# ЗАДАЧА ДИФРАКЦИИ ТЕ-ВОЛНЫ НА ДВУМЕРНОМ СЛОЕ, ПОКРЫТОМ ГРАФЕНОМ, С УЧЕТОМ НЕЛИНЕЙНОСТИ

#### С. В. Тихов

Пензенский государственный университет, Пенза, Россия tik.stanislav2015@yandex.ru

Аннотация. Актуальность и цели. Поднимается проблема изучения оптических свойств графена с учетом присущей данному материалу оптической нелинейности и влияния окружающей среды. Целями работы являются исследование задачи дифракции ТЕ-поляризованной волны на двумерном слое, покрытом графеном, и разработка эффективного численного метода решения этой задачи. Материалы и методы. С использованием метода функций Грина задача дифракции сводится к граничному гиперсингулярному интегральному уравнению, для решения которого применяется метод коллокаций, дополненный итерационным методом для учета нелинейности графена. Результаты. Построен метод исследования оптических свойств графена или любого другого двумерного материала, свойства которого описываются (возможно, нелинейной) поверхностной проводимостью, учитывающий как внутреннюю оптическую нелинейность графена, так и влияние окружающей среды. Выводы. Главным достоинством разработанного метода является то, что его применение не требует наложения каких-либо ограничений на параметры задачи, в том числе частоту падающей электромагнитной волны, а также допускает произвол в задании проводимости двумерного покрытия, что открывает широкие возможности для исследования смежных задач.

**Ключевые слова**: электромагнитные волны, графен, нелинейность, задача дифракции, интегральные уравнения

**Финансирование**: работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 20-11-20087).

Для цитирования: Тихов С. В. Задача дифракции ТЕ-волны на двумерном слое, покрытом графеном, с учетом нелинейности // Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе. 2024. № 4. С. 73–85. doi: 10.21685/2227-8486-2024-4-6

# SCATTERING PROBLEM OF TE-WAVE ON A TWO-DIMENSIONAL LAYER, COVERED WITH GRAPHENE, ACCOUNTING FOR THE NONLINEARITY

#### S.V. Tikhov

Penza State University, Penza, Russia tik.stanislav2015@yandex.ru

**Abstract.** Background. This paper focuses on the study of optical properties of graphene accounting for the intrinsic optical nonlinearity of this material as well as the effects of the

<sup>©</sup> Тихов С. В., 2024. Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License / This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.

surrounding media. The paper aims to consider a diffraction problem of an electromagnetic wave on a two-dimensional slab covered with graphene, and to develop an effective numerical method for solving this problem. *Materials and methods*. Using Green's functions approach, the diffraction problem is reduced to a boundary hypersingular integral equation for solving which we apply the collocation method together with an iterative one in order to account for the nonlinearity of graphene. *Results*. We constructed the method of studying the optical properties of graphene or any other two-dimensional material whose properties are described by (probably, nonlinear) surface conductivity, accounting for the intrinsic nonlinearity of graphene as well as the effects of the surrounding environment. *Conclusions*. The main advantage of the developed method is the fact that it is applicable with no restrictions on the parameters of the problem, in particular a frequency of an incident electromagnetic wave, and allows for arbitrary expressions for the conductivity of two-dimensional covering, which opens up new opportunities for studying related problems.

**Keywords**: electromagnetic waves, graphene, nonlinearity, scattering problem, integral equations

**Financing**: the work was carried out with the support of the Russian Science Foundation (project № 20-11-20087).

**For citation**: Tikhov S.V. Scattering problem of TE-wave on a two-dimensional layer, covered with graphene, accounting for the nonlinearity. *Modeli, sistemy, seti v ekonomike, tekhnike, prirode i obshchestve = Models, systems, networks in economics, technology, nature and society.* 2024;(4):73–85. (In Russ.). doi: 10.21685/2227-8486-2024-4-6

#### Введение

В настоящее время в России и за рубежом большое внимание уделяется изучению двумерных материалов и двумерных электронных компонентов. Среди них особое место занимает графен, впервые экспериментально полученный в 2004 г. Геймом и Новоселовым [1, 2].

Графен представляет собой двумерный слой атомов углерода, образующих гексагональную решетку. Благодаря своему строению графен обладает рядом уникальных физических свойств, в том числе необычными оптическими свойствами. Во-первых, графен способен поглощать электромагнитное излучение в широком диапазоне частот от видимого света до средне-инфракрасного излучения, причем величиной поглощения в графене можно управлять с помощью легирования или приложения к графену некоторой разности потенциалов, что может быть использовано для разработки широкополосных насыщаемых поглотителей для сверхбыстрых лазеров [3]. Во-вторых, подвижность электронов в графене может достигать очень больших значений, что является перспективным для создания высокоскоростных электрооптических модуляторов и фотоприемников [4]. В-третьих, графеновые фотонные устройства являются перспективными для приложений в биохимическом зондировании, поскольку графен обладает огромной адсорбционной способностью из-за большой удельной поверхности монослоя атомов углерода [5].

При нормальном падении света на слой графена (под прямым углом к поверхности) поглощение электромагнитного излучения составляет около 2,3 %. Хотя для материала толщиной в атомный слой этот показатель представляется весьма внушительным, как правило, на практике такое поглощение недостаточно. Для усиления взаимодействия света и вещества в графеновых фотонных устройствах графен интегрируют с различными фотонными

структурами, такими как плазмонные структуры, оптоволоконные структуры или фотонные интегральные схемы. За последние десять лет появилось множество работ, в которых авторы предлагают разные интегрированные в волноводы графеновые фотонные устройства в качестве эффективных широкополосных поляризаторов [6], насыщаемых поглотителей [7], оптических модуляторов [8] и фотодетекторов [9].

В работах С. А. Михайлова было впервые теоретически предсказано, что графен обладает сильной кубической (оптической) нелинейностью, обусловленной взаимодействием носителей заряда в графене с электромагнитным полем [10, 11]. С тех пор оптическая нелинейность графена очень широко изучалась многими исследователями. Были проведены различные эксперименты с графеном в свободном пространстве и графеном, размещенным на фотонных кристаллах, для исследования различных нелинейных явлений в графене, включая генерацию комбинационных частот, эффекты Керра (или, другими словами, эффекты самовоздействия, не влияющие на частоту электромагнитного излучения), двухфотонное поглощение и др. Оптическая нелинейность графена открывает большие перспективы для создания нового поколения фотонных устройств, использующих нелинейности [12, 13].

Для разработки указанных устройств необходимо полное понимание нелинейного взаимодействия графена с электромагнитным полем. В общем случае оно определяется как внутренней оптической нелинейностью графена, так и влиянием окружающей среды, поскольку, как уже отмечалось ранее, на практике графен интегрируют с фотонными структурами, например, размещают на кремниевой подложке.

## Материал и методика

Для численного моделирования оптических свойств графена предлагается рассмотреть задачу дифракции монохроматической ТЕ-поляризованной электромагнитной волны на плоском диэлектрическом слое, покрытом графеном, с учетом оптической нелинейности графена.

Ниже представлена постановка задачи.

Определим множества

$$\Omega_{1} := \{(x,z) : x > h, z \in \mathbb{R}\}, \quad \Omega_{2} := \{(x,z) : 0 < x < h, z \in \mathbb{R}\}, 
\Gamma_{0} := \{(x,z) : x = 0, z \in \mathbb{R}\}, \quad \Gamma_{h} := \{(x,z) : x = h, z \in \mathbb{R}\}.$$

Рассмотрим двумерный бесконечный слой  $\Omega_2$  толщиной h, покрытый графеном на границе  $\Gamma_h$  и имеющий идеально проводящую стенку на границе  $\Gamma_0$ . Области  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  заполнены изотропными однородными немагнитными средами, которые характеризуются постоянными вещественными диэлектрическими проницаемостями.

На границу  $\Gamma_h$  из полуплоскости  $\Omega_1$  падает монохроматическая ТЕ-поляризованная волна  $\mathbf{E}^{\rm inc} \exp(-i\omega t)$ ,  $\mathbf{H}^{\rm inc} \exp(-i\omega t)$ , где  $\mathbf{E}^{\rm inc}$ ,  $\mathbf{H}^{\rm inc}$  есть комплексные амплитуды, имеющие вид

$$\mathbf{E}^{\text{inc}} = \left(0, \, \mathbf{E}_{y}^{\text{inc}}\left(x,z\right),0\right), \quad \mathbf{H}^{\text{inc}} = \left(\mathbf{H}_{x}^{\text{inc}}\left(x,z\right),0, \, \mathbf{H}_{z}^{\text{inc}}\left(x,z\right)\right).$$

Проходя через границу  $\Gamma_h$ , падающее поле  $\mathbf{E}^{\mathrm{inc}}, \mathbf{H}^{\mathrm{inc}}$  частично отражается и частично проходит вглубь  $\Omega_2$ . Пусть  $\left(\mathbf{E}^{\mathrm{ref}}, \mathbf{H}^{\mathrm{ref}}\right) \exp(-i\omega t)$  и  $\left(\mathbf{E}^{\mathrm{tm}}, \mathbf{H}^{\mathrm{tm}}\right) \exp(-i\omega t)$  обозначают отраженное и прошедшее поля. Тогда полное поле имеет вид  $\left(\mathbf{E}^{\mathrm{tot}}, \mathbf{H}^{\mathrm{tot}}\right) \exp(-i\omega t)$ , где

$$\mathbf{E}^{\text{tot}} = \begin{cases} \mathbf{E}^{\text{ref}} + \mathbf{E}^{\text{inc}}, & (x, z) \in \Omega_{1}, \\ \mathbf{E}^{\text{trn}}, & (x, z) \in \Omega_{2}, \end{cases} \quad \mathbf{H}^{\text{tot}} = \begin{cases} \mathbf{H}^{\text{ref}} + \mathbf{H}^{\text{inc}}, & (x, z) \in \Omega_{1}, \\ \mathbf{H}^{\text{trn}}, & (x, z) \in \Omega_{2}. \end{cases}$$

Предполагая, что отраженное и прошедшее поля имеют ту же поляризацию, что и падающий свет, имеем

$$\mathbf{E}^{\text{ref}} = \left(0, \mathbf{E}_{y}^{\text{ref}}\left(x, z\right), 0\right), \quad \mathbf{H}^{\text{ref}} = \left(\mathbf{H}_{x}^{\text{ref}}\left(x, z\right), 0, \mathbf{H}_{z}^{\text{ref}}\left(x, z\right)\right),$$

$$\mathbf{E}^{\text{trn}} = \left(0, \mathbf{E}_{y}^{\text{trn}}\left(x, z\right), 0\right), \quad \mathbf{H}^{\text{trn}} = \left(\mathbf{H}_{x}^{\text{trn}}\left(x, z\right), 0, \mathbf{H}_{z}^{\text{trn}}\left(x, z\right)\right).$$

Комплексные амлплитуды  ${\bf E}^{\rm tot}$ ,  ${\bf H}^{\rm tot}$  удовлетворяют уравнениям Максвелла. Касательная компонента  ${\bf E}_{\tau}^{\rm tot}$  электрического поля обращается в нуль на границе  $\Gamma_0$ . Наличие графенового покрытия на границе  $\Gamma_h$  обусловливает следующее условие сопряжения:

$$[n, \mathbf{H}^{\text{tot}}]_{\mathbf{x}=h+0} - [n, \mathbf{H}^{\text{tot}}]_{\mathbf{x}=h-0} = \sigma_{\mathbf{g}} \mathbf{E}_{\tau}^{\text{tot}}|_{\mathbf{x}=h-0},$$

где  $\mathbf{n} = (1,0,0)$  есть единичный вектор нормали, направленный вдоль оси Ox;  $[\cdot;]$  — векторное произведение и  $\sigma_g$  — проводимость графена. Предполагаем, что источник поля находится в конечной области, поэтому как отраженное  $\mathbf{E}^{\mathrm{ref}}$ ,  $\mathbf{H}^{\mathrm{ref}}$ , так и падающее  $\mathbf{E}^{\mathrm{inc}}$ ,  $\mathbf{H}^{\mathrm{inc}}$  поля удовлетворяют условиям Зомерфельда в полуплоскости  $\Omega_1$ .

Ниже индекс *j* принимает значения 1,2. Введем обозначения  $u_1(x,z)\coloneqq \mathrm{E}_y^{\mathrm{ref}}\left(x,z\right),\ u_2(x,z)\coloneqq \mathrm{E}_y^{\mathrm{tm}}\left(x,z\right),\ u_{\mathrm{inc}}\coloneqq \mathrm{E}_y^{\mathrm{inc}}\left(x,z\right).$ 

Описанная задача дифракции эквивалентна краевой задаче, которая состоит в нахождении функций  $u_j(x,z) \in C^2(\Omega_j) \cap C(\overline{\Omega}_j)$ , удовлетворяющих паре уравнений Гельмгольца

$$\Delta u_i + k_i^2 u_i = 0, \quad (x, z) \in \Omega_i, \tag{1}$$

условию  $u_2|_{x=0} = 0$ , условию непрерывности на границе  $\Gamma_h$ , т.е.

$$u_1|_{x=h+0} - u_2|_{x=h-0} = -u_{\text{inc}}|_{x=h+0},$$
 (2)

условию сопряжения вида

$$\frac{\partial u_1}{\partial x}\Big|_{x=h+0} - \frac{\partial u_2}{\partial x}\Big|_{x=h-0} - \gamma \sigma_g u_2\Big|_{x=h-0} = -\frac{\partial u_{\text{inc}}}{\partial x}\Big|_{x=h+0},$$
(3)

где  $\gamma = (ic\epsilon_0)^{-1}$ , и условию излучения на бесконечности

$$\lim_{r \to \infty} \sqrt{r} u_1 = \text{const}, \quad \lim_{r \to \infty} \sqrt{r} \left( \frac{\partial u_1}{\partial r} + i k_1 u_1 \right) = 0, \quad r = \sqrt{x^2 + z^2}. \tag{4}$$

В качестве  $u_{\text{inc}}$  используем фундаментальное решение уравнения Гельмгольца в области  $\Omega_1$ , имеющее вид

$$u_{\text{inc}}(x,z) = \frac{Ai}{4}H_0^{(1)}(k_1\sqrt{(x-x_0)^2+(z-z_0)^2}),$$

где  $H_0^{(1)}$  есть функция Ханкеля первого рода; A,  $x_0$ ,  $z_0$  — вещественные параметры. Ниже будем также использовать обозначения

$$f(z) = u_{\text{inc}}(x,z)|_{x=h+0}, f'(z) = \frac{\partial u_{\text{inc}}(x,z)}{\partial x}\bigg|_{x=h+0}.$$

Краевую задачу (1)–(5) можно свести к граничному интегральному уравнению вида

$$(N_2 v)(z) + (N_1 v)(z) - \gamma \sigma_a v(z) = F(z),$$
 (5)

где v(z) есть след решения  $u_2(x,z)$  на границе  $\Gamma_h$ ,

$$(N_{j}\varphi)(z) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\eta) \frac{\partial G_{j}(x,z,\xi,\eta)}{\partial \xi} \bigg|_{\xi=h} d\eta \right]_{x=h},$$

и  $F(z) = (N_1 f)(z) - g(z)$ . Здесь  $G_j \equiv G_j(x, z, \xi, \eta)$  — функция Грина задачи Дирихле для двумерного уравнения Гельмгольца в области  $\Omega_j$ . Аналитические выражения для  $G_i$  представлены, например, в работе [14].

Оба интегральных оператора  $N_j$  являются гиперсингулярными. Для вычисления таких интегралов предлагается представить решение v(z) в виде Чебышевского ряда и использовать явные выражения для действия гиперсингулярного интегрального оператора на многочлены Чебышева второго рода [15]. Для этого потребуется провести ряд преобразований уравнения (5) и входящих в него интегральных операторов  $N_j$ , а именно необходимо перейти от интегралов по всей числовой прямой к интегралам по отрезку [-1,1], а также получить  $\sqrt{1-t^2}$  в качестве весовой функции.

Введем новые переменные

$$z = \ln \frac{1+\zeta}{1-\zeta}, \quad \eta = \ln \frac{1+p}{1-p}.$$

Представим решение v(z) в виде

$$v(z) = v\left(\ln\frac{1+\zeta}{1-\zeta}\right) = \tilde{v}(\zeta) = \sqrt{1-\zeta^2} \cdot \sum_{n=0}^{+\infty} c_n U_n(\zeta),$$

где  $U_n$  есть многочлены Чебышева второго рода, а  $c_n$  есть некоторые (искомые) коэффициенты. После выполнения ряда преобразований уравнение (5) примет вид

$$\sum_{n=0}^{+\infty} c_n \left( \Upsilon_n \left( \zeta \right) - \gamma \sigma_g \sin \left( (n+1) \arccos \zeta \right) \right) = \tilde{F} \left( \ln \frac{1+\zeta}{1-\zeta} \right), \tag{6}$$

где

$$\Upsilon_n(\zeta) = (n+1)\sqrt{1-\zeta^2}\sin((n+1)\arccos\zeta) + \sum_{i=1}^3 K_i^{(n)}(\zeta).$$

Здесь

$$K_i^{(n)}(\zeta) = \int_0^\pi \tilde{K}_i(\zeta, \cos\theta) \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin\theta} d\theta,$$
  
$$\tilde{K}_1(\zeta, p) = -\frac{1}{2\pi} \left( 1 - \frac{(1-p\zeta)^2}{(\zeta-p)^2} + \operatorname{arctanh}^{-2} \frac{\zeta-p}{1-p\zeta} \right),$$

а два других интегральных ядра определяются как

$$\tilde{K}_i(\zeta, p) = K_i \left( \ln \frac{1+\zeta}{1-\zeta}, \ln \frac{1+p}{1-p} \right),$$

где  $K_2(z,\eta) = S_1(z,\eta) + S_2(z,\eta)$ ,

$$S_{1}(z,\eta) = \frac{1}{h} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{q_{n}^{2} \exp(-\beta_{n}|z-\eta|)}{\beta_{n}} - \frac{q_{n}^{2} \exp(-q_{n}|z-\eta|)}{q_{n}},$$

$$S_2(z,\eta) = \frac{\pi \exp\left(-\frac{\pi}{h}|z-\eta\right)}{h^2\left(1-\exp\left(-\frac{\pi}{h}|z-\eta\right)\right)^2} - \frac{1}{\pi(z-\eta)^2},$$

$$K_{3}(z,\eta) = \frac{ik_{1}^{2}}{2} \left( \frac{H_{1}^{(1)}(k_{1}|z-\eta|)}{k_{1}|z-\eta|} + \frac{2i\pi^{-1}}{k_{1}^{2}|z-\eta|^{2}} \right),$$

и 
$$q_n = \pi n h^{-1}$$
,  $\beta_n = \sqrt{q_n^2 - k_2^2}$ .

С учетом присущей графену оптической нелинейности проводимость  $\sigma_{_{g}}$  в уравнении (6) имеет вид

$$\sigma_g = \sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} \left| \tilde{v} \right|^2 (\zeta), \tag{7}$$

где  $\sigma^{(1)}$ ,  $\sigma^{(3)}$  есть некоторые комплексные величины. При подставлении (7) в уравнение (6) последнее становится нелинейным. Для его решения предлагается использовать гибридный подход, основанный на использовании метода коллокации совместно с итерационным методом.

Ниже приведем описание указанного численного метода.

Преположим, что  $\sigma^{(3)}=0$  . В этом случае уравнение (6) является линейным и для его решения можно использовать классический метод коллокаций.

Введем сетку

$$-1 < \zeta_0 < \zeta_1 < \ldots < \zeta_N < 1$$

с узлами  $\zeta_k$ , являющимися корнями полинома Чебышева  $U_{N+1}(\zeta)$ . Будем искать приближенное решение уравнения (6) в виде

$$\tilde{v}_N(\zeta) = \sqrt{1 - \zeta^2} \cdot \sum_{n=0}^{N} c_n U_n(\zeta)$$
(8)

с коэффициентами, определяемыми из системы, состоящей из N+1 уравнений

$$\sum_{n=0}^{N} c_n \left[ Y_n(\zeta_k) - \gamma \sigma^{(1)} \sin((n+1)\arccos\zeta_k) \right] = \tilde{F}(\zeta_k), \tag{9}$$

которую можно решить при помощи метода Гаусса или какого-либо итерационного метода.

Пусть теперь  $\sigma^{(3)}$  отлична от нуля. Ясно, что в формуле (7) слагаемое  $\sigma^{(3)} |\tilde{v}|^2$  является небольшой поправкой для  $\sigma^{(1)}$ . Отсюда следует, что, как и прежде, приближенное решение уравнения (6) можно искать в виде

$$\tilde{v}_{N,M}(\zeta) = \sqrt{1 - \zeta^2} \cdot \sum_{n=0}^{N} c_n^{(M)} U_n(\zeta)$$
 (10)

с коэффициентами, определяемыми с помощью итерационной схемы

$$\sum_{n=0}^{N} c_n^{(M+1)} \left[ Y_n(\zeta_k) - \gamma \sin((n+1) \arccos \zeta_k) \cdot \sigma_{N,M}(\zeta_k) \right] = \tilde{F}(\zeta_k), \tag{11}$$

где M = 0,1,...,

$$\sigma_{N,M}(\zeta) = \sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} |\tilde{v}_{N,M}|^2 (\zeta).$$

В качестве начального приближения  $\tilde{v}_{_{N,0}}$  имеет смысл использовать линейное решение  $\tilde{v}_{_{N}}$  .

Ясно, что для того чтобы получить хорошее приближенное решение уравнения (6), нужно увеличивать число слагаемых в сумме (10), а также число итераций в схеме (11), до тех пор пока «расстояние» между текущим решением

$$\tilde{v}^{**}(\zeta) = \sqrt{1-\zeta^2} \sum_{n=0}^{N^{**}} c_n^{**} U_n(\zeta)$$

и предыдущим решением

$$\tilde{v}^*(\zeta) = \sqrt{1 - \zeta^2} \sum_{n=0}^{N^*} c_n^* U_n(\zeta)$$

не станет меньше некоторого заданного числа  $\delta > 0$ . Под «расстоянием» здесь имеется в виду равномерная норма  $\|\tilde{v}^{**}(\zeta) - \tilde{v}^*(\zeta)\|$ , которую можно оценить следующим образом:

$$\|\tilde{v}^{**}(\zeta) - \tilde{v}^{*}(\zeta)\| = \max_{\zeta \in [-1,1]} |\tilde{v}^{**}(\zeta) - \tilde{v}^{*}(\zeta)| \le$$

$$\le \sum_{n=0}^{N^{**}} \theta_{n} \max_{\zeta \in [-1,1]} \left| \sqrt{1 - \zeta^{2}} \cdot U_{n}(\zeta) \right| \le \sum_{n=0}^{N^{**}} \theta_{n} = D(\tilde{v}^{**}, \tilde{v}^{*}),$$
(12)

где величины  $\theta_n$  определяются как

$$\theta_n = \begin{cases} \left| c_n^{**} - c_n^{*} \right|, & 0 \le n \le N^{*}, \\ \left| c_n^{**} \right|, & N^{*} < n \le N^{**}. \end{cases}$$

# Результаты

Линейная часть проводимости графена состоит из межзонной и внутризонной составляющих, т.е.  $\sigma^{(1)} = \sigma_{\text{intra}} + \sigma_{\text{inter}}$ . Полагая, что графен сильно легирован  $|\mu_c| \gg k_b T$ ,  $\mu_c$  — химический потенциал, энергия фотонов падающей волны удовлетворяет неравенству  $\hbar \omega \leq 2 |\mu_c|$ , компоненты  $\sigma_{\text{intra}}$ ,  $\sigma_{\text{inter}}$  можно вычислить, используя формулы

$$\sigma_{\text{intra}}(\Omega) = \frac{ie^2}{\pi\hbar} \frac{1}{\Omega + i\nu_{\text{intra}}},$$

$$\sigma_{\text{inter}}(\Omega) = \frac{ie^2}{4\pi\hbar} \ln \frac{2 - |\Omega| - iv_{\text{inter}}}{2 + |\Omega| + iv_{\text{inter}}},$$

где  $\Omega = \hbar \omega / \mu_c$ ,  $\nu_{intra} = \hbar / \left( \left| \mu_c \right| \tau_{intra} \right)$ ,  $\nu_{inter} = \hbar / \left( \left| \mu_c \right| \tau_{inter} \right)$  [16]. Заметим, что величины  $\nu_{intra}$  и  $\nu_{inter}$  призваны учесть потери, обусловленные рассеянием электронов при конечных температурах. В вычислениях будут использованы  $\tau_{intra} = 100$  фс,  $\tau_{inter} = 1$  пс и  $\mu_c = 0.1$  эВ.

Нелинейный коэффициент  $\sigma^{(3)}$  в проводимости графена определяется по формуле

$$\sigma^{(3)}(\Omega) = -i\frac{3}{32}\frac{e^2}{\pi\hbar}\frac{\left(eV_F\right)^2\hbar^2}{\mu_e^4\Omega^3},$$

где  $V_F$  есть скорость Ферми [11].

Ниже представлены некоторые численные результаты.

В вычислениях использованы следующие параметры:  $k_1=1$  (воздух),  $k_2=3,42$  (соответствует кремнию Si), h=0,6. Считаем, что источник света расположен в точке с координатами  $x_0=2h$ ,  $z_0=0$  и излучает электромагнитную волну на частоте  $\omega/2\pi=3$  ТГц.

Подчеркнем, что безразмерная толщина h слоя  $\Omega_2$  должна коррелировать с его физическим размером. Действительно, h должна вычисляться по формуле  $h=k_0\tilde{h}$ , где  $\tilde{h}$  — реальная толщина слоя. Пусть  $\tilde{h}=10$  мкм . Для  $\omega/2\pi=3$  ТГц имеем  $k_0\approx 6\cdot 10^4$  м $^{-1}$ . Отсюда находим  $h\approx 0,6$ .

Определим последовательность  $a_k = kd$ , k = 1, 2, ..., 6, с шагом d = 96 (значение d выбрано кратным количеству процессоров, используемых для параллельных вычислений). Пусть  $\tilde{v}_{(k)}(\zeta)$  и  $\tilde{v}_{(k,m)}(\zeta)$  обозначают приближенные решения  $\tilde{v}_{a_k}$  и  $\tilde{v}_{a_k,m}$  соответственно интегрального уравнения (6), а  $D_k$ ,  $D_{k,m}$  обозначают расстояния между парами функций  $\tilde{v}_{(k)}$ ,  $\tilde{v}_{(k+1)}$  и  $\tilde{v}_{(k,m)}$ ,  $\tilde{v}_{(k,m+1)}$ , т.е.

$$D_k = D\left(\tilde{v}_{(k)}(\zeta), \tilde{v}_{(k+1)}(\zeta)\right), \quad D_{k,m} = D\left(\tilde{v}_{(k,m)}(\zeta), \tilde{v}_{(k,m+1)}(\zeta)\right),$$

где функция расстояния D определена в (12).

На рис. 1, 2 представлены приближенные решения  $\tilde{v}_{(k)} \equiv \tilde{v}_{(k)}(z)$  уравнения (6); переменная z связана с переменной  $\zeta$  соотношением  $\zeta = \tanh(z/2)$ . Табл. 1 позволяет оценить расстояние между найденными приближенными решениями  $\tilde{v}_{(k)}$ .

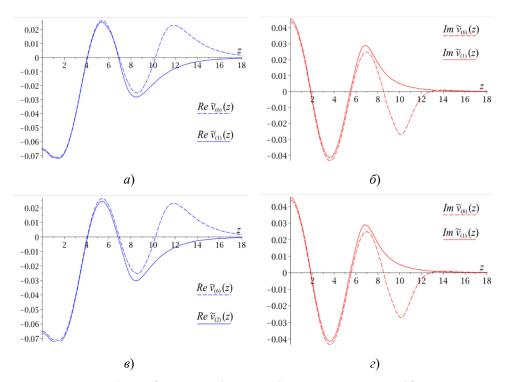


Рис. 1. Приближенные (линейные) решения уравнения (6)

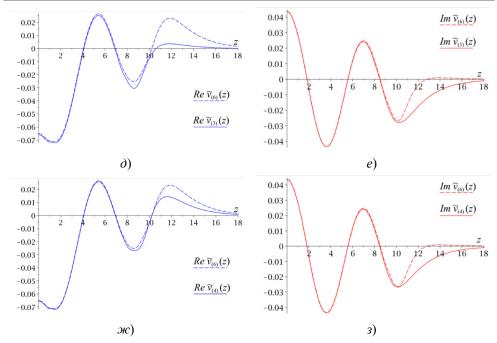


Рис. 1. Приближенные (линейные) решения уравнения (6). Окончание

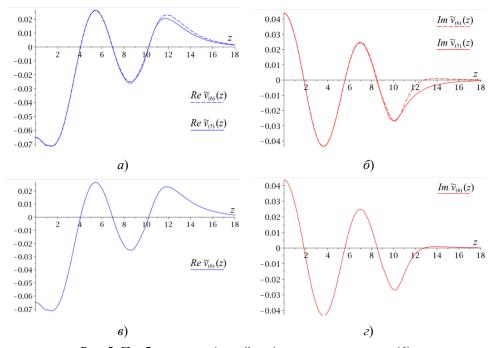


Рис. 2. Приближенные (линейные) решения уравнения (6)

. Таблица 1 Сравнение приближенных решений уравнения (6) при  $\, \sigma^{(3)} = 0 \,$ 

$D_{\rm l}$	$D_2$	$D_3$	$D_4$	$D_5$
$3,963 \cdot 10^{-2}$	$2,315 \cdot 10^{-2}$	$1,628 \cdot 10^{-2}$	$1,258 \cdot 10^{-2}$	$1,041\cdot 10^{-2}$

Очевидно, что для того чтобы оптическая нелинейность графена стала заметна, амплитуда падающей волны должна быть достаточно большой. Для этого умножим  $u_{\text{inc}}$  на  $A = 10^7 \text{ B} \cdot \text{m}^{-1}$ . Это приведет к появлению множителя A в правых частях уравнений (6), (9), (11).

На рис. 3 представлено приближенное (нелинейное) решение  $\tilde{v}_{(6,5)}(\zeta)$  уравнения (6). В табл. 2 содержатся расстояния  $D_{k,m}$ .

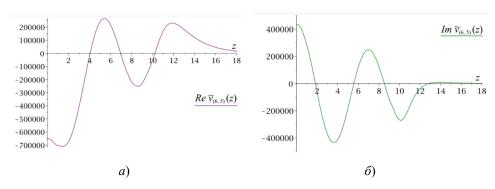


Рис. 3. Приближенные (нелинейные) решения уравнения (6)

Таблица 2 Сравнение приближенных решений уравнения (6) при  $\sigma^{(3)} \neq 0$ 

$D_{5,0}$	$D_{5,1}$	$D_{5,2}$	$D_{5,3}$	$D_{5,4}$
3831	23	$1,481\cdot10^{-1}$	$9,227 \cdot 10^{-4}$	$5,67 \cdot 10^{-6}$

Представленные рисунки и таблицы наглядно демонстрируют работоспособность предложенного в работе метода. Разумеется, сходимость метода должна быть доказана аналитически. Автор планирует исследовать этот вопрос в будующих работах.

## Заключение

В данной работе исследована задача дифракции монохроматической ТЕ-волны на двумерном слое, покрытом графеном, с учетом оптической нелинейности графена. Для решения этой задачи разработан эффективный математический метод. Главным преимуществом этого метода является то, что он не накладывает каких-либо ограничений на параметры задачи, в том числе частоту электромагнитной волны. Стоит подчеркнуть, что предложенный метод может быть применен для исследования и других двумерных материалов, оптические свойства которых описываются поверхностной проводимостью. Кроме того, задавая проводимость двумерного покрытия слоя кусочно-постоянной функций, с помощью обсуждаемого метода можно исследовать оптические свойства решеток из полос, изготовленных из графена или какого-либо другого двумерного материала.

### Список литературы

- 1. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V. [et al.]. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films // Science. 2004. Vol. 306. P. 666–669. doi: 10.1126/science.1102896
- Geim A. K., Novoselov K. S. The rise of graphene // Nature Materials. 2007. Vol. 6. P. 183–191. doi: 10.1038/nmat1849
- 3. Bao Q., Zhang H., Wang Y. [et al.]. Atomic-Layer Graphene as a Saturable Absorber for Ultrafast Pulsed Lasers // Adv. Funct. Mater. 2009. Vol. 19. P. 3077–3083. doi: 10.1002/adfm.200901007
- 4. Xia F., Mueller T., Lin Y. [et al.]. Ultrafast graphene photodetector // Nature Nanotech. 2009. Vol. 4. P. 839–843. doi: 10.1038/nnano.2009.292
- Bai Y., Xu T., Zhang X. Graphene-Based Biosensors for Detection of Biomarkers // Micromachines. 2020. Vol. 11, № 1. P. 60. doi: 10.3390/mi11010060
- 6. Bao Q., Zhang H., Wang B. [et al.]. Broadband graphene polarizer // Nat Photonics. 2011. Vol. 5. P. 411–415. doi: 10.1038/nphoton.2011.102
- 7. Wang J., Liang Z., Chen Y. [et al.]. Saturable absorption in graphene-on-waveguide devices // Appl. Phys. Express. 2019. Vol. 12. P. 032003. doi: 10.7567/1882-0786/ab02ca
- 8. Liu M., Yin X., Zhang X. Double-layer graphene optical modular // Nano Lett. 2021. Vol. 12. P. 1482–1485. doi: 10.1021/nl204202k
- Guo X., Wang W., Nan H. [et al.]. High-performance graphene photodetector using interfacial gating // Optica. 2016. Vol. 3. P. 1066–1070. doi: 10.1364/OPTICA.3.001066
- 10. Mikhailov S. A. Non-linear electromagnetic response of graphene // Europhysics Letters. 2007. Vol. 79, № 2. P. 27002. doi: 10.1209/0295-5075/79/27002
- 11. Mikhailov S. A., Ziegler K. Nonlinear electromagnetic response of graphene: frequency multiplication and self-consistent field effects // Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. Vol. 20, № 38. P. 384204. doi: 10.1088/0953-8984/20/38/384204
- 12. Ooi K. J. A., Cheng J. L., Sipe J. E. [et al.]. Ultrafast, broadband, and configurable midinfrared all-optical switching in nonlinear graphene plasmonic waveguides // APL Photonics. 2016. Vol. 1, № 4. P. 046101. doi: 10.1063/1.4948417
- 13. Li J., Tao J., Chen Z. H., Huang X. G. All-optical controlling based on nonlinear graphene plasmonic waveguides // Opt. Express. 2016. Vol. 24, № 19. P. 22169–22176. doi: 10.1364/OE.24.022169
- 14. Polianin A. D., Nazaikinskii V. E. Handbook of linear partial differential equations for engineers and scientists. 2nd ed. New York: Chapman and Hall/CRC, 2016. 1643 p.
- 15. Ervin V. J., Stephan E. P. Collocation with Chebyshev polynomials for a hypersingular integral equation on an interval // Journal of Computational and Applied Mathematics. 1992. Vol. 43, № 1. P. 221–229. doi: 10.1016/0377-0427(92)90267-2
- 16. Mikhailov S. A., Ziegler K. New electromagnetic mode in graphene // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99. P. 016803. doi: 10.1103/PhysRevLett.99.016803

# References

- 1. Novoselov K. ., Geim A.K., Morozov S.V. et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*. 2004;306:666–669. doi: 10.1126/science.1102896
- 2. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene. *Nature Materials*. 2007;6:183–191. doi: 10.1038/nmat1849
- 3. Bao Q., Zhang H., Wang Y. et al. Atomic-Layer Graphene as a Saturable Absorber for Ultrafast Pulsed Lasers. *Adv. Funct. Mater.* 2009;19:3077–3083. doi: 10.1002/adfm.200901007
- 4. Xia F., Mueller T., Lin Y. et al. Ultrafast graphene photodetector. *Nature Nanotech*. 2009;4:839–843. doi: 10.1038/nnano.2009.292
- 5. Bai Y., Xu T., Zhang X. Graphene-Based Biosensors for Detection of Biomarkers. *Micromachines*. 2020;11(1):60. doi: 10.3390/mi11010060

- 6. Bao Q., Zhang H., Wang B. et al. Broadband graphene polarizer. *Nat Photonics*. 2011;5:411–415. doi: 10.1038/nphoton.2011.102
- 7. Wang J., Liang Z., Chen Y. et al. Saturable absorption in graphene-on-waveguide devices. *Appl. Phys. Express*. 2019;12:032003. doi: 10.7567/1882-0786/ab02ca
- 8. Liu M., Yin X., Zhang X. Double-layer graphene optical modular. *Nano Lett*. 2021;12:1482–1485. doi: 10.1021/nl204202k
- Guo X., Wang W., Nan H. et al. High-performance graphene photodetector using interfacial gating. *Optica*. 2016;3:1066–1070. doi: 10.1364/OPTICA.3.001066
- 10. Mikhailov S.A. Non-linear electromagnetic response of graphene. *Europhysics Letters*. 2007;79(2):27002. doi: 10.1209/0295-5075/79/27002
- 11. Mikhailov S.A., Ziegler K. Nonlinear electromagnetic response of graphene: frequency multiplication and self-consistent field effects. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2008;20(38):384204. doi: 10.1088/0953-8984/20/38/384204
- 12. Ooi K.J.A., Cheng J.L., Sipe J.E. et al. Ultrafast, broadband, and configurable midinfrared all-optical switching in nonlinear graphene plasmonic waveguides. *APL Photonics*. 2016;1(4):046101. doi: 10.1063/1.4948417
- 13. Li J., Tao J., Chen Z.H., Huang X.G. All-optical controlling based on nonlinear graphene plasmonic waveguides. *Opt. Express.* 2016;24(19):22169–22176. doi: 10.1364/OE.24.022169
- 14. Polianin A.D., Nazaikinskii V.E. *Handbook of linear partial differential equations for engineers and scientists. 2nd ed.* New York: Chapman and Hall/CRC, 2016:1643.
- 15. Ervin V.J., Stephan E.P. Collocation with Chebyshev polynomials for a hypersingular integral equation on an interval. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 1992;43(1):221–229. doi: 10.1016/0377-0427(92)90267-2
- 16. Mikhailov S.A., Ziegler K. New electromagnetic mode in graphene. *Phys. Rev. Lett.* 2007;99:016803. doi: 10.1103/PhysRevLett.99.016803

# Информация об авторах / Information about the authors

Станислав Вячеславович Тихов

аспирант,

Пензенский государственный

университет

(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40) E-mail: tik.stanislav2015@yandex.ru Stanislav V. Tikhov

Postgraduate student, Penza State University

(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов / The author declares no conflicts of interests.

Поступила в редакцию/Received 22.10.2024 Поступила после рецензирования/Revised 20.11.2024 Принята к публикации/Accepted 17.12.2024