# 基于渐变宽度石墨烯纳米带阵列的太赫兹宽带 滤波器

#### 张鸿博

上海理工大学光电信息与计算机工程学院,上海

收稿日期: 2025年4月3日; 录用日期: 2025年5月19日; 发布日期: 2025年5月27日

## 摘要

本研究探讨了一种利用梯度化的石墨烯纳米带阵列所构建的太赫兹滤波装置。通过COMSOL Multiphysics® 6.1全波仿真平台,建立了双层异质结构模型:顶层由宽度渐变(0.5~0.7 μm)的石墨烯纳米带阵列 组成,而底部采用SiO2介质层支撑。研究揭示,纳米带宽度梯度变化可诱导等离激元共振频率产生0.77 THz的偏移,通过阵列协同效应形成1.18 THz的宽带吸收。仿真结果表明,该组件比起均匀光栅带宽拓 展了90%。这一发现不仅展示了梯度化石墨烯纳米带阵列在太赫兹滤波领域的卓越性能,也为未来太赫 兹技术的发展提供了新的可能性。我们期待这项研究能够为相关领域的应用带来实质性的突破,推动太 赫兹技术的进一步发展和普及。

## 关键词

石墨烯纳米带,太赫兹滤波器,等离激元

# Terahertz Broadband Filter Based on Gradient Width Graphene Nanoribbon Arrays

#### **Hongbo Zhang**

School of Optical-Electrical and Computer Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Apr. 3rd, 2025; accepted: May 19th, 2025; published: May 27th, 2025

#### Abstract

In this study, a terahertz filter device based on a gradient graphene nanoribbon array was devel-

**文章引用:** 张鸿博. 基于渐变宽度石墨烯纳米带阵列的太赫兹宽带滤波器[J]. 物理化学进展, 2025, 14(2): 335-342. DOI: 10.12677/japc.2025.142031

oped. Using the COMSOL Multiphysics® 6.1 full-wave simulation platform, a two-layer heterostructure model was constructed: the top layer consisted of a graphene nanoribbon array with a gradient width (0.5~0.7  $\mu$ m), while the bottom layer was supported by a SiO<sub>2</sub> dielectric layer. It is revealed that the change of nanoribbon width gradient can induce a shift of 0.77 THz in the resonant frequency of plasmon, and a wide band passband of 1.18 THz is formed through the array synergy effect. Simulation results show that the bandwidth of this component is 90% larger than that of uniform grating. This discovery not only demonstrates the excellent performance of gradient fossil ink nanoribbon arrays in the field of terahertz filtering, but also provides new possibilities for the development of terahertz technology in the future. We expect that this research will bring substantial breakthroughs in the application of related fields and promote the further development and popularization of terahertz technology.

## **Keywords**

Graphene Nanoribbons, Terahertz Filter, Plasmon

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc. This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0). <u>http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/</u>

CC O Open Access

# 1. 引言

太赫兹(Terahertz, THz)频段指的是频率范围在 0.1 到 10 THz 之间的电磁波,对应的波长范围是 3 mm 至 30 µm。太赫兹波位于微波和红外之间,处于电子学和光子学之间的过渡阶段[1][2],其器件性能的突破将深刻改变 6G 通信[3]、生物医学成像[4]及安检检测[5]等领域的技术格局。相较于微波与光波,太赫兹波(0.1~10 THz)兼具毫米级穿透深度与千兆赫兹级带宽的独特优势,被视为实现第六代移动通信(6G)超高速率传输的核心频段[1][6]。然而,当前太赫兹系统发展面临关键瓶颈:其功能器件面临带宽窄与动态调谐难以兼容的挑战。

传统石墨烯超材料虽然可以通过栅压调控费米能级(0~0.6 eV) [7],进而动态调制表面等离激元共振频率,为太赫兹吸波体、滤波器等器件提供电控重构能力[8]。然而,现有的均匀纳米带阵列设计由于单一的等离激元模式,工作带宽受到限制。而利用几何梯度变化引起不同频域融合的物理机制为太赫兹器件的宽带化提供了新的思路。尽管近期的研究尝试通过多层异质结构来拓展带宽,但工艺复杂性仍然是一个挑战[9] [10]。

本研究提出梯度化石墨烯纳米带阵列的创新架构,通过空间维度构建连续等离激元共振频域。具体 而言,将纳米带宽度从 0.5 µm 线性渐变至 0.7 µm,利用几何梯度增加带宽,在 3.82~5 THz 范围内实现本 征带宽扩展(Δ*f*=1.18 THz, Q=3.75, Δ*f* 是梯度化石墨烯纳米带阵列吸收率的半峰宽)。通过 COMSOL 仿 真表明,该设计通过梯度耦合效应使通带宽度较均匀结构提升 90%,同时维持动态调谐能力。这一突破 不仅为太赫兹滤波器设计提供了新范式,更为 6G 通信的多频段融合、生物传感器的多参数同步检测等 场景奠定器件基础。

# 2. 结构设计

本器件采用双层结构设计(图 1): 上层为梯度化石墨烯纳米带阵列(宽度梯度: 0.5 µm→0.7 µm, d=10 µm); 下方介质层为低损耗二氧化硅(SiO<sub>2</sub>,相对介电常数 ε = 3.9),用于支撑纳米带结构。该梯度设计通过相邻纳米带单元的等离激元共振[11]频率连续偏移,在 1.18 THz 范围内形成宽频响应覆盖。数值仿真

表明,当纳米带宽度从 0.5 μm 增至 0.7 μm 时,其局域表面等离激元共振频率可产生约 0.77 THz 的线性 频移,通过阵列协同效应实现目标频段的全覆盖。



**Figure 1.** Upper layer: Gradient width graphene nanoribbon array ( $W_1 = 0.7 \mu m$ ,  $W_2 = 0.58 \mu m$ ,  $W_3 = 0.5 \mu m$ ,  $d = 10 \mu m$ ); Intermediate layer: SiO<sub>2</sub> dielectric layer ( $h = 10 \mu m$ ,  $\varepsilon = 3.9$ ) 图 1. 上层: 梯度化石墨烯纳米带阵列( $W_1 = 0.7 \mu m$ ,  $W_2 = 0.58 \mu m$ ,  $W_3 = 0.5 \mu m$ ,  $d = 10 \mu m$ ); 中间层: SiO<sub>2</sub>介质层( $h = 10 \mu m$ ,  $\varepsilon = 3.9$ )

# 3. 数值仿真与结果分析

#### 3.1. 仿真模型构建

本研究基于 COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> 6.1 全波仿真平台,构建了梯度化石墨烯纳米带阵列的太赫兹滤 波装置模型,具体建模流程及关键参数设置如下:

模型采用双层异质结构(图 2),顶层:由周期性排列的梯度化石墨烯纳米带阵列组成,单周期内纳米带宽度从 0.5  $\mu$ m 增至 0.7  $\mu$ m,间距固定为 10  $\mu$ m。通过参数化扫描优化梯度变化率,以实现等离激元共振频率的协同调控。底层:采用 SiO<sub>2</sub> 介质层(介电常数  $\varepsilon$  = 3.9),作为支撑基底并减少电磁波反射损耗。



Figure 2. Comsol geometric model 图 2. Comsol 几何模型

针对石墨烯纳米条的电导率进行研究。我们运用了量子输运理论和非平衡格林函数(NEGF)方法,这种方法常用于描述在外电场或光场影响下电子的输运行为,特别是在纳米尺度和低维材料(例如石墨烯)中表现得尤为准确。首先,我们聚焦于同一能带内的电子输运。在石墨烯中,电子的行为可以通过 Dirac 方程进行描述[12][13],尤其是在低能范围(接近费米面)时更为贴切。在太赫兹频率下,电子在同一能带内的运动主要可以用以下公式来表示:

$$\sigma_{\text{intra}} = \frac{0.5it_1}{(\Omega + i\gamma)\pi} \log \left( 2\cosh\left(\frac{1}{2t_1}\right) \right)$$
(1)

$$t_1 = \frac{Tk_B}{\mu} \tag{2}$$

是温度和化学势的比值,用来表示温度对电导率的影响。

$$\Omega = \frac{2\pi c\bar{h}}{\mu\lambda} \tag{3}$$

是归一化频率,涉及到光速 c、普朗克常数  $\overline{h}$ 、化学势  $\mu$  和波长  $\lambda$ 。 $\gamma$  是弛豫时间的倒数,表示电子与晶格的相互作用。

跨带贡献通常出现在较高的频率下,尤其是涉及到电子从一个能带跃迁到另一个能带。在太赫兹频 率下,电子可能由于外部电场的激发,从低能带跃迁到高能带。

$$\sigma_{\text{inter}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\Omega - 2}{2t_1}\right) - \frac{i}{2\pi} \log\left(\frac{(2 + \Omega)^2}{(2 - \Omega)^2 + 4t_1^2}\right)$$
(4)

Arctan 和对数项的引入,反映了电子跃迁的相位和能量交换。对于跨带跃迁,电子的动能不仅依赖 于费米面附近的态密度,还与频率和温度的依赖关系相关。在低温和低频条件下,跨带跃迁的贡献较小, 但是在高温或高频条件下,它们变得非常重要。

最终,石墨烯的总电导率是同带和跨带贡献的总和:

$$\sigma = \sigma_{\text{inter}} + \sigma_{\text{intra}} \tag{5}$$

这种组合反映了电子在同一能带内和不同能带之间的运动对电导率的综合影响。电导率的实部通常 与电流传输直接相关,而虚部则与电抗(与相位延迟和相位差异有关)相关。

本研究使用 Au 的介电常数表达式为[14]:

$$\varepsilon(\lambda) = \frac{(72500)^2}{\left[\left(\frac{10000}{\lambda}\right)^2 + 216\right]} - i(72500)^2 \frac{216}{\left[\left(\frac{10000}{\lambda}\right)^3 + \left(\frac{10000}{\lambda}\right)216^2\right]}$$
(6)

该式以复数形式( $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$ )描述电磁场作用下金属的极化响应与能量耗散特性[13]。

ε' 描述了自由电子等离子体的共振行为与极化响应,其实部表达式深刻揭示了金属中自由电子的集体振荡现象,即等离子体共振。当ω<sub>p</sub>取值为72,500,而γ为216时,γ这一项表征了电子碰撞阻尼,反映出电子与晶格、杂质等之间的散射频率特性。在入射波长λ较长(即处于低频区)时,分母中的相关项逐渐减弱,实部趋向于负值,此时 Au 呈现出典型的金属特性,能够有效支持表面等离激元(SPPs)的激发。

另一方面, ε"刻画了电子散射损耗与能量吸收,揭示了电磁波在金属内部能量耗散的复杂机制。其 虚部与材料的电导率(σ)及电子散射率(γ)息息相关。在高频条件下,分母中的 10,000 除 λ 项占据主导地 位,导致损耗随着频率的增加而非线性上升,这或许与带间跃迁或电子 - 声子相互作用密切相关。损耗 正切( $\tan \delta$ )定义为虚部与实部的比值( $\tan \delta = \varepsilon''/\varepsilon'$ ),直观地反映了材料的损耗效率。在高频区域,虚部的 显著增大使得金属表现出强烈的吸收特性,进一步揭示了金属在电磁波作用下的能量耗散本质。这一现 象不仅丰富了金属材料在电磁场中的响应机制,也为相关应用提供了理论基础。

在模拟无限大电磁阵列响应的过程中,我们需要沿 x 轴和 y 轴应用 Floquet 周期性边界条件。为了确 保仿真结果的精确性,在模型的端口层加入了散射边界条件,以有效吸收边界的反射波。激励源采用端 口激励的方式,在模型的上、下表面分别设置了太赫兹波垂直入射的端口,频率范围设定在 3.5 至 6.5 THz 之间,并使用平面波激励模式。为了激发等离激元共振,将偏振方向设定为与纳米带的长轴垂直。SiO<sub>2</sub> 的 介电常数设定为 4,在纳米带边缘局部进行网格加密,最小网格尺寸为 0.005 μm,总网格数量大约为 6× 10<sup>4</sup>。通过计算收敛性的验证,误差控制在 0.1%以内。

## 3.2. 宽带模式性能



**Figure 3.** Broadband response mechanism of gradient structure (a) Broadband mode: Broadband absorption spectrum of gradient width graphene nanoribbons ( $W_1 = 0.7 \mu m$ ,  $W_2 = 0.58 \mu m$ ,  $W_3 = 0.5 \mu m$ , no Au substrate,  $d = 10 \mu m$ ), bandwidth 1.18 THz (3.82~5 THz); (b) Narrow-band comparison: Absorption spectra of graphene gratings of uniform width ( $W = 0.5 \mu m$ ), peak frequency 4.78 THz; (c) Charge distribution evolution: The instantaneous electric field distribution in the xz plane showed that with the increase in frequency ( $f_1 \rightarrow f_3$ ), the resonance region shifted from a wide nanoribbon (red arrow) to a narrow nanoribbon (blue arrow), realizing a dynamic relay mechanism with wide frequency response

**图 3.** 梯度结构宽频响应机理(a) 宽频模式:梯度宽度石墨烯纳米带( $W_1 = 0.7 \mu m$ ,  $W_2 = 0.58 \mu m$ ,  $W_3 = 0.5 \mu m$ , 无 Au 基底,  $d = 10 \mu m$ )的宽频吸收谱,带宽 1.18 THz (3.82~5 THz); (b) 窄带对比:均匀宽度( $W = 0.5 \mu m$ )石墨烯光栅的吸收谱,峰值频率 4.78 THz; (c) 电荷分布演化: xz 平面瞬时电场分布显示,随频率增加( $f_1 \rightarrow f_3$ ),共振区域从宽纳米带 (红色箭头)向窄纳米带(蓝色箭头)迁移,实现宽频响应的动态接力机制

本研究借助 COMSOL 电磁仿真系统,深入剖析了梯度结构在拓展器件宽频响应方面的物理机制,图 3 清晰地呈现了这一分析过程。在仿真设计中,我们设立了两组对照样本:其一为宽频模式组,使用纳米 带间距 d = 10 µm 的梯度化石墨烯纳米带阵列。该结构在 1.8 至 3.9 THz 的频率区间展现出显著的宽频吸 收特性,吸收带宽达到 1.18 THz (详见图 3(a))。而窄带对比组则采用均匀宽度(W = 1 µm)的石墨烯光栅结 构,间距同样为 d = 10 µm,其吸收峰的半高宽(FWHM)仅为 0.62 THz。这一鲜明对比有力地验证了梯度 宽度设计在拓宽带宽方面的关键作用(如图 3(b)所示)。进一步通过模拟宽频模式组在 xz 平面的电荷分布 情况(参见图 3(c)),研究揭示,不同宽度的纳米带单元呈现出有序共振特性。在频率递增的过程中,共振 区域依次从宽度较大的纳米带向宽度较小的纳米带迁移,具体迁移路径为从 0.7 µm 逐步递减至 0.5 µm。 详细而言,较宽的纳米带在低频段率先激发等离激元共振,随着频率的上升,较窄的纳米带单元通过相 位延迟效应接续激发共振,从而形成吸收峰的连续叠加效应。这种独特的"接力式共振"机制使得吸收 率曲线呈现出宽峰特征,但鉴于每个频率点仅有部分纳米带参与共振,简单来说附近相耦合的石墨烯因 宽度不同不在共振位置,在相同共振位置的耦合距离变大,导致峰值吸收率相较于均匀结构峰值的 1.5% 下降至 1.2%。解决方案: 1.减小距离 d 利用近场耦合减小下降影响。2.引入石墨烯费米能级调控,提高 吸收率损失减小下降影响。3.引入金属,利用法布里波罗腔补偿共振效率损失减小下降影响。



Figure 4. Gradient structure xz direction electric field diagram 图 4. 梯度结构 xz 截面电场图

基于图 3 的梯度耦合理论模型,图 4 通过 COMSOL 仿真揭示了 xz 平面内电场随纳米带宽度渐变 (0.5→0.7 μm)的分布特征,证实几何梯度对带宽扩展的调控作用。为进一步揭示梯度结构的电荷输运机制图 5 结合 xy 平面电场极化特征与电荷密度分布,阐明几何梯度对载流子迁移率(μ)及多频响应的协同调控。





我们依据上面的数据,对梯度宽度导致带宽展宽的物理机制进行了深入的分析梯度宽度通过改变纳 米带的等离激元共振频率,实现频率偏移,从而扩展带宽。可引用等离激元色散方程:

$$\omega_p = \varepsilon_0 \left( \varepsilon_r + \varepsilon_{\text{graphene}} \right) e^{2n}$$

其中, $\omega_p$ 为等离激元频率,n为石墨烯载流子浓度, $\varepsilon_r$ 为介质相对介电常数。当纳米带宽度 W 从 0.5  $\mu$ m 渐变为 0.7  $\mu$ m 时, $\omega_p$ 随宽度变化而偏移,形成连续的频域覆盖。



**Figure 6.** The influence of different gradient change rates (such as 0.4 μm→0.8 μm) on bandwidth 图 6. 不同梯度变化率(如 0.4 μm→0.8 μm)对带宽影响

通过仿真研究不同梯度变化率(如 0.4 μm→0.8 μm)对带宽的影响(如图 6),可以发现梯度变化率对滤 波器的性能具有重要影响。具体而言,梯度变化率决定了纳米带宽度从最小值到最大值的变化速度,而 这种变化速度直接影响了等离激元共振频率的偏移范围和带宽的扩展效果。仿真结果表明,梯度变化率 过大可能导致相邻纳米带单元的共振频率偏移过大,从而引发共振峰的分离现象。这种分离现象会破坏 频域的连续覆盖,导致带宽扩展的效率下降。因此,在设计梯度化石墨烯纳米带阵列时,需要合理选择 梯度变化率,以在保证频域连续覆盖的同时,最大化带宽扩展的效果。



**Figure 7.** Effects of different spacing d on bandwidth and absorption 图 7. 不同间距 d 对带宽和吸收率的影响

纳米带间距(d)对器件性能的影响体现在两个关键方面(如图 7): 耦合强度与共振频率间距的平衡。当 其他条件不变时,随着间距 d 减小,相邻纳米带之间的电磁耦合强度显著增强。这种增强的耦合不仅促 进了能量在纳米带间的高效传递,还使得共振信号更容易被远场检测到(如太赫兹吸收谱的响应强度提 升)。然而,间距 d 的减小同时会导致不同宽度纳米带的共振频率间距缩小。例如,当纳米带间距从 10 μm 降至 5 μm 时,相邻纳米带的等离激元共振频率差可能从 0.77 THz (如原始梯度 0.5→0.7 μm 时的偏移量) 缩小至 0.4 THz,进而压缩了整体频域覆盖范围[1]。此时,若仍采用较小的宽度梯度(如 0.5→0.7 μm),相 邻纳米带的共振频率可能因间距过密而发生重叠,导致带宽扩展效率下降。

为解决这一矛盾,需通过增大纳米带宽度梯度来补偿间距减小带来的共振频率间距缩小。例如,将 宽度梯度从 0.5→0.7 μm 调整为 0.4→0.8 μm,可在间距 d 减小的情况下,仍保持足够大的等离激元共振 频率偏移(如理论预测可达 1.2 THz),从而维持甚至扩展带宽。这一策略通过"以宽变代间距"实现了频 域覆盖的优化,同时兼顾了强耦合带来的检测灵敏度优势。

## 4. 结论

本文通过梯度耦合理论以及 COMSOL 仿真软件的结合,设计出具有梯度化结构的创新方案,建立了 采用"结构对称性破缺→频域连续覆盖"的设计范式,成功实现 3.82~5 THz 频段的本征带宽扩展(Δf = 1.18 THz),较均匀结构提升 90%。通过 COMSOL 多物理场仿真验证,该设计通过参数梯度渐变(0.5→0.7 µm)形成空间维度连续调制的等离激元共振,其Q值稳定在 3.75 区间。仿真结果验证了所提方法的有效 性,后续研究将集中于优化不同宽度条带与石墨烯 - 介质异质界面的组合,以扩展带宽和提高能量转换 效率。在实际应用意义上可以实现 6G 通信中支持多频段融合和提升信道容量生物传感器中实现多参数 同步检测(如蛋白质/DNA 共存体系)。这为开发太赫兹频段的宽带系统提供了创新性的思路。

# 参考文献

- Nagatsuma, T., Ducournau, G. and Renaud, C.C. (2016) Advances in Terahertz Communications Accelerated by Photonics. *Nature Photonics*, 10, 371-379. <u>https://doi.org/10.1038/nphoton.2016.65</u>
- [2] Tonouchi, M. (2007) Cutting-Edge Terahertz Technology. *Nature Photonics*, **1**, 97-105. <u>https://doi.org/10.1038/nphoton.2007.3</u>
- [3] Zhang, H., Zhang, L. and Yu, X. (2021) Terahertz Band: Lighting up Next-Generation Wireless Communications. *China Communications*, 18, 153-174. <u>https://doi.org/10.23919/jcc.2021.05.010</u>
- [4] Yang, X., Zhao, X., Yang, K., Liu, Y., Liu, Y., Fu, W., et al. (2016) Biomedical Applications of Terahertz Spectroscopy and Imaging. *Trends in Biotechnology*, 34, 810-824. <u>https://doi.org/10.1016/j.tibtech.2016.04.008</u>
- [5] Federici, J.F., Schulkin, B., Huang, F., Gary, D., Barat, R., Oliveira, F., *et al.* (2005) Thz Imaging and Sensing for Security Applications—Explosives, Weapons and Drugs. *Semiconductor Science and Technology*, 20, S266-S280. <u>https://doi.org/10.1088/0268-1242/20/7/018</u>
- [6] Song, H. and Nagatsuma, T. (2011) Present and Future of Terahertz Communications. *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, **1**, 256-263. <u>https://doi.org/10.1109/tthz.2011.2159552</u>
- [7] Wang, G., Zhang, X. and Wei, X. (2020) Tunable Plasmon-Induced Transparency through Bright Mode Resonator in a Metal-Graphene Terahertz Metamaterial. *Applied Sciences*, **10**, Article 5550. <u>https://doi.org/10.3390/app10165550</u>
- [8] Ju, L., Geng, B., Horng, J., Girit, C., Martin, M., Hao, Z., et al. (2011) Graphene Plasmonics for Tunable Terahertz Metamaterials. *Nature Nanotechnology*, 6, 630-634. <u>https://doi.org/10.1038/nnano.2011.146</u>
- [9] Ma, G., Li, X., Hu, F., Deng, T., Li, L., Gao, C., et al. (2024) A Novel Multilayer Broadband Terahertz Metamaterial Absorber Based on Three-Dimensional Printing and Microfluidics Technologies. *IEEE Transactions on Terahertz Sci*ence and Technology, 14, 484-494. <u>https://doi.org/10.1109/tthz.2024.3405168</u>
- [10] Fu, P., Liu, F., Ren, G.J., Su, F., Li, D. and Yao, J.Q. (2018) A Broadband Metamaterial Absorber Based on Multi-Layer Graphene in the Terahertz Region. *Optics Communications*, 417, 62-66. <u>https://doi.org/10.1016/j.optcom.2018.02.034</u>
- [11] Low, T. and Avouris, P. (2014) Graphene Plasmonics for Terahertz to Mid-Infrared Applications. ACS Nano, 8, 1086-1101. <u>https://doi.org/10.1021/nn406627u</u>
- [12] Castro Neto, A.H., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S. and Geim, A.K. (2009) The Electronic Properties of Graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81, 109-162. <u>https://doi.org/10.1103/revmodphys.81.109</u>
- [13] 邓伟胤,朱瑞,邓文基. 有限尺寸石墨烯的电子态[J]. 物理学报, 2013, 62(8): 441-448.
- [14] Gonçalves, P.A.D., Christensen, T., Rivera, N., Jauho, A., Mortensen, N.A. and Soljačić, M. (2020) Plasmon-Emitter Interactions at the Nanoscale. *Nature Communications*, 11, Article No. 366. https://doi.org/10.1038/s41467-019-13820-z