

**MÔ HÌNH LÝ THUYẾT CHO SIÊU BỀ MẶT TỪ TÍNH QUANG HỌC GRAPHENE CÓ THỂ ĐIỀU CHỈNH HỆ SỐ TRUYỀN QUA VÙNG THz***Trần Thị Hải<sup>1</sup>**Lê Bá Nam<sup>2</sup>**Chu Việt Hà<sup>3</sup>**Nguyễn Ngọc Thạch<sup>4</sup>**Hoàng Đình Hải<sup>5</sup>**Phan Đức Anh<sup>6</sup>***TÓM TẮT**

Công nghệ terahertz (THz) đang được tập trung nghiên cứu và phát triển trên toàn thế giới vì những ứng dụng của nó trong cuộc sống, đặc biệt là các phương pháp điều khiển các tính chất trong vùng THz. Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng mô hình lý thuyết để tính toán cho sự biến thiên của hệ số truyền qua của hệ các dải graphene được đặt trên đế. Kết quả tính toán cho thấy phổ quang học phụ thuộc rất lớn vào từ trường và điện trường bên ngoài đặt vào, số lớp dải graphene đặt trên đế, và chiết suất môi trường. Những tính toán lý thuyết trùng khớp với đo đạc thực nghiệm. Đây là phương pháp nghiên cứu lý thuyết đáng tin cậy và cho phép tối ưu hóa các thiết kế linh kiện phù hợp với yêu cầu kỹ thuật.

**Từ khóa:** Vật liệu siêu bề mặt, dải graphene, công nghệ THz

**1. Đặt vấn đề**

Công nghệ terahertz được sử dụng phổ biến trong các ứng dụng như công nghệ 6G (dự kiến sẽ được triển khai rộng rãi trong đời sống vào 2028), y sinh [1], viễn thông, và bảo mật [2]. Độ nhạy tín hiệu sẽ phụ thuộc vào độ hẹp và biên độ của phổ quang học. Chế tạo các thiết bị thu phát sóng trong vùng tần số này cần có các thiết kế sở hữu các hốc cộng hưởng ở tần số mong muốn hoặc được tạo nên từ các vật liệu có tương tác mạnh trong vùng THz. Các thông số về cấu trúc hệ và vật liệu đều ảnh hưởng đến hiệu suất và độ chính xác nên cần có phương pháp nghiên cứu đáng tin cậy cho các dự đoán tính chất.

Thực nghiệm là phương pháp chính hiện nay dùng cho công nghệ THz. Tuy nhiên phải tiến hành rất nhiều thí nghiệm nếu muốn có cấu trúc tối ưu nhất.

Trong khi làm thực nghiệm sẽ tốn kém và cần tiến hành nhiều chế tạo, mô phỏng [3, 4] và lý thuyết được sử dụng như những phương pháp nghiên cứu thay thế để tạo ra những dự đoán gần nhất chỉ đường cho thực nghiệm. So với mô phỏng thì lý thuyết đơn giản hơn, thời gian tính toán nhanh hơn và khả năng tăng quy mô cho hàng loạt tính toán cũng cao hơn.

Trong khi đó graphene là vật liệu hai chiều có tương tác điện từ, có nhiều tính chất rất hấp dẫn và ứng dụng ở vùng THz [5]. Các tính chất quang và điện của graphene có thể được điều khiển bởi điện và từ trường bên ngoài đặt vào, thay đổi thể hóa học, pha tạp, hình dạng và kích thước khác nhau do tác dụng của hiệu ứng biên và hiệu ứng kích thước hữu hạn ví dụ như dải băng graphene (graphene ribbons). Với sự phát triển của khoa học công nghệ hiện nay, việc tạo ra các cấu trúc và hình dạng mong muốn với độ

<sup>1</sup>Trường Đại học Hồng Đức, Email: tranhait@gmail.com

<sup>2</sup>Trường Đại học Bách khoa

<sup>3</sup>Trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên

<sup>4</sup>Trường THPT Đoàn Thượng - Gia Lộc - Hải Dương 98

<sup>5</sup>Trường Cao đẳng Sư phạm Nghệ An

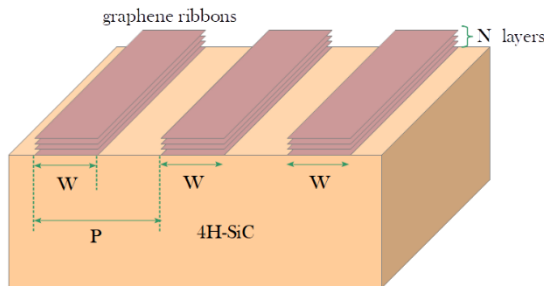
<sup>6</sup>Đại học Phenikaa

chính xác cao là việc không khó. Khi có dự đoán tốt từ mô hình lý thuyết hay mô phỏng đáng tin cậy thì việc chế tạo để đưa sản phẩm ra thực tế là điều khả thi.

Trong bài báo này, chúng tôi đưa ra mô hình lý thuyết để tính phổ truyền qua của hệ vật liệu bề mặt biến hóa (metasurfaces) gồm hệ dải băng graphene được đặt trên lớp đế 4H-SiC. Hệ cấu trúc này đã được chế tạo thực nghiệm trong một bài báo gần đây [6]. Chúng tôi chỉ ra sự phụ thuộc tương tác điện từ trong vùng THz giữa hệ nghiên cứu với trường chiếu tới vào thế hóa học của graphene, điện và từ trường ngoài, và môi trường. Những kết quả lý thuyết của chúng tôi cho sự trùng khớp cao với thực nghiệm.

### Lý thuyết

Hình 1 miêu tả cấu trúc hình học và thứ tự của hệ mà chúng tôi nghiên cứu. Dãy của các dải graphene gồm  $N$  lớp xếp chồng lên nhau được sắp xếp một cách có thứ tự và khoảng cách tuần hoàn là  $P$ . Độ dày của dải graphene là  $W$ . Hệ graphene này đặt trên đế rắn 4H-SiC.



**Hình 1:** Miêu tả hệ nghiên cứu với các thông số cấu trúc quan trọng.

Ở vùng tần số THz, độ dẫn quang học của graphene đơn lớp khi không có tác dụng của từ trường ngoài đặt vào được tính bằng công thức [5]

$$\sigma_0 = \frac{e^2 \tau k_B T}{\pi \hbar^2 (1 - i\omega\tau)} \left[ \frac{\mu}{k_B T} + 2 \ln(e^{-\mu/k_B T} + 1) \right], \quad (1)$$

ở đây  $\mu$  là thế hóa học của graphene,  $e$  là điện tích của electron,  $T$  là nhiệt độ,  $k_B$  là hằng số Boltzmann,  $\tau$  là thời gian thư giãn hay còn gọi thời gian dập tắt chuyển động. Với hệ dải graphene có  $N$  lớp, độ dẫn quang học sẽ được tính bằng [7]

$$\sigma_g = N\sigma_0. \quad (2)$$

Dưới tác dụng của từ trường ngoài, độ dẫn quang học của graphene biến thành dạng tensor

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

ở đây các thành phần của độ dẫn quang học theo các chiều khác nhau được tính bằng [6]

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_g \frac{(1 - i\omega\tau)^2}{(1 - i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2}, \quad (4)$$

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \sigma_g \frac{\omega_c\tau(1 - i\omega\tau)}{(1 - i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2}, \quad (5)$$

ở đây  $\omega_c = e v_F^2 B / \mu$  là tần số cộng hưởng cyclotron,  $B$  là từ trường ngoài, và  $v_F = 10^6$  m/s là vận tốc của electron ở mức Fermi.

Giữa các dải graphene cũng mặc dù là môi trường nhưng cũng có giá trị của độ dẫn điện hiệu dụng và nó được tính bằng công thức

$$\sigma_c = -i \frac{\omega \varepsilon_0 (\varepsilon_r + \varepsilon_m) P}{\pi} \ln \left( \csc \left[ \frac{\pi(P-W)}{2P} \right] \right), \quad (6)$$

ở đây  $\varepsilon_r$  là hằng số điện môi của đế,  $\varepsilon_m$  là hằng số điện môi của môi trường,  $\varepsilon_0$  là hằng số điện của chân không.

Kết hợp giữa độ dẫn điện trong và ngoài dải băng graphene trên bề mặt của đế, ta có một tensor cho độ dẫn điện hiệu dụng với sóng điện từ chiếu tới vuông góc với bề mặt của đế [6]

$$\sigma' = \begin{bmatrix} \sigma'_{xx} & \sigma'_{xy} \\ \sigma'_{yx} & \sigma'_{yy} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

ở đây

$$\sigma'_{xx} = \frac{W\sigma_{xx}\sigma_c}{P\sigma_c + W\sigma_{xx}}, \quad (8)$$

$$\sigma'_{xy} = -\sigma'_{yx} = \sigma'_{xx} \frac{W\sigma_{xy}}{P\sigma_{xx}}, \quad (9)$$

$$\sigma'_{yy} = \frac{W}{P}\sigma_{xx} + \frac{W\sigma_{xy}^2}{P\sigma_{xx}} - \frac{\sigma_{xy}^2}{\sigma'_{xx}}. \quad (10)$$

Sự phụ thuộc của hệ số truyền qua vào độ dẫn quang học được tính được thể hiện qua công thức [8]

$$\frac{T}{T_0} = 1 - \frac{2Z_0}{\sqrt{\varepsilon_m + \sqrt{\varepsilon_r}}} \operatorname{Re}[\sigma'_{xx}], \quad (11)$$

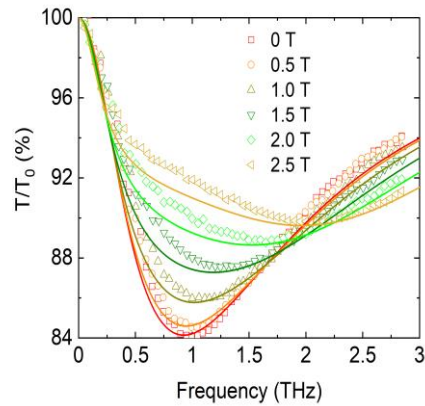
với  $Z_0 = 376.73 \Omega$  là trở kháng chân không và  $T_0$  là hệ số truyền qua khi hệ không có dải băng graphene trên bề mặt đế.

## 2. Kết quả và thảo luận

Trong phần này, để có được so sánh công bằng giữa tính toán lý thuyết của chúng tôi và thực nghiệm, chúng tôi sử dụng thông số của hệ thực nghiệm đã được chế tạo ở bài báo trước đây [6], với  $N = 1$ ,  $\mu = 0,2 \text{ eV}$ ,  $W = 16 \mu\text{m}$ ,  $P = 32 \mu\text{m}$ ,  $\tau = 75 \text{ fs}$ ,  $\varepsilon_m = 1$ , và nhiệt độ tiến hành thực nghiệm ở  $2 \text{ K}$ .

Hình 2 cho thấy tính toán lý thuyết dựa trên công thức số (11) và thực nghiệm tương ứng đo được ở bài báo [6] dưới tác dụng của các giá trị khác nhau của từ trường ngoài. Kết quả tính toán lý thuyết rất trùng khớp với kết quả thực nghiệm. Ở tần số nhỏ ( $\omega/2\pi \leq 0,3 \text{ THz}$ ), từ trường ngoài gần như không có ảnh hưởng nào đến hệ số truyền qua vì độ dẫn hiệu dụng của môi trường giữa các dải graphene  $\sigma_c$  là rất nhỏ. Phương trình (6) cho thấy  $\sigma_c$  tỉ lệ thuận với  $\omega$  và do đó  $\sigma'_{xx} \sim \omega$ . Tăng từ

trường ngoài đặt vào tạo ra dịch chuyển xanh cho vị trí cực tiểu của hệ số truyền qua và cũng làm cho ảnh hưởng của lớp graphene lên  $\frac{T}{T_0}$  giảm đi. Điều này có thể lý giải bằng việc tăng của tần số  $\omega_c$  với tăng từ trường  $B$  và làm giảm  $\sigma_{xx}$  (dựa vào phương trình (4)) và  $\sigma'_{xx}$  (theo phương trình (8)).



**Hình 2:** Hệ số truyền qua của hệ dải graphene đơn lớp ( $N = 1$ ) đặt trên đế được chuẩn hóa bởi hệ số truyền qua ở hệ không có graphene theo hàm của tần số sóng điện từ chiếu tới ở các giá trị khác nhau của từ trường chiếu tới được đo ở nhiệt độ  $2 \text{ K}$ . Các điểm dữ liệu trên hình vẽ là kết quả thực nghiệm. Các đường liền là tính toán lý thuyết tương ứng với giá trị của từ trường chiếu tới

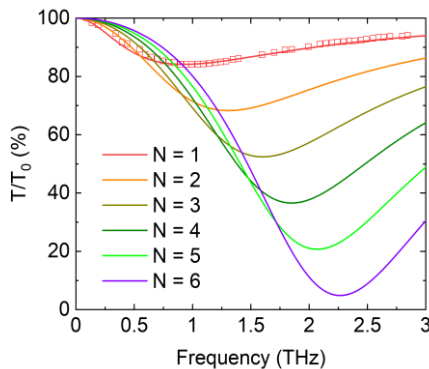
Hình 3 cho thấy sự phụ thuộc của hệ số truyền qua vào số lớp dải graphene trên bề mặt đế 4H-SiC với các thông số cấu trúc giống tính toán ở hình 2. Theo phương trình (2), việc tăng số lớp graphene lên sẽ làm tăng độ dẫn quang học và do đó đẩy các dải graphene có vai trò rất lớn trong việc thay đổi hệ số truyền qua của hệ. Với số lớp graphene lớn ( $N \geq 6$ ), tỷ số  $\frac{T}{T_0}$  khá nhỏ và tiến tới

0. Điều này có nghĩa là năng lượng của sóng điện từ vùng THz chiếu tới sẽ được hấp thụ ở lớp graphene trên bề mặt và phản xạ một phần chứ không cho truyền qua. Ngoài ra, việc tăng số lớp graphene cũng dịch chuyển vị trí cực tiểu của phổ quang học sang vùng có tần số lớn hơn.

Từ phương trình (1), (2), và (4), ta có thể thấy độ dẫn quang học phụ thuộc vào thế hóa học của graphene. Theo như một nghiên cứu trước đây [9], thế hóa học này có thể thay đổi bằng điện trường ngoài  $E_d$  đặt vào và được tính bằng công thức

$$\frac{\pi \epsilon_0 \hbar^2 v_F^2}{e} E_d = \int_0^\infty E [f(E) - f(E + 2\mu)] dE, \quad (12)$$

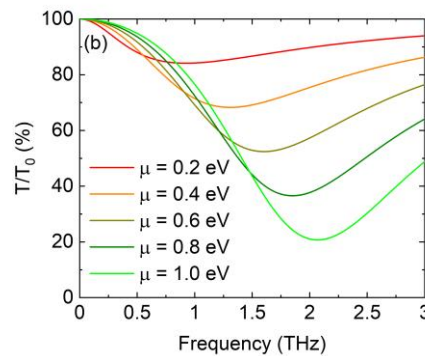
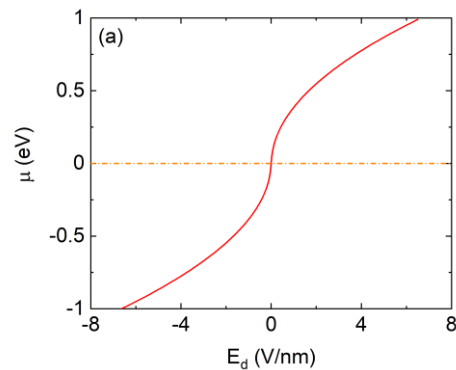
với  $f(E)$  là hàm phân bố Fermi.



**Hình 3:** Hệ số truyền qua của hệ dải graphene đặt trên để được chuẩn hóa bởi hệ số truyền qua ở hệ không có graphene theo hàm của tần số sóng điện từ chiếu tới ở các giá trị khác nhau của số lớp dải graphene được tính ở nhiệt độ 2 K. Các điểm dữ liệu trên hình vẽ là kết quả thực nghiệm. Các đường liền là tính toán lý thuyết tương ứng với giá trị của từ trường chiếu tới

Hình 4a cho thấy sự phụ thuộc của thế hóa học và điện trường ngoài tính bằng công thức (12). Tăng điện trường ngoài sẽ làm tăng sự cản trở chuyển động

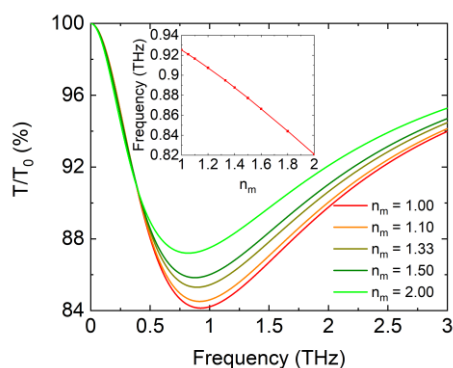
của các electron trong graphene và do đó làm thế hóa học của graphene cũng tăng lên. Trong thực tế ngoài cách đặt điện trường ngoài vào, thế hóa học cũng có thể được thay đổi bằng tạo ra các khuyết tật (defects) và doping trong các tấm graphene [12].



**Hình 4:** (a) Biến thiên của thế hóa học theo giá trị của điện trường ngoài đặt vào. (b) Hệ số truyền qua của hệ dải graphene đơn lớp đặt trên để được chuẩn hóa bởi hệ số truyền qua ở hệ không có graphene theo hàm của tần số sóng điện từ chiếu tới ở các giá trị khác nhau của thế hóa học được tính ở nhiệt độ 2 K

Chúng ta có thể thấy hệ dây graphene đơn lớp ( $N = 1$ ) giảm lượng sóng điện từ vùng THz truyền qua khi tăng thế hóa học của graphene trên hình 4b. Phương trình (1) cho thấy tăng sẽ dẫn tới tăng độ dẫn quang học của graphene và vì thế

nâng tầm ảnh hưởng của lớp graphene lên hệ số truyền qua trên bề mặt. Nồng độ electron trên một đơn vị thể tích lớn hơn khi tăng thể tích hóa học. Đối với graphene thì tần số plasma tỉ lệ thuận với căn bậc hai của nồng độ electron [5]. Do đó khi nồng độ electron tăng lên sẽ làm toàn bộ phổ quang học bao gồm cả vị trí cực tiểu cũng dịch chuyển sang vùng tần số cao khi tăng thể tích hóa học hay tăng điện trường ngoài đặt vào. Điều đó cũng có nghĩa là quang năng của sóng điện từ chiếu tới bị hấp thụ nhiều hơn trên bề mặt để và bị giam cầm nội tại trong các dải graphene.



**Hình 5:** Hệ số truyền qua của hệ dải graphene đơn lớp ( $N = 1$ ) đặt trên đế được chuẩn hóa bởi hệ số truyền qua ở hệ không có graphene theo hàm của tần số sóng điện từ chiếu tới ở các giá trị khác nhau của chiết suất môi trường được tính ở nhiệt độ 2 K. Hình nhỏ bên trong miêu tả sự phụ thuộc tần số tại vị trí nhỏ nhất của hệ số truyền qua vào chiết suất môi trường.

Để nghiên cứu xem hệ siêu bề mặt của chúng tôi có thể sử dụng để chế tạo sensor hay không, chúng tôi nghiên cứu cách mà phổ quang học truyền qua của hệ thay đổi theo biên thiên của chiết suất môi trường. Trong phần này các thông số cấu trúc của hệ giống như miêu tả ở hình 2 nhưng thay đổi chiết suất  $n_m = \sqrt{\epsilon_m}$  từ

1 đến 2. Các kết quả tính số của chúng tôi được miêu tả trên hình 5 cho sự phụ thuộc của hệ số truyền qua vào tần số THz chiếu tới ở các giá trị khác nhau của chiết suất môi trường. Trái ngược với các tính toán ở trên, tăng chiết suất môi trường làm phổ quang học dịch chuyển về tần số thấp hơn và có thể đo đạc được tín hiệu này. Vị trí cực tiểu của phổ quang học gần như tuyến tính với chiết suất bên ngoài đặt vào. Giảm từ 0,925 THz đến 0,82 THz khi chiết tăng từ 1 đến 2. Khá đáng kể. Do đó hoàn toàn có thể chế tạo ra những sensor dựa trên hệ graphene siêu bề mặt như trong bài báo này. Ngoài ra, chúng ta cũng thấy tầm ảnh hưởng của lớp graphene lên hệ số truyền qua của hệ cũng bị giảm đi, mặc dù không nhiều.

### 3. Kết luận

Chúng tôi đã đưa ra mô hình lý thuyết để nghiên cứu phổ quang học truyền qua của hệ cấu trúc siêu bề mặt bao gồm các dải băng graphene được sắp xếp có trật tự trên bề mặt 4H-SiC. Tính chất quang học của hệ siêu bề mặt này có thể được thay đổi bằng từ trường hoặc điện trường bên ngoài. Trong khi tăng từ trường ngoài làm giảm ảnh hưởng của graphene lên hệ số truyền qua của vật liệu, tăng điện trường ngoài lại làm tăng thêm ảnh hưởng của graphene và quang năng chiếu tới được hấp thụ nhiều hơn trong graphene trên bề mặt để. Điều chung ở đây là cả phổ quang học đều dịch chuyển sang vùng tần số lớn hơn hay còn gọi là dịch chuyển xanh. Tăng số lớp của graphene là một cách giúp tăng nồng độ electron trên một dải band graphene và làm thay đổi đáng kể hệ số truyền qua. Chiết suất môi trường là một trong những yếu tố quan trọng ảnh hưởng lên hệ. Chúng ta hoàn toàn có thể sử dụng hệ này cho việc chế tạo các sensor.

Kết quả tính lý thuyết của chúng tôi đều so sánh với thực nghiệm và cho được sự đồng thuận định lượng rất cao. Các

đường tính toán lý thuyết bám rất sát số liệu thực nghiệm khi được vẽ trên cùng một đồ thị.

### **Lời cảm ơn:**

Các tác giả của bài báo xin cảm ơn đề tài có mã số 103.01-2017.63, được cấp bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED).

This research is funded by Vietnam National Foundation for Science and Technology Development (NAFOSTED) under grant number 103.01-2017.63.

### **TÀI LIỆU THAM KHẢO**

1. D. D. Arnone, C. M. Ciesla, A. Corchia, S. Egusa, M. Pepper, J. M. Chamberlain, C. Bezant, E. H. Linfield, R. Clothier, and N. Khammo (1999) "Applications of terahertz (THz) technology to medical imaging", Proc. SPIE 3828, Terahertz Spectroscopy and Applications II, (9 September 1999).
2. S. S. Dhillon *et. al* (2017), "The 2017 terahertz science and technology roadmap", *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 50, pp. 043001.
3. <https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/cst-studio-suite/>
4. <https://comsol.com>
5. F. Javier García de Abajo (2014), "Graphene Plasmonics: Challenges and Opportunities", *ACS Photonics*, vol. 1, pp. 135-152.
6. P. Padmanabhan, S. Boubanga-Tombet, H. Fukidome, T. Otsuji, and R. P. Prasankumar (2020), "A graphene-based magnetoplasmonic metasurface for actively tunable transmission and polarization rotation at terahertz frequencies" *Appl. Phys. Lett.* vol. 116, pp. 221107.
7. Q. Guo, R. Yu, C. Li, S. Yuan, B. Deng, F. J. García de Abajo, and F. Xia (2018), "Efficient electrical detection of mid-infrared graphene plasmons at room temperature", *Nature Materials* vol. 17, pp. 986-992.
8. A. Ferreira, J. Viana-Gomes, Y. V. Bludov, V. Pereira, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto (2011), "Faraday effect in graphene enclosed in an optical cavity and the equation of motion method for the study of magneto-optical transport in solids," *Phys. Rev. B* vol. 84, pp. 235410.
9. A. D. Phan, N. A. Viet, N. A. Poklonski, L. M. Woods, and C. H. Le (2012), "Interaction of a graphene sheet with a ferromagnetic metal plate", *Phys. Rev. B* vol. 86, pp. 155419.

**THEORETICAL MODEL OF MAGNETO-OPTICAL GRAPHENE  
METASURFACE FOR TUNNING TRANSMISSION  
IN THE TERAHERTZ REGIME**

**ABSTRACT**

*The terahertz technology has been intensively developed and investigated all over the world for its applications in daily life, particularly methods for manipulating properties in the THz regime. In this paper, we use a theoretical model to study the transmission of metasurfaces including graphene ribbons periodically organized on a solid substrate. Numerical results show that optical spectra are strongly dependent on external electric and magnetic field, the number of graphene layers, and the refractive index of medium. Our theoretical calculations quantitatively agree with experimental data. This is a reliable theoretical method to optimize designs to obtain desired specifications.*

**Keywords:** *Metasurface, graphene ribbons, THz technology*

(Received: 9/3/2021, Revised: 17/4/2021, Accepted for publication: 31/5/2021)

