [1–5], что обеспечивает управление параметрами ПС без изменения размеров и структуры.

При электродинамическом моделировании структур, содержащих графеновые слои, можно использовать приближенные граничные условия. Первое граничное условие – непрерывность тангенциальных компонент напряженности электрического поля \vec{E}_τ

$$\vec{E}_\tau^+ = \vec{E}_\tau^- \quad (1)$$

второе –

$$\vec{j} = [\vec{n}, \vec{H}^+ - \vec{H}^-] = \sigma \vec{E}, \quad (2)$$

где \vec{H} – напряженность магнитного поля, \vec{n} – нормаль к поверхности, \vec{j} – плотность поверхностного тока, σ – поверхностная проводимость графена. Символы “+” и “–” введены для обозначения полей на верхней и нижней границах слоя.

Линейная часть $\sigma = \sigma^{(1)}$ определяется формулой Кубо–Хансена [6]. Поскольку графен имеет центрально-симметричную структуру, то в нелинейной части проводимости максимальный уровень будет иметь составляющая третьего порядка:

$$\sigma = \sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} |\vec{E}|^2.$$

Существует несколько формул для определения нелинейной проводимости (см. обзор [7]). При энергии кванта $\hbar\omega \ll 2\mu_c$ можно использовать формулу [8, 9]

$$\sigma^{(3)} = -iK \frac{e^4 v_F^2}{\omega^3 \hbar^2 \mu_c},$$

где e – заряд электрона, μ_c – химический потенциал (уровень Ферми), $v_F = 10^6$ м/с – скорость Ферми, ω – частота падающей волны, \hbar – приведенная постоянная Планка, $K = 3/32$.

Существуют и другие выражения коэффициента K : $3/8\pi$ [10], $1/8\pi$ [8, 11]. Во всех формулах зависимости от частоты и химического потенциала одинаковые, то выбор коэффициента K не принципиален, поскольку влияет лишь на амплитуду падающей волны, необходимой для достижения данного уровня нелинейности. В связи с этим на рис. 1 приведены значения коэффициента нелинейности $\delta = \sigma^{(3)} |E|^2 / \sigma^{(1)}$, где E напряженность поля на графеновом слое.

Самым простым способом решения нелинейной задачи является метод возмущения, т.е. использование в нелинейной проводимости напряженности электрического поля $|\vec{E}|^2$, полученной при решении линейной задачи, например, в [12–14].

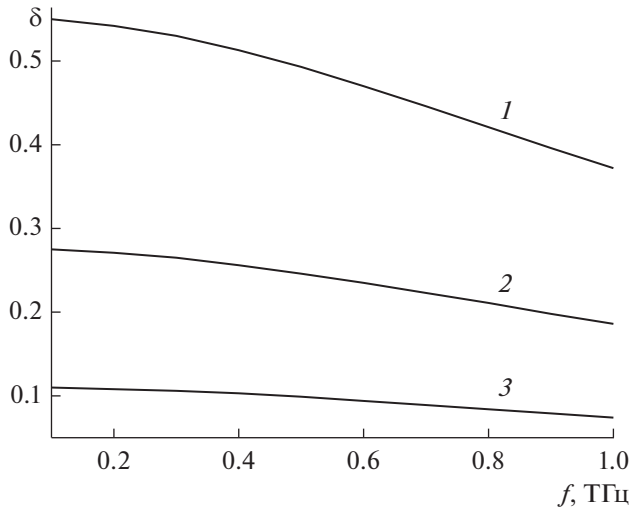


Рис. 1. Зависимость коэффициента нелинейности от частоты при $E = 1.1$ (1), 0.79 (2) и 0.5 кВ/мм (3).

Оценить теоретически погрешность метода возмущения непростая задача.

Цель данной работы – решение строгим методом и методом возмущения простой задачи об отражении плоской электромагнитной волны от нелинейного графенового слоя и получение оценки метода возмущений из сравнения решений.

Полагаем, что на 1d-структуру – полупространство с показателем преломления n_1 , графеновый слой, полупространство с показателем преломления n_2 , – падает из верхнего полупространства E -поляризованная волна под углом θ (ее амплитуда E_0 , частота f_1). Графеновый слой лежит в плоскости $y = 0$. В спектре отраженных и прошедших волн будем учитывать только волны на основной частоте f_1 и на утроенной $f_3 = 3f_1$.

Напряженность электрического поля можно представить в виде

$$E(x, y) = E^\pm(y) \exp(-ik_x x),$$

где

$$k_x = k_1 \sin \theta, \quad k_m = \frac{\omega_m}{c} n_1 = \frac{2\pi f_m}{c} n_1, \quad E^+(y) = E_0 \times \tag{3}$$

$$\times \left[\cos(\omega_1 t + \alpha_1 y) + \sum_{m=1,3} A_m \cos(\omega_m t - \alpha_m y) \right],$$

$$E^-(y) = E_0 \sum_{m=1,3} B_m \cos(\omega_m t + \beta_m y), \tag{4}$$

$$\alpha_m = \sqrt{(k_m n_1)^2 - k_x^2}, \quad \beta_m = \sqrt{(k_m n_2)^2 - k_x^2}.$$

Подставляя (3), (4) в (1), получим

$$1 + A_1 = B_1, \quad A_3 = B_3. \tag{5}$$

Затем подставляем (3), (4) в (2) и после достаточно простых, но громоздких тригонометрических преобразований, получим

$$\left[\frac{\alpha_1}{\omega_1} (2 - B_1) - \left(\frac{\beta_1}{\omega_1} + \zeta_1 \right) B_1 \right] = \zeta_3 E_0^2 F_1, \tag{6}$$

$$\left[-\frac{\alpha_3}{\omega_3} B_3 - \left(\frac{\beta_3}{\omega_3} + \sigma_1 \mu_0 \right) B_3 \right] = \sigma_3 E_0^2 F_3, \tag{7}$$

$\zeta = \sigma_m^{(3)} \mu_0$ (μ_0 – магнитная постоянная),

$$F_m = \sum_{n=1,3} D_{mn} B_n,$$

$$D_{11} = \left(A_0 + \frac{1}{2} A_2 \right), \quad D_{13} = \left(A_0 + \frac{1}{2} A_2 + \frac{1}{2} A_4 \right),$$

$$D_{31} = \frac{1}{2} (A_2 + A_4), \quad D_{33} = \frac{1}{2} A_6,$$

$$A_0 = \frac{1}{2} [|B_1|^2 + |B_3|^2],$$

$$A_2 = \frac{1}{2} [|B_1|^2 + (B_1^* B_3 + B_1 B_3^*)],$$

$$A_4 = \frac{1}{2} \tilde{B} = \frac{1}{2} (B_1^* B_3 + B_1 B_3^*), \quad A_6 = \frac{1}{2} |B_3|^2.$$

При выводе (6), (7) учтены формулы (5).

Система (6), (7) – система из двух алгебраических уравнений третьего порядка. Рассмотрим два подхода к решению этой системы.

Метод возмущения (МВ). Решаем (6) в линейном приближении

$$B_1 \approx B_{1,l} = 2n_1 / N, \tag{8}$$

где $N = n_1 + n_2 + Z_0 \sigma_1$.

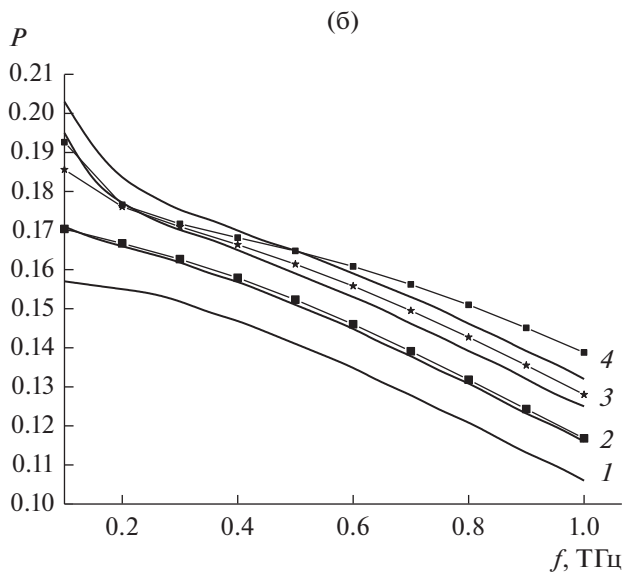
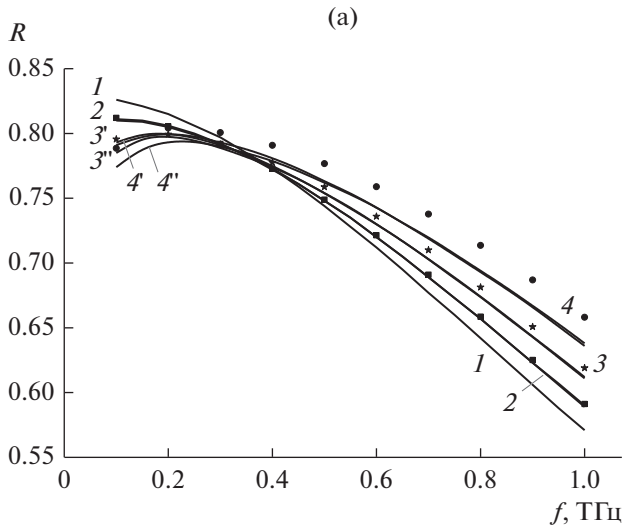


Рис. 2. Коэффициенты отражения R (а) и потерь P (б) основной гармоники в случае линейного (кривая 1) и нелинейного режима (все остальные кривые), вычисленные прямым методом (сплошные кривые) и методом возмущения (точки); уровень нелинейности $\delta \approx 0.1$ (2), 0.25 (3), 0.5 (4); первое (3', 4') и второе (3'', 4'') приближение.

Подставляем (8) в (6), (7) и находим для нелинейного случая

$$B_1 = \frac{2n_1}{N + \frac{3}{4}\zeta(E_0 B_{1,l})^2}, \quad B_3 = -\frac{1}{4N}\zeta(E_0 B_{1,l})^2 B_{1,l}, \quad (9)$$

где $\zeta = Z_0 \sigma^{(3)}$.

Решение алгебраических уравнений третьего порядка методом Ньютона (МН). Полагаем в (6) $B_3 = 0$

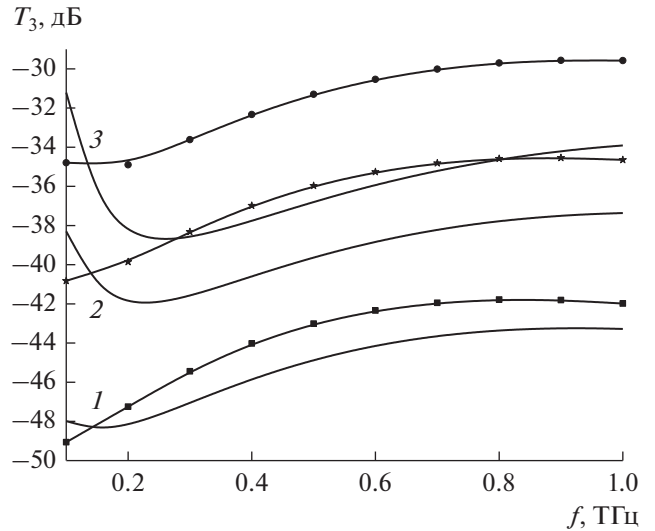


Рис. 3. Коэффициенты прохождения третьей гармоники, вычисленные методом прямым методом (сплошные кривые) и методом возмущения (кривые с точками); уровень нелинейности $\delta \approx 0.1$ (1), 0.25 (2), 0.5 (3).

и решаем уравнение (6) относительно переменной B_1

$$B_1 = \frac{2n_1}{N + \zeta E_0^2 \frac{3}{4} B_1^2}.$$

Обозначаем полученное решение $B_1^{(1)}$.

Находим коэффициент прохождения третьей гармоники. Для этого решаем нелинейное уравнение (7) относительно переменной B_3

$$-NB_3 = \zeta E_0^2 \left[(B_1^{(1)})^3 \frac{1}{4} + 3(B_1^{(1)})^2 B_3 \frac{1}{2} + B_3^3 \frac{3}{4} \right] \quad (10)$$

при начальном условии

$$B_3 = B_3^{(0)} = -\frac{1}{N}\zeta E_0^2 (B_1^{(1)})^3 \frac{1}{4}.$$

Обозначаем полученное решение $B_3^{(1)}$.

Подставляем $B_3^{(1)}$ в (6) и решаем еще раз уравнение относительно B_1 . Обозначаем полученное решение $B_1^{(2)}$.

Еще раз решаем уравнение (10), в котором надо заменить $B_1^{(1)}$ на $B_1^{(2)}$. Полученное решение обозначаем $B_3^{(2)}$.

Этот итерационный процесс при необходимости можно повторить.

Рассмотрим результаты расчетов коэффициентов отражения $R = |B_1 - 1|^2$ (рис. 2), потерь P основной гармоники (рис. 3) и коэффициента про-

хождения третьей гармоники $T_3 = 20 \lg |B_3|$ (рис. 4). Из (5) следует, что для третьей гармоники коэффициенты прохождения и отражения равны. Результаты расчетов приведены для $\mu = 0.45$ эВ, $\tau = 1$ пс при нормальном падении.

Малая амплитуда падающего поля равна $\delta \approx 0.1$. Как видно из рис. 2, 3, для основной гармоники прямое численное решение и решение методом возмущения практически совпадают. Средняя амплитуда падающего поля равна $\delta \approx 0.25$, большая $\delta \approx 0.5$. Небольшие различия при низких частотах можно объяснить резким возрастанием $\sigma^{(3)}$ (5) при уменьшении частоты.

Метод возмущения дает также завышенные значения коэффициента прохождения третьей гармоники T_3 (см. рис. 4) при всех частотах за исключением низких. Расхождение не принципиальное, но его следует учитывать при расчете нелинейных графеновых структур в области плазмонного резонанса.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание в области научной деятельности, № ГЗ0110/22-01-ЭП).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cox J.D., García De Abajo F.J. // Accounts of Chemical Research. 2019. V. 52. № 9. P. 2536.
2. Zhou R., Ullah K., Yang S. et al. // Nanophotonics. 2020. V. 9. № 7. P. 1695.
3. Panoiu N.C., Sha W.E.I., Lei D.Y., Li G.C. // J. Opt. 2018. V. 20. № 8. P. 083001.
4. Hafez H.A., Turchinovich D., Bonn M. et al. // Adv. Opt. Materials. 2019. V. 7. № 19. P. 1900771.
5. Ying Li, Hui Li, Shiwei Wu, Wei-Tao Liu // J. Chem. Phys. 2020. V. 153. P. 080903.
6. Hanson G.W. // J. Appl. Phys. 2008. V. 103. № 6. P. 064302.
7. Черепанов В.В. // Физ. основы приборостроения. 2020. Т. 9. № 4. С. 2.
8. Cheng J.L., Vermeulen N., Sipe J.E. // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. № 23. P. 235320.
9. Mikhailov S.A. // Phys. Rev. B. 2016. V. 93. № 8. P. 085403.
10. Smirnova D.A., Shadrivov I.V., Kivshar Y.S., Smirnov A.I. // Laser&Photonics Rev. 2014. V. 8. № 2. P. 291.
11. Cheng J.L., Vermeulen N., Sipe J.E. // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. № 23. P. 235320.
12. Pitilakis A., Chatzidimitriou D., Kriezis E.E. // Opt. Quant. Electron. 2016. V. 48. № 4. P. 243.
13. Panoiu N.C., Sha W.E.I., Lei D.Y., Li G.-C. // J. Optics. 2018. V. 20. № 8. P. 083001.
14. Лепер А.М., Макеева Г.С., Черепанов В.В. // РЭ. 2021. Т. 68. № 6. С. 543.