

辛体系下倾斜碳纳米管阵列波导研究*

张宇, 邓子辰, 赵鹏

(西北工业大学 力学与土木建筑学院, 西安 710072)

(本刊编委邓子辰来稿)

摘要: 基于平行碳纳米管阵列的等效介质模型,将碳纳米管阵列的平行波导问题导入到 Hamilton 体系.首先,应用等效介质理论,得到了倾斜碳纳米管阵列的介电特性;随后,假设波导两侧边界条件为理想导电边界条件,通过在辛几何理论框架下的研究,得到了倾斜碳纳米管介质中波导传播的色散关系.数值模拟表明:对碳纳米管阵列来说,存在一个窄的频段,电磁波基模无法传播;然而在频段外,电磁波基模传播具有极低的损耗.通过优化设计,可找到最佳倾斜角,使得全频段内的传播特性得到极大的增强.对碳纳米管阵列波导的相关研究可为太赫兹频段内的波导体器件的设计提供理论参考.

关键词: 辛几何; 太赫兹; 倾斜碳纳米管阵列; 电磁波导

中图分类号: O441.4; O29 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2016.02.002

引言

纳米科技被认为是 21 世纪最重要的科学技术之一,其中又以碳纳米材料的研究较为突出.自 1991 年发现碳纳米管以来^[1],其作为具有潜在多种用途的特殊材料得到了学术界的广泛研究.碳纳米管因其优异的电学、力学、光学和热学等性能,使它在材料、物理、化学和生物等科学领域具有广泛的应用前景.近十年来,由于金属性碳纳米材料非凡的特性(其相对于金属纳米线来说具有更好的导电性^[2]),二维周期平行碳纳米管阵列得到了纳米电子领域的广泛关注.碳纳米管相比于其他导电材料具有显著的低损耗,因此单根碳纳米管和碳纳米管组成的周期阵列在场发射器^[3-4]、生物传感器^[5]、太赫兹传感和成像^[6]、天线^[7-8]、偏光器^[9]等方面得到了大量的研究和应用.

作为特异性超材料(indefinite metamaterial)^[10]的一种,单根碳纳米管具有单轴各向异性的性质,体现为轴向介电和介磁常数与其横向不同.这种特性使得其标准化频散关系曲面具有双曲线的形状,因此碳纳米管材料也是一种双曲超材料(hyperbolic metamaterial)^[11].目前,基于单根碳纳米管模型描述碳纳米管阵列时,主要存在两种理论模型:一种模型基于 Green(格林)函数理论,考虑碳纳米管之间的电磁相互作用,利用 Pocklington(波克林顿)方程来求

* 收稿日期: 2015-09-08; 修订日期: 2015-11-30

基金项目: 国家自然科学基金(11372252); 高校博士点基金(20126102110023); 中央高校基本科研业务费专项资金(310201401JCQ01001)

作者简介: 张宇(1988—),男,博士生(E-mail: yuzhang@mail.nwpu.edu.cn);

邓子辰(1964—),男,教授,博士生导师(通讯作者, E-mail: dweifan@nwpu.edu.cn).

解电磁波的传播特性;另一种模型为连续介质等效模型.Nefedov^[12]基于 Green 函数的电磁模型,应用 Pocklington 方程,分析了周期性无限长碳纳米管阵列中电磁波的传播问题.Garsía-Vidal 等^[13]首次将碳纳米管阵列等效为一种连续介质模型,此模型基于碳纳米管阵列中 Bloch (布洛赫)波衰减因子来确定有效介电常数.利用连续介质模型,Nefedov 等^[14]研究了周期性无限长平行碳纳米管阵列,并把基于 Green 函数的电磁模型与其进行对比,得到了一些有意义的结论.Hashemi 等^[15]研究了一个边界条件为真空的倾斜超薄碳纳米管平板,得出低损耗材料在低波长时能引起对电磁波的完美波吸收.

本文将在以上研究工作的基础上,利用碳纳米管阵列的连续介质等效模型,研究电磁波在碳纳米管阵列平行波导中的传播特性.考虑等效介质模型,忽略空间色散项以及电磁电感,得到简化后碳纳米管阵列的介电函数.不同于以往的研究工作,本文考虑了与两侧边界连接的可任意角度倾斜的有限长平行碳纳米管阵列,并假定两侧边界为理想导体边界条件.

传统方法在得到电磁波导基本方程后,都是通过求解 Maxwell(麦克斯韦)方程组来得到波传播的频散关系.不同于以往研究,本文将其引入到 Hamilton 系统的辛几何形式.钟万颀^[16-17]将电磁波导的基本方程导入到 Hamilton 体系辛几何的形式.这为求解此类问题提供了很大的方便,适用于处理各种填充介质波导及复杂边界条件.孙雁等^[18-20]围绕 Hamilton 体系的电磁波导问题,应用辛有限元法和辛半解析法做了一系列有意义的工作.通过近些年的发展^[21-22],辛体系在电磁波导、力学、热力学等问题中的应用已经取得很大成功.本文运用辛几何的方法将电磁波导方程导入到 Hamilton 体系,通过求解倾斜碳纳米管阵列平行波导特征方程,分析其在低太赫兹(terahertz, 简记为 THz)频段,不同角度倾斜的碳纳米管填充的平行电磁波导的传播损耗,以及宽频带传播等特性,以期对碳纳米波导材料的设计提供理论参考.

1 碳纳米管阵列等效介质模型

假设所有碳纳米管具有金属的性质,单壁碳纳米管的轴向长度远大于直径,且碳纳米管阵列在横向是周期排列的.通常来说,碳纳米管阵列在生产和制造过程中会形成六边形晶格,然而在低密度的阵列中,碳纳米管的排列方式并不是最重要的,因此为方便起见,假定碳纳米管阵列为间距为 d 的正方形晶格.

考虑单根金属 z 字形碳纳米管,将其等效为阻抗圆柱筒模型,这样在有效边界条件下,可以得到其轴向的复电导率.对于 z 字形金属碳纳米管,在低频率(低于光跃迁频段)和小半径($m < 50$)的条件下,其表面复电导可表示为以下形式^[12,14-15,23]:

$$\sigma_z \cong -j \frac{2\sqrt{3}e^2\Gamma_0}{m\pi\hbar^2(\omega - j\nu)}, \quad (1)$$

其中, $j = \sqrt{-1}$, e 是电子电荷, $\Gamma_0 = 2.7 \text{ eV}$, $m = 3q$ 为 z 字形金属碳纳米管中的参数, q 为任意整数, \hbar 为约化 Planck(普朗克)常量. $\tau = 1/\nu$ 为弛豫时间,它的值依赖于频率^[24],本文主要研究低 THz 频段波导问题,取 $\tau = 3 \times 10^{-12} \text{ s}$.

由于单壁碳纳米管的表面只有 1 层碳原子层,故可认为式(1)是碳纳米管的表面电导率.考虑阻抗和电导率的关系,单位长度表面阻抗的表达式为

$$z_i = \frac{1}{2\pi r\sigma} = \frac{m\hbar^2\nu}{4\sqrt{3}e^2\Gamma_0 r} + j\omega \frac{m\hbar^2}{4\sqrt{3}e^2\Gamma_0 r} = R + j\omega L, \quad (2)$$

其中,对于金属碳纳米管传输线模型而言, R 为量子阻抗, L 为动态电感^[25].

通过在有效介质理论框架下考虑碳纳米管阵列的有效电磁特性,碳纳米管阵列可被认为是单轴材料,它的介电常数并矢表示为二阶张量形式:

$$\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}' = \boldsymbol{\epsilon}_r \mathbf{X}'_0 \mathbf{X}'_0 + \boldsymbol{\epsilon}_0 (\mathbf{Y}'_0 \mathbf{Y}'_0 + \mathbf{Z}'_0 \mathbf{Z}'_0), \quad (3)$$

其中, $\boldsymbol{\epsilon}_0$ 为真空介电常数, $\boldsymbol{\epsilon}_r$ 为碳纳米管轴向介电常数. 对于碳纳米管阵列, 应用非局部准定态线媒介有效介质模型可得到

$$\frac{\boldsymbol{\epsilon}_r}{\boldsymbol{\epsilon}_0} = 1 - \frac{k_p^2}{k^2 - j\xi k - k_x^2/n^2}, \quad k_p^2 = \frac{\mu_0}{d^2 L_{\text{cnt}}}, \quad (4)$$

其中, d 为碳纳米管的间距, k 为自由空间波矢, k_p 为有效等离子体波数, $n^2 = L_{\text{cnt}} C_{\text{cnt}} / (\boldsymbol{\epsilon}_0 \mu_0)$ 为空间色散强度, L_{cnt} 和 C_{cnt} 分别为碳纳米管单位长度的有效电感和电容, $\xi = (R/L_{\text{cnt}}) \sqrt{\boldsymbol{\epsilon}_0 \mu_0}$ 为与损耗相关的参数.

在低 THz 频段可忽略电磁电感 ($L_{\text{cnt}} \approx L$), 同时碳纳米管阵列中的空间色散项 k_x^2/n^2 相较于 k^2 足够小, 也可忽略. 则式(4)可以简化为

$$\frac{\boldsymbol{\epsilon}_r}{\boldsymbol{\epsilon}_0} = 1 - \frac{\mu_0}{d^2 L (k^2 - j\xi k)}. \quad (5)$$

当碳纳米管阵列在 xOy 平面内倾斜时, 通过旋转矩阵变换, 新的坐标系下的介电常数可表示为

$$\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}} = \bar{\bar{\mathbf{U}}} \bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}' \bar{\bar{\mathbf{U}}}^T, \quad (6)$$

其中, 二阶张量 $\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}'$ 见式(3), $\bar{\bar{\mathbf{U}}}$ 为旋转矩阵, 表示为

$$\bar{\bar{\mathbf{U}}} = \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

计算式(6), 可求得新坐标系下碳纳米管阵列等效介电常数矩阵为

$$\bar{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\epsilon}_r \cos^2 \phi + \boldsymbol{\epsilon}_0 \sin^2 \phi & (\boldsymbol{\epsilon}_0 - \boldsymbol{\epsilon}_r) \cos \phi \sin \phi & 0 \\ (\boldsymbol{\epsilon}_0 - \boldsymbol{\epsilon}_r) \cos \phi \sin \phi & \boldsymbol{\epsilon}_r \sin^2 \phi + \boldsymbol{\epsilon}_0 \cos^2 \phi & 0 \\ 0 & 0 & \boldsymbol{\epsilon}_0 \end{bmatrix}. \quad (7)$$

式(7)表明: 倾斜碳纳米管阵列的等效介电常数张量中的各分量是倾斜角 ϕ 的函数.

2 电磁波导的辛表述

钟万勰等人将电磁波导的研究引入到 Hamilton 体系的辛几何形式, 通过横向的电场和磁场构成了正则对偶变量, 可用于分析任意的各向异性材料以及处理不同介质的边界条件. 其提出和发展的分离变量、Hamilton 算子矩阵本征值问题、共轭辛正交归一关系等一套理论可为各种波导问题的求解提供很大方便^[16-17]. 利用辛几何方法, 在得到填充介质介电常数张量后, 就容易得到 Hamilton 算子矩阵.

基于电磁波横磁场和横电场的对偶关系, 将碳纳米管阵列波导问题引入到 Hamilton 体系, 其 Hamilton 系统本征方程为

$$\mathbf{H}\boldsymbol{\psi} = \gamma\boldsymbol{\psi}, \quad (8)$$

其中, \mathbf{H} 为 Hamilton 算子矩阵, $\boldsymbol{\psi} = [\mathbf{q}^T, \mathbf{p}^T]^T$ 为正则本征向量函数. \mathbf{H} 的表达式为^[17]

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \omega\boldsymbol{\mu}\mathbf{I} + \mathbf{D}_{\text{op}} \\ -\omega\boldsymbol{\epsilon}_r - \mathbf{B}_{\text{op}} & -\mathbf{A}^T \end{bmatrix}, \quad (9)$$

其中

$$\mathbf{D}_{\text{op}} = \frac{1}{\omega \varepsilon_z} \begin{pmatrix} \partial^2 / \partial x^2 & \partial^2 / (\partial x \partial y) \\ \partial^2 / (\partial x \partial y) & \partial^2 / \partial y^2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_{\text{op}} = \frac{1}{\omega \mu} \begin{pmatrix} \partial^2 / \partial y^2 & -\partial^2 / (\partial x \partial y) \\ -\partial^2 / (\partial x \partial y) & \partial^2 / \partial x^2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{A} = - \begin{pmatrix} \partial / \partial x \\ \partial / \partial y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{zt} \\ \varepsilon_z \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_{\text{tr}} = \varepsilon_t - \varepsilon_{zt} \varepsilon_z^{-1} \varepsilon_{zt}^T,$$

$$\varepsilon_t = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_y \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_{zt} = (\varepsilon_{xz} \quad \varepsilon_{yz}).$$

考虑倾斜碳纳米管阵列,介电常数矩阵如式(7)所示.将式(7)代入到式(9),通过计算,则可给出 Hamilton 算子矩阵.

碳纳米管阵列填充的平行波导模型如图 1 所示,倾斜碳纳米管以等间距 d 构成二维正方形晶格,所有碳纳米管具有相同的管径,管间为真空介质,轴向朝向 x' 轴,横向对应 z 和 y' 轴.倾斜阵列所组成的薄膜上下表面分别被平行于 z 轴的理想导体所覆盖,也就是说波导边界为理想导体边界条件.在 y 和 z 方向,平行波导足够大, x 方向上下平板间距为 $h = 2a$.碳纳米管阵列可在 xOy 平面内任意角度倾斜.

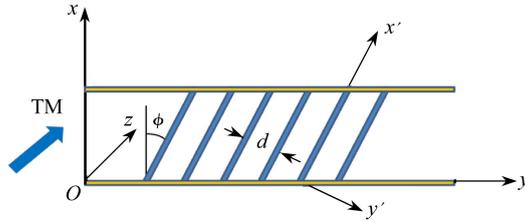


图 1 碳纳米管阵列填充的平行波导模型

Fig. 1 The planar waveguide model filled with carbon nanotube arrays

假定入射波为 TM 波,即入射波的电场矢量 \mathbf{E} 与入射面平行,磁场矢量 \mathbf{H} 与入射面垂直.在 TM 波入射情况下,电场在 y 方向的分量为 0,磁场在 x, z 方向的分量为 0,即在本征向量函数 $\boldsymbol{\psi} = [\mathbf{q}^T, \mathbf{p}^T]^T$ 中, q_2 和 p_2 的值为 0,则本征方程(8)可简化为

$$\begin{bmatrix} -\frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_z} \frac{\partial}{\partial x} & \omega \mu_0 + \frac{1}{\omega \varepsilon_z} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ -\omega \varepsilon_x + \omega \frac{\varepsilon_{xz}^2}{\varepsilon_z} & -\frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_z} \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ p_1 \end{bmatrix} = \gamma \begin{bmatrix} q_1 \\ p_1 \end{bmatrix}. \quad (10)$$

如果本征方程(10)有非零解,则要求其系数矩阵的行列式为 0,即

$$\begin{vmatrix} -\frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_z} \lambda - \gamma & \omega \mu_0 + \frac{1}{\omega \varepsilon_z} \lambda^2 \\ -\omega \varepsilon_x + \omega \frac{\varepsilon_{xz}^2}{\varepsilon_z} & -\frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_z} \lambda - \gamma \end{vmatrix} = 0. \quad (11)$$

展开并化简该行列式,得

$$\gamma^2 + \frac{2\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_z} \lambda \gamma + \frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_z} \lambda^2 - \omega^2 \mu_0 \frac{\varepsilon_{xz}^2}{\varepsilon_z} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon_x = 0. \quad (12)$$

由式(12)进而可求得

$$\gamma = -\frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_z} \lambda \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_z} \lambda\right)^2 - \left(\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_z} \lambda^2 - \omega^2 \mu_0 \frac{\varepsilon_{xz}^2}{\varepsilon_z} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon_x\right)}. \quad (13)$$

由于在 $x = \pm a$ 处为理想导体边界, 则 $e_z = 0$. 这给出了辛本征值问题的方程, 其本征值为 $\lambda = j(n\pi/(2a))$, $n = 1, 2, 3, \dots$. 利用关系 $k/\omega = \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}$, 由式(13)可得

$$\gamma = -j \frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_z} \left(\frac{n\pi}{2a}\right) \pm \sqrt{-\frac{\varepsilon_{xz}^2}{\varepsilon_z^2} \left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 + \frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_z} \left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 + \frac{k^2}{\varepsilon_0} \frac{\varepsilon_{xz}^2}{\varepsilon_z} - \frac{k^2}{\varepsilon_0} \varepsilon_x}. \quad (14)$$

考虑 $\gamma = jk_z$, 由式(14)可得

$$k_z = -\frac{\varepsilon_{xz}}{\varepsilon_z} \left(\frac{n\pi}{2a}\right) \mp \sqrt{\frac{\varepsilon_{xz}^2}{\varepsilon_z^2} \left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 - \frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_z} \left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 - \frac{k^2}{\varepsilon_0} \frac{\varepsilon_{xz}^2}{\varepsilon_z} + \frac{k^2}{\varepsilon_0} \varepsilon_x}, \quad (15)$$

k_z 为 TM 波沿平行波导传播波数, 其值反映着传播特性. 不同于各向同性介质材料, 碳纳米管阵列填充的平行波导色散关系中 $\varepsilon_x/\varepsilon_0$ 项不为 1, 该项为与频率相关的复值 ($\varepsilon_x/\varepsilon_0$ 的虚部与损耗相关), 使其相比于其他材料具有独特的性质.

将式(7)代入式(15), 可得

$$k_z = \pm \sqrt{\left(k^2 - \left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2\right) \frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_0}}, \quad (16)$$

其中, $\varepsilon_x = \varepsilon_r \cos^2 \phi + \varepsilon_0 \sin^2 \phi$. 本文将围绕式(16)研究波导随碳纳米管阵列倾角变化时的传播特性, 以期对新型微纳米材料的设计和制造提供一定的理论参考.

3 碳纳米管阵列平行导波的数值分析

本节将用具体数值算例分析碳纳米管阵列波导的频散特性. 碳纳米管阵列的材料和几何参数选取为: 金属碳纳米管的半径为 $r \approx 1.53 \text{ nm}$ ($q = 13$), 管间距取为 $d = 15 \text{ nm}$, x 方向的宽度为 $2a = 3 \text{ }\mu\text{m}$.

从式(5)和式(7)可看出, 碳纳米管轴向相对介电常数是和频率有关的复数, 在考虑倾斜角后, 其 x 方向的相对介电常数 $\varepsilon_x/\varepsilon_0$ 将同时与频率和倾斜角有关. 图 2 给出了不同倾斜角时碳纳米管阵列 x 方向相对介电常数和频率的关系. 由图可知, 在较低频段, 轴向相对介电常数的实部和虚部均小于 0, 且实部绝对值远大于虚部 (此时碳纳米管阵列具有双曲超材料的特性^[26]). 随着频率的增大, 实部和虚部迅速趋近于 0, 在高频段相交后, 实部逐渐增大趋近于 1 而虚部保持在 0 附近, 此现象说明在高频时, 碳纳米管阵列传播特性与各向同性介质类似. 随着倾斜角的增大, 相对介电常数实部曲线的斜率逐渐增大, 和虚部的交点频率值逐渐降低, 并更快地趋近于 1. 当倾斜角达到 90° 时, 碳纳米管与 x 方向垂直, 此时 x 方向即为碳纳米管阵列的横向, 表现为真空各向同性的特性. 由图 2(d) 可知, 相对介电常数实部恒定为 1, 虚部恒定为 0, 与实际情况吻合, 这也印证了数值结果的可靠性.

图 3 给出了碳纳米管阵列垂直排列和倾斜角为 45° 时, 标准化传播波数与频率在 $0 \sim 80 \text{ THz}$ 范围内的关系, 图中曲线为色散关系曲线实部. 从图 3 (蓝色、黑色、红色线分别表示模式 $n = 1, 2, 3$) 可知, 3 种模式 $n = 1, 2, 3$ 的色散关系, 在低频时, 随着模式 n 的增大, 色散曲线具有更大的波数, 传播特性更强. 3 种传播模式在不同倾斜角时都存在一个传播波数为 0 的频率段, 即在此频率段内电磁波不能传播. 由图 3(a)、(b) 可以看出, 倾斜角为 45° 时的禁带频率区要低于垂直排列的情况. 在较高频率段时, 相对介电常数逐渐趋近于 1, 使得色散关系为一条直线, 这也说明在较高频率时, 传播特性与各向同性介质类似.

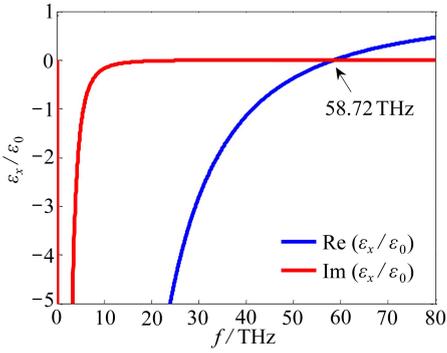
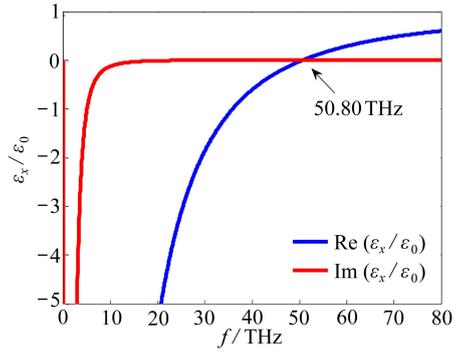
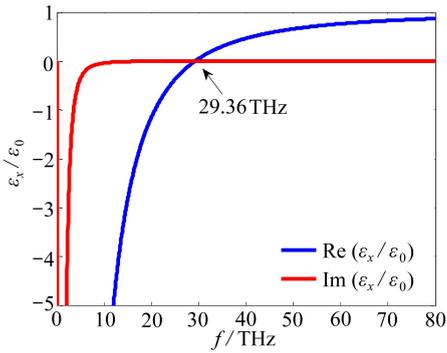
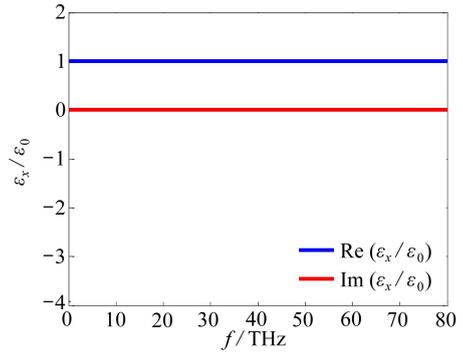
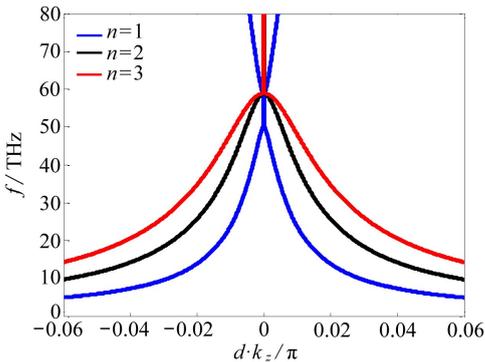
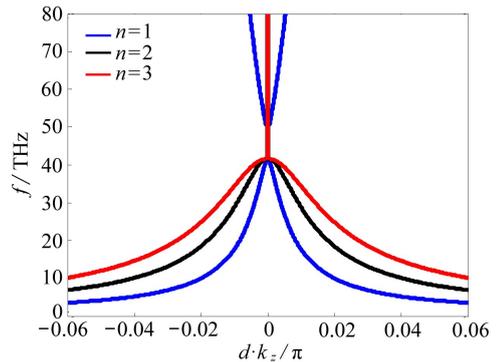
(a) $\phi = 0^\circ$ (b) $\phi = 30^\circ$ (c) $\phi = 60^\circ$ (d) $\phi = 90^\circ$ 图 2 不同倾斜角时碳纳米管阵列 x 方向相对介电常数 $\varepsilon_x/\varepsilon_0$ 和频率的关系Fig. 2 The relationship between the frequency and the relative dielectric constant $\varepsilon_x/\varepsilon_0$ of the carbon nanotube arrays in the x direction with different tilt angles(a) $\phi = 0^\circ$ (b) $\phi = 45^\circ$

图 3 标准化的传播波数与频率的关系

Fig. 3 The relationship between the frequency and the normalized wavenumber

考虑基模为 $n = 1$ 时做具体分析,图 4 给出了倾角为 45° 时,频率与标准化传播波数的关系,图中红线代表实部,蓝线表示虚部,由图 4 可以看出,虚部随着频率的增大,在低 THz 频段时迅速趋于 0;而实部随着频率的增大,出现先减小,逐渐趋近于 0,而后又线性增大的过程.在 $41.52 \sim 49.97$ THz 频率范围内,实部趋近于 0,而虚部不为 0,此时传播波数虚部/实部的值将变得很大.如图 4(b) 所示,虚部/实部的比值在大部分频率段内趋近于 0,显示出极其低的损耗,

可当做无损介质来处理;而在 41.52~49.97 THz 频率段,虚部/实部的比值变得很大,这说明此频率范围内波导中的电磁波不能传播,电磁波能很好地被波导吸收.相比于传统金属纳米线等材料,碳纳米管阵列在一个相对较宽的频段内,具有相当好的传播特性,因此碳纳米管阵列波导可在 THz 频段内作为波传导器件.

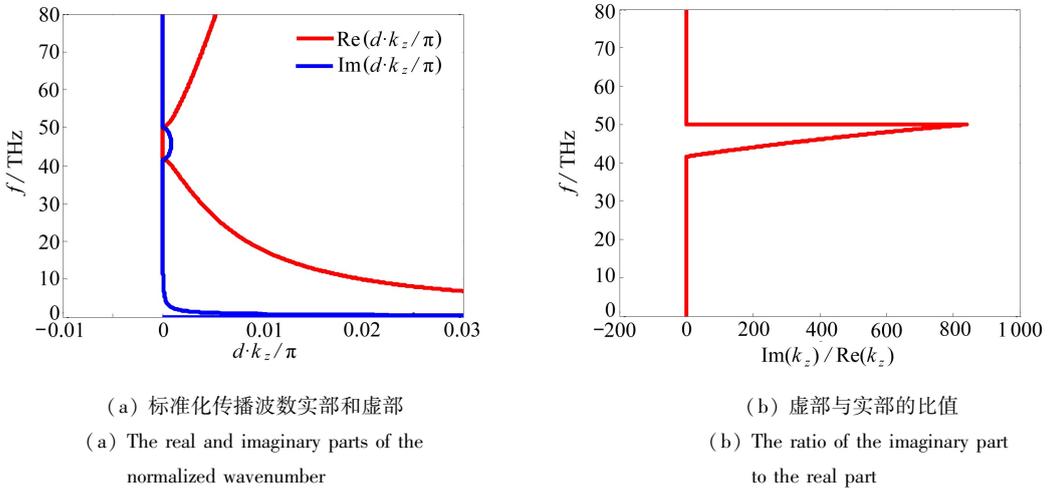


图 4 倾斜角为 45° 时频率与标准化传播波数的关系

Fig. 4 The relationship between the frequency and the normalized wavenumber with a tilt angle of 45°

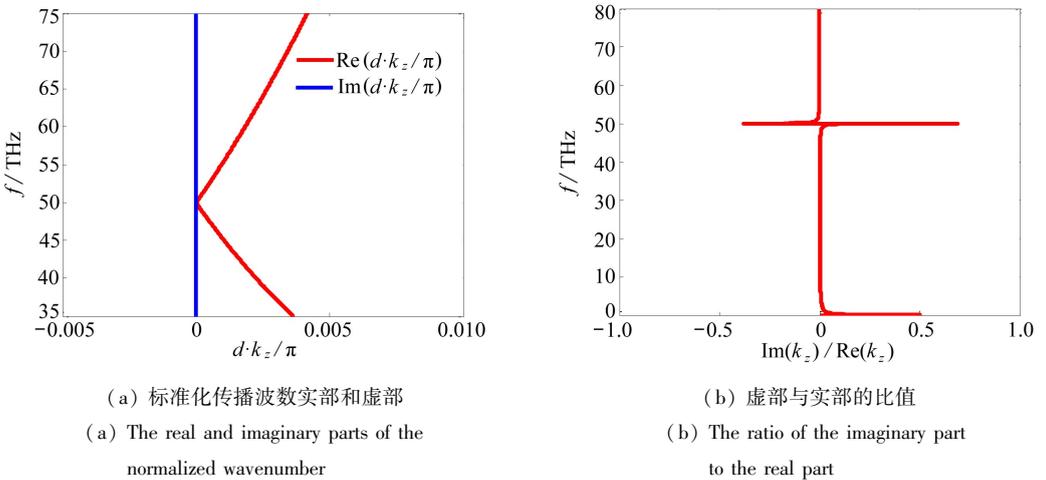


图 5 倾斜角为 31.717° 时频率与标准化传播波数的关系

Fig. 5 The relationship between the frequency and the normalized wavenumber with a tilt angle of 31.717°

进一步对碳纳米管阵列的传播特性做具体的量化分析,由式(16)可以看出,当频率等于 49.97 THz 时, $k^2 - (n\pi/(2a))^2 = 0$; 频率大于 49.97 THz 时, $k^2 - (n\pi/(2a))^2 > 0$; 频率小于 49.97 THz 时, $k^2 - (n\pi/(2a))^2 < 0$. ϵ_x/ϵ_0 的值为复数,在图 2 中已给出定量分析,其虚部在高于 15THz 时,逐渐趋于 0;实部在不同倾斜角的情况下,经历从负数到 0,再到趋于 1 的一个变化过程.考虑高于 15 THz 的范围(即 ϵ_x/ϵ_0 虚部趋于 0),当实部小于 0 时, ϵ_x/ϵ_0 近似为一负实数;而当实部大于 0 时, ϵ_x/ϵ_0 近似为一正实数.由 $k^2 - (n\pi/(2a))^2$ 和 ϵ_x/ϵ_0 的关系可以看出,在 ϵ_x/ϵ_0 实部趋于 0 的频率和 49.97 THz(即 $k^2 - (n\pi/(2a))^2 = 0$) 的频率区间内,传播波数实部趋近于 0,虚部不为 0,表现为虚部/实部的值很大,即为波导中电磁波传播的禁带,如图 4 中

的 41.52~49.97 THz 区间。

由以上分析启发,进而考虑最佳的倾斜角,即让 $\varepsilon_x/\varepsilon_0$ 中实部为 0 时的频率值趋近于 49.97 THz,以最大程度的减小禁带范围.经计算得,最佳倾斜角为 $\pm 31.717^\circ$,图 5 给出了倾斜角为 31.717° 时频率与标准化传播波数的关系.由图 5(a) 可以看出,虚部始终趋于 0,而实部仅在 49.97 THz 附近趋于 0.从图 5(b) 可以看到,当倾斜角为 31.717° 时,整个频率范围内虚部/实部的比值都很小,仅在 0 附近和 49.97 THz 附近出现了小频段的波动,且其比值的最大绝对值也小于 0.8.在 0 附近出现小波动是由于 $\varepsilon_x/\varepsilon_0$ 在低频时其虚部不为 0,参考图 2;在 49.97 THz 附近的波动主要因为当波数实部趋于 0 时,其与波数虚部的量级接近导致小范围波动.对比图 4,电磁波导的传播特性得到了非常明显的增强。

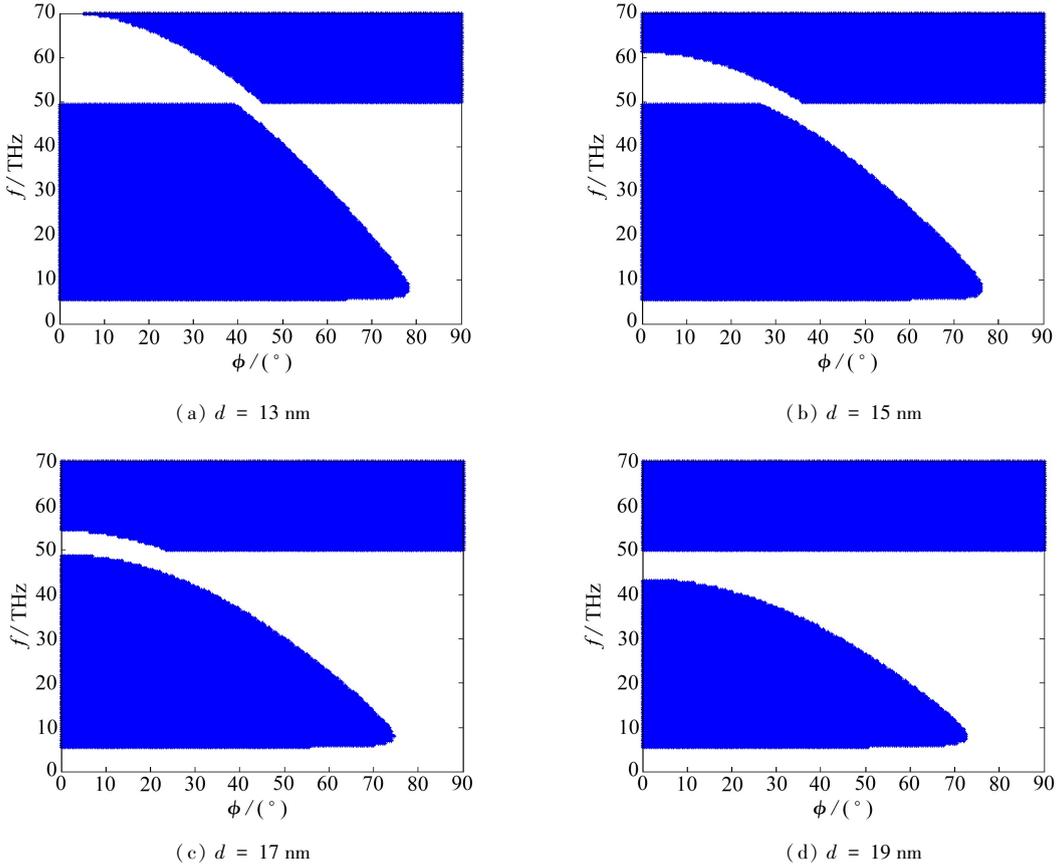


图 6 不同碳纳米管间距时传播波数虚部/实部小于 0.005 时的区域

Fig. 6 The region of the ratios of the imaginary part to the real part less than 0.005 with different nanotube spacings

当传播波数虚部和实部的比值较小时,碳纳米管填充的平行波导将具有比较低的损耗.为考察不同参数时碳纳米管阵列电磁波导的传播特性,与以上碳纳米管间距取定的情况不同,图 6 给出了在不同碳纳米管间距时,传播波数虚部/实部的值小于 0.005 时随频率和角度变化的区域.由于 $-90^\circ \sim 0^\circ$ 的图像是与 $0^\circ \sim 90^\circ$ 的图像关于 $\phi = 0^\circ$ 对称的,所以此处只给出了 $0^\circ \sim 90^\circ$ 的结果.从图中可以看出,在 0 附近,不同的图中都存在空隙,这是由于在 0 附近 $\varepsilon_x/\varepsilon_0$ 的虚部不为 0,波数虚部/实部的值虽然很小,但大于 0.005,参见图 5(b).从图 6 中可以看出:频率为 49.97 THz 是一个关键频率,正如上文中所分析的,其为传播通带和禁带的一个分界频率值;随着碳纳米管间距的增大,高频 ($f > 49.97$ THz) 的传播性能逐渐变强,而低频 ($f < 49.97$ THz)

的传播性能逐渐变弱;在碳纳米管间距相同时,随着倾斜角的增大,传播性能先增强,到达最佳倾角后(如 $d = 15 \text{ nm}$ 时, $\phi = \pm 31.717^\circ$) 又逐渐减弱;当碳纳米管间距大到一定程度时(即 $\phi = 0^\circ$ 时, $\varepsilon_x/\varepsilon_0$ 实部为 0 的频率值小于 49.97 THz),传播性能随着倾斜角的增大变得越来越弱,综上所述,选取适当的管间距和角度,可以显著改变波导的传播性能。

4 结 论

本文研究了有限长倾斜碳纳米管阵列填充的平行波导的传播特性.假定碳纳米管薄板模型上下两面均为理想导体边界条件,将问题转化为一个平行波导问题.通过利用等效介质理论,得到了倾斜碳纳米管阵列的等效介电特性.在求解电磁波在倾斜碳纳米管阵列中的传播特性时,将电磁波导入到 Hamilton 体系辛几何的形式.通过求解本征值方程,得到了波传播色散特性.给定相应的参数,采用数值模拟的方法得到了电磁波导的传播特性并得出以下结论:

1) 在低 THz 频段(本文研究 80 THz 以下),碳纳米管阵列波数与频率的色散关系表现为明显的双曲特性,随着传播模式 n 的增大,色散曲线具有更大的波数,传播特性更好。

2) 在碳纳米管阵列管间距取 $d = 15 \text{ nm}$ 时,存在最佳阵列倾角为 $\pm 31.717^\circ$,使得在全频率段内的传播特性得到了极大的加强。

3) 碳纳米管间距不变时,随着阵列倾角的增大,传播性能先增强,到达最佳倾角后(如 $d = 15 \text{ nm}$ 时, $\phi = \pm 31.717^\circ$) 又逐渐减弱;当碳纳米管间距大到一定程度,即 $\phi = 0^\circ$ 时 $\varepsilon_x/\varepsilon_0$ 实部为 0 的频率值小于 49.97 THz ,传播性能随着倾角的增大而变得越来越弱。

4) 随着碳纳米管间距的增大,在频率大于 49.97 THz 时,传播性能逐渐变强,而在频率小于 49.97 THz 时,传播性能逐渐减弱。

太赫兹技术是一个非常重要的交叉前沿领域,给技术创新、国民经济发展和国家安全提供了一个非常诱人的机遇.倾斜碳纳米管阵列在一个相对较宽的频段内,具有相当好的传播特性,因此碳纳米管阵列波导可在 THz 频段内作为波传导器件.本文的研究给出了碳纳米管阵列波导传播的内在机理,同时对新型微纳米材料的设计和制造具有一定的指导意义。

致谢 作者感谢西北工业大学研究生创新创业种子基金(Z2015083)对本文的资助。

参考文献(References):

- [1] Lijima S. Helical microtubules of graphitic carbon[J]. *Nature*, 1991, **354**(6348): 56-58.
- [2] Hanson G V. Fundamental transmitting properties of carbon nanotube antennas[J]. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2005, **53**(11): 3426-3435.
- [3] Fan S S, Chapline M G, Franklin N R, Tomblor T W, Cassell A M, Dai H J. Self-oriented regular arrays of carbon nanotubes and their field emission properties[J]. *Science*, 1999, **283**(5401): 512-514.
- [4] 雷达, 孟根其格, 张荷亮, 智颖飙. 一种平行栅碳纳米管阵列阴极的场发射特性研究[J]. *物理学报*, 2013, **62**(24): 248502-1-248502-7. (LEI Da, MENGGEN Qi-qi-ge, ZHANG He-liang, ZHI Ying-biao. Field emission properties from a carbon nanotube array with parallel grid[J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, **62**(24): 248502-1-248502-7. (in Chinese))
- [5] LIN Yue-he, LU Fang, TU Yi, REN Zhi-feng. Glucose biosensors based on carbon nanotube nanoelectrode ensembles[J]. *Nano Letters*, 2004, **4**(2): 191-195.
- [6] Fu K, Zannoni R, Chan C, Adams S H, Nicholson J, Polizzi E, Yngvesson K S. Terahertz detection in single wall carbon nanotubes[J]. *Applied Physical Letters*, 2008, **92**(3): 033105.

- [7] Wang Y, Kempa K, Kimball B, Carlson J B, Benham G, Li W Z, Kempa T, Rybczynski J, Herczynski A, Ren Z F. Receiving and transmitting light-like radio waves: antenna effect in arrays of aligned carbon nanotubes[J]. *Applied Physical Letters*, 2004, **85**(13): 2607-2609.
- [8] Dresselhaus M S. Applied physics: nanotube antennas[J]. *Nature*, 2004, **432**(7020): 959-960.
- [9] Ren L, Pint C L, Booshehri L G, Rice W D, Wang X F, Hilton D J, Takeya K, Kawayama I, Tonouchi M, Hauge R H, Kono J. Carbon nanotube terahertz polarizer[J]. *Nano Letters*, 2009, **9**(7): 2610-2613.
- [10] Smith D R, Schurig D. Electromagnetic wave propagation in media with indefinite permittivity and permeability tensors[J]. *Physical Review Letters*, 2003, **90**(7): 077405.
- [11] Poddubny A, Iorsh I, Belov P, Kivshar Y. Hyperbolic metamaterials[J]. *Nature Photonics*, 2013, **7**(12): 948-957.
- [12] Nefedov I S. Electromagnetic waves propagating in a periodic array of parallel metallic carbon nanotubes[J]. *Physical Review B*, 2010, **82**(15): 155423.
- [13] García-Vidal F J, Pitarke J M, Pendry J B. Effective medium theory of the optical properties of aligned carbon nanotubes[J]. *Physical Review Letters*, 1997, **78**(22): 4289-4292.
- [14] Nefedov I S, Tretyakov S A. Ultra broadband electromagnetically indefinite medium formed by aligned carbon nanotubes[J]. *Physical Review B*, 2011, **84**(11): 113410.
- [15] Hashemi S M, Nefedov I S. Wideband perfect absorption in arrays of tilted carbon nanotubes [J]. *Physical Review B*, 2012, **86**(19): 195411.
- [16] 钟万勰. 电磁波导的辛体系[J]. 大连理工大学学报, 2001, **41**(4): 379-387. (ZHONG Wan-xie. Symplectic system of electro-magnetic waveguide[J]. *Journal of Dalian University of Technology*, 2001, **41**(4): 379-387. (in Chinese))
- [17] 钟万勰. 变截面电磁波导的辛分析[J]. 力学季刊, 2001, **22**(3): 273-280. (ZHONG Wan-xie. Symplectic analysis for electro-magnetic wave guide with varied cross sections[J]. *Chinese Quarterly of Mechanics*, 2001, **22**(3): 273-280. (in Chinese))
- [18] 孙雁, 谢军. 基于 Hamilton 体系的辛半解析法在各向异性电磁波导中的应用[J]. 计算力学学报, 2005, **22**(6): 690-693. (SUN Yan, XIE Jun. Hamiltonian symplectic semi-analytical method and its application in anisotropic electromagnetic waveguide[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2005, **22**(6): 690-693. (in Chinese))
- [19] 孙雁, 钟万勰. 电磁波导的通过谱计算[J]. 计算力学学报, 2006, **23**(6): 663-667. (SUN Yan, ZHONG Wan-xie. Symplectic theory of electro-magnetic wave-guide[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2006, **23**(6): 663-667. (in Chinese))
- [20] 孙雁, 钟万勰. 电磁共振腔的节点有限元法[J]. 动力学与控制学报, 2011, **9**(1): 1-6. (SUN Yan, ZHONG Wan-xie. Node finite element method for electro-magnetic resonant cavity[J]. *Journal of Dynamics and Control*, 2011, **9**(1): 1-6. (in Chinese))
- [21] 陈杰夫, 郑长良, 钟万勰. 电磁波导的辛分析与对偶棱边元[J]. 物理学报, 2006, **55**(5): 2340-2346. (CHEN Jie-fu, ZHENG Chang-liang, ZHONG Wan-xie. Symplectic analysis and dual edge element for electromagnetic waveguide[J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, **55**(5): 2340-2346. (in Chinese))
- [22] 杨红卫, 钟万勰, 侯碧辉. 力学、热力学及电磁波导中的正则变换和辛描述[J]. 物理学报, 2010, **59**(7): 4437-4441. (YANG Hong-wei, ZHONG Wan-xie, HOU Bi-hui. The canonical transformation and symplectic description in mechanics, thermodynamics and electromagnetic waveguide[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, **59**(7): 4437-4441. (in Chinese))

- [23] Nefedov I S, Tretyakov S A. Effective medium model for two-dimensional periodic arrays of carbon nanotubes[J]. *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, 2011, **9**(4): 374-380.
- [24] Jishi R A, Dresselhaus M S, Dresselhaus G. Electron-phonon coupling and the electrical conductivity of fullerene nanotubules[J]. *Physical Review B*, 1993, **48**(15): 11385-11389.
- [25] Burke P J. Luttinger liquid theory as a model of the gigahertz electrical properties of carbon nanotubes[J]. *IEEE Transactions on Nanotechnology*, 2002, **1**(3): 129-144.
- [26] Nefedov I S, Valagiannopoulos C A, Hashemi S M, Nefedov E I. Total absorption in asymmetric hyperbolic media[J]. *Scientific Reports*, 2013, **3**: 2662. doi: 10.1038/srep02662.

Study of THz Wave Propagation in Tilted Carbon Nanotube Arrays Based on Symplectic Formulation

ZHANG Yu, DENG Zi-chen, ZHAO Peng

(School of Mechanics and Civil. & Architecture, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P.R.China)

(Contributed by DENG Zi-chen, M. AMM Editorial Board)

Abstract: With the equivalent medium model, the problem of planar waveguides filled with periodic parallel finite-length carbon nanotube arrays was introduced into the Hamilton system. Firstly, based on the equivalent medium theory, the dielectric property of the tilted carbon nanotubes was derived. Then, in view of the ideal conductive boundary conditions, the symplectic formulation was used to solve the eigenvalue problem of electromagnetic wave propagation and the dispersion relation was obtained. The numerical results show that, the dominant mode of the electromagnetic waves can hardly propagate in the carbon nanotube arrays in a narrow frequency band, while in the rest frequency bands it propagates well with very low loss, which means the carbon nanotube arrays have excellent transmission characteristics compared with the traditional materials. Through the optimization design, the best tilt angle was given to greatly enhance the transmission characteristics in the whole frequency range. The present research of THz wave propagation in carbon nanotube arrays makes a theoretical reference for the design of waveguide devices in the THz frequency bands.

Key words: symplectic geometry; terahertz; tilted carbon nanotube array; electromagnetic waveguide

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China(11372252)

引用本文/Cite this paper:

张宇, 邓子辰, 赵鹏. 辛体系下倾斜碳纳米管阵列波导研究[J]. *应用数学和力学*, 2016, **37**(2): 127-137.

ZHANG Yu, DENG Zi-chen, ZHAO Peng. Study of THz wave propagation in tilted carbon nanotube arrays based on symplectic formulation[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2016, **37**(2): 127-137.