

# 北京郵電大學

## 本科 毕业 设计（论文）



题目：基于双层石墨烯的自由电子渡越辐射调控机理研究

姓 名 龚政  
学 院 电子工程学院  
专 业 电子科学与技术  
班 级 2018211205  
学 号 2018210861  
班内序号 6  
指导教师 张洪欣

2022 年 5 月

# 北京邮电大学

## 本科毕业设计（论文）任务书

学院	电子工程学院	专业	电子科学与技术	班级	2018211205
学生姓名	龚政	学号	2018210861	班内序号	6
指导教师姓名	张洪欣	所在单位	北京邮电大学电子 工程学院	职称	教授
设计(论文)题 目	(中文) 基于双层石墨烯的自由电子渡越辐射调控机理研究				
	(英文) Photonic and plasmonic transition radiation from bilayer graphene				
题目分类	工程实践类 <input type="checkbox"/> 研究设计类 <input type="checkbox"/> 理论分析类 <input checked="" type="checkbox"/>				
题目来源	题目是否来源于科研项目      是 <input type="checkbox"/> 否 <input checked="" type="checkbox"/>				
	科研项目名称:				
	科研项目负责人:				

主要任务及目标: (标明任务及目标对应的毕业要求指标点)

任务 1: 调研双层石墨烯的电磁学特性, 电磁模型, 关注电导率、化学势等参数;

支撑指标点: 3.1; 3.3; 4.1; 4.3; 5.1; 6.2; 10.1; 10.2; 10.3; 12.1

任务 2: 构建电磁模型, 给出自由电子穿过双层石墨烯时所激发电磁场量的解析表达, 并基于数值积分 (Sommerfeld Integration) 方法, 仿真绘制电磁场分布图;

支撑指标点: 3.1; 3.3; 4.1; 4.3; 5.1; 6.2; 10.1; 10.2; 10.3; 12.1

任务 3: 解析渡越前向、后向远场辐射的分布特性;

支撑指标点: 3.1; 3.3; 4.1; 4.3; 5.1; 6.2; 10.1; 10.2; 10.3; 12.1

任务 4: 分析近场表面等离激元的分布特性;

支撑指标点: 3.1; 3.3; 4.1; 4.3; 5.1; 6.2; 10.1; 10.2; 10.3; 12.1

任务 5: 稳定性、灵敏性分析, 系统研究电子运动速度、石墨烯化学势等变量与自由电子渡越辐射强度、能谱、方向性等性质之间的关系, 结合结论为高能粒子分析仪提供理论基础。

支撑指标点: 3.1; 3.3; 4.1; 4.3; 5.1; 6.2; 10.1; 10.2; 10.3; 12.1

任务 6: 构建系统级仿真, 观察、记录数据, 并基于理论模型对结果进行解释, 验证理论正确性。

支撑指标点: 3.1; 3.3; 4.1; 4.3; 5.1; 6.2; 10.1; 10.2; 10.3; 12.1

主要内容:

基于麦克斯韦电磁理论, 基于高速电子在非均匀介质中的运动, 结合 2 维平面材料双层石墨烯展开研究, 探究电磁场与电子的耦合, 研究自由电子穿过双层石墨烯时所激发出的渡越辐射 (包括远场电磁辐射和近场表面等离激元) 的分布特性, 并系统研究电子运动速度、石墨烯化学势等变量与自由电子渡越辐射强度、能谱、方向性等性质之间的关系。实现的主要内容有:

(1). 抽象双层石墨烯的电磁模型, 能够量化计算或通过模型近似[6]求解双层石墨烯的电导率;

(2). 构建电子运动模型, 用平面波展开/柱面波展开等数学物理手段解析求解电磁场分布, 并数值计算索

末菲积分，软件仿真得到电磁场分布；

(3).对渡越辐射进行远场/近场分析，重点关注远场 photon 的角谱图以及近场的等离激元分布，调研基于电子能量损失的高能粒子探测仪 EEL，为其提供理论依据。

主要参考文献：

- [1] J. A. Kong, Electromagnetic Wave Theory (EMW Publishing, Cambridge, MA, 2008)
- [2] V. L. Ginzburg, V. N. Tsytovich, Several problems of the theory of transition radiation and transition scattering. *Phys. Rep.* 49, 1 (1979).
- [3] V. L. Ginzburg, V. N. Tsytovich, Transition Radiation and Transition Scattering (Adam Higler, 1990).
- [4] X. Lin, I. Kaminer, X. Shi, F. Gao, Z. Yang, Z. Gao, H. Buljan, J. D. Joannopoulos, M. Soljačić, H. Chen, B. Zhang, Splashing transients of 2D plasmons launched by swift electrons. *Science Advances* 3, e1601192 (2017).
- [5] X. Lin , S. Easo, Y. Shen, H. Chen, B. Zhang, J. D. Joannopoulos, M. Soljačić, I. Kaminer, Controlling Cherenkov angles with resonance transition radiation. *Nature Physics* 14, 816 (2018).
- [6] T. Low, A. Chaves, J. D. Caldwell, A. Kumar, N. X. Fang, P. Avouris, T. F. Heinz, F. Guinea, L. Martin- Moreno, F. Koppens, Polaritons in layered two-dimensional materials. *Nature Materials.* 16, 182 (2017).
- [7] T. Ochiai, Efficiency and angular distribution of graphene-plasmon excitation by electron beam. *Journal of the Physical Society of Japan* 83, 054705 (2014).
- [8] K. Zhang, X. Chen, C. Sheng, K. J. A. Ooi, L. K. Ang, X. Yuan, Transition radiation from graphene plasmons by a bunch beam in the terahertz regime. *Optics Letters* 25, 20477 (2017).
- [9] S. Gong, M. Hu, Z. Wu, H. Pan, H. Wang, K. Zhang, R. Zhong, J. Zhou, T. Zhao, D. Liu, W. Wang, C. Zhang, S. Liu, Direction controllable inverse transition radiation from the spatial dispersion in a graphene-dielectric stack. *Photonics Research* 7, 1154 (2019).
- [10] Z. L. Mišković, S. Segui, J. L. Gervasoni, N. R. Arista, Energy losses and transition radiation produced by the interaction of charged particles with a graphene sheet. *Phys. Rev. B* 94, 125414 (2016).
- [11] F. J. G. Abajo, Multiple excitation of confined graphene plasmons by single free electrons. *ACS Nano* 7, 11409 (2013).
- [12] Lin, X., Hu, H., Easo, S. et al. A Brewster route to Cherenkov detectors. *Nat Commun* 12, 5554 (2021).
- [13] Shentcis, M., Budniak, A.K., Shi, X. et al. Tunable free-electron X-ray radiation from van der Waals materials. *Nat. Photonics* 14, 686–692 (2020).
- [14] Rivera, N., Kaminer, I. Light–matter interactions with photonic quasiparticles. *Nat Rev Phys* 2, 538–561 (2020).
- [15] Zhang, X., Hu, H., Lin, X. et al. Confined transverse-electric graphene plasmons in negative refractive-index systems. *npj 2D Mater Appl* 4, 25 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41699-020-00159-z>

进度安排：

第 1~3 周：调研双层石墨烯的电磁学特性，电磁模型，关注电导率、化学势等参数；

第 4~7 周：构建电磁模型，给出自由电子穿过双层石墨烯时所激发电磁场量的解析表达，并基于数值积分（Sommerfeld Integration）方法，仿真绘制电磁场分布图；

第 8 周：解析渡越前向、后向远场辐射的分布特性；

第 9~10 周：分析近场表面等离激元的分布特性；

第 11~12 周：稳定性、灵敏性分析，系统研究电子运动速度、石墨烯化学势等变量与自由电子渡越辐射

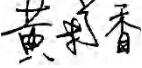
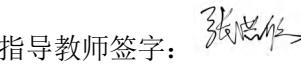
强度、能谱、方向性等性质之间的关系，结合结论为高能粒子分析仪提供理论基础。

第 13~14 周：构建系统级仿真，观察、记录数据，并基于理论模型对结果进行解释，验证理论正确性。

第 15 周：汇总理论模型结果、图标、数据仿真，撰写论文，答辩。

指导教师签字		日期	2021 年 12 月 3 日
--------	---	----	-----------------

# 北京邮电大学电子院本科生毕业设计（论文）成绩评定表

学生姓名	龚政		所在学院	电子工程学院	
学号	2018210861	专业	电子科学与技术	班级	2018211205
论文题目	(中文) 基于双层石墨烯的自由电子渡越辐射调控机理研究				
	(英文) Photonic and plasmonic transition radiation from bilayer graphene				
指导教师姓名	张洪欣	指导教师职称	教授	指导教师单位	北京邮电大学 电子工程学院
中期检查小组评分	(满分 10 分) : 9      中期检查小组组长签字:  检查日期: 2022. 04. 12				
指导教师评分	评价内容 (BY: 毕业要求)	具体要求			评分
	调研论证 (BY5, 12)	能够独立查阅文献和从事相关调研; 能正确翻译外文资料; 有收集、加工各种信息及获取新知识的能力和自学能力。 (满分 6 分)			6
	方案设计 (BY3, 6)	能够考虑社会、健康、安全、法律以及文化等非技术因素, 独立提出符合选题的可行性研究方案、实验方案、设计方案, 独立进行实验(如安装、调试、操作)和研究方案论证。 (满分6分)			5.5
	研究能力 (BY4, 6)	能够考虑社会、健康、安全、法律以及文化等非技术因素, 综合运用所学知识和技能去分析与研究毕业设计(论文)过程中遇到的实际问题; 能正确处理实验数据; 能对课题进行理论分析和研究, 得出合理有效的结论。 (满分 6 分)			5.5
	设计(论文) 水平 (BY3, 4)	文题相符、综述简练完整, 有见解; 立论正确, 论述充分, 结论严谨合理; 实验正确, 分析处理科学; 文字通顺, 技术用语准确, 设计(论文)有理论价值或应用价值。 (满分 6 分)			5
	学习态度 (BY10)	认真、勤奋、努力、诚实、严格遵守纪律, 按期饱满完成规定的任务。 (满分 3 分)			3
	文本规范 (BY10)	装订顺序正确, 字体字号等与基本规范相符, 符号统一, 编号齐全, 图表完备、整洁、正确。 (满分 3 分)			3
指导教师评分合计 (满分 30 分) : 28 评语: 该生调研充分, 学习和科研态度认真。在毕业设计的过程中, 能熟练地综合运用所学理论和专业知识解决问题。展现出很强的独立科研能力, 能够在理论上打破传统思维惯式提出解决方案, 在基于双层石墨烯的自由电子渡越辐射方面做出了创新工作, 水平高。论文撰写规范, 数据、图表清楚, 逻辑缜密, 论述有理有据并得出新颖结论。该生学术作风优良, 尊敬师长, 实事求是, 严谨治学, 出色的完成了毕业设计规定任务与要求。					
	指导教师签字: 		日期: 2022 年 5 月 27 日		
复议	<input type="checkbox"/> 是 <input type="checkbox"/> 否    复议评分合计: 28      复议人签字: _____      复议日期: (复议有权限修改指导教师评分, 选择复议后指导教师评分将由复议评分替代)				

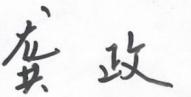
本科生毕业设计（论文）答辩成绩评定标准			
答辩小组成绩评定	评价内容 (BY: 毕业要求)	具体要求	评分
	选题 (BY5, 6)	符合专业培养目标，符合社会实际，考虑了社会、健康、安全、法律以及文化等非技术因素，结合工程实际，难易适度，查阅文献和调研论证充分，体现新颖性、综合性。（满分 12 分）	11
	设计（论文）质量水平 (BY3, 4)	全面完成任务书中规定的各项要求，文题相符，工作量饱满，写作规范，达到综合训练及相关毕业要求指标点的要求，有理论成果和应用价值。（满分 20 分）	19
	答辩准备 (BY10, 12)	准备充分；有简洁、清晰、美观的演示文稿；准时到场。（满分 5 分）	5
	内容陈述 (BY3, 4, 10, 12)	语言表达简洁、流利、清楚、准确，思路清晰，重点突出，逻辑性强，概念清楚，论点正确；实验方法科学，分析归纳合理；结论严谨；表现出对毕业设计（论文）内容掌握透彻，以及自主学习和归纳综合能力。（满分 18 分）	17
	回答问题 (BY10)	回答问题准确、有深度、有理论根据、基本概念清晰。（满分 5 分）	5
	答辩小组评分合计（满分 60 分）		57
	意见：论文选题新颖前沿，在毕设中查阅资料丰富，对课题调研充分。能熟练地综合运用所学理论和专业知识研究问题，完成了任务书中规定的所有要求，在双层石墨烯的自由电子渡越辐射机理研究方面有所创新，发现了新现象。论文文题相符，工作量饱满，达到综合训练及相关毕业要求指标点的要求，论文水平高，成果具有应用价值。在答辩中，语言流畅，重点突出，表达准确，基本概念清楚，具有较强的归纳总结能力。毕业设计表明，该生已经具备较高的科研素养以及独立科研的能力。		
学院意见	同意。最终成绩：百分制 <u>94</u> ； 五分制： <input checked="" type="checkbox"/> 优； <input type="checkbox"/> 良； <input type="checkbox"/> 中； <input type="checkbox"/> 及格； <input type="checkbox"/> 不及格		
备注			

- 注：1. 毕业设计（论文）成绩由中期检查评分（满分 10 分）、指导教师评分/复议评分（满分 30 分）和答辩小组评分（满分 60 分）相加，得出百分制成绩，再按 100-90 分为“优”、89-80 分为“良”、79-70 分为“中”、69-60 分为“及格”、60 分以下为“不及格”的标准折合成五级分制成绩；
2. 此表原件一式四份，一份存入学生档案，一份装订到毕业论文中，一份交教务处存入档案馆，一份学院留存。

北京邮电大学  
本科毕业设计（论文）诚信声明

本人声明所呈交的毕业设计（论文），题目《基于双层石墨烯的自由电子渡越辐射调控机理研究》是本人在指导教师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢中所罗列的内容以外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得北京邮电大学或其他教育机构的学位或证书而使用过的材料。

申请学位论文与资料若有不实之处，本人承担一切相关责任。

本人签名：  日期： 2022 年 5 月

# 基于双层石墨烯的自由电子渡越辐射调控机理研究

## 摘要

本文在经典麦克斯韦电磁理论框架下，解析计算了高速电子穿过二维平面材料双层石墨烯的电磁场分布，并研究其激发出的远场光子辐射和近场等离激元能谱特性。进而系统研究电子运动速度、双层石墨烯带隙差和光掺杂浓度等变量与自由电子渡越辐射的强度、能谱、方向性的关系。

本文首次将具有谐振增益且光学性质可调的人工电磁界面纳入渡越辐射的研究范畴，双层石墨烯的层间耦合、场效应和光激发等特性为渡越辐射引入了全新的机制。发现对于辐射能谱，远场辐射能谱峰与双层石墨烯光导谱峰出现频点一致，为二维材料特性的探测提供区别于传统电子能量损失谱法的新思路。辐射强度上，通过光激发双层石墨烯产生的谐振增益将远场辐射提升了近两个量级。辐射定向性上，揭示了增加粒子速度使辐射定向性增强的物理机理。激发特点上，发现更高速粒子有利于远场光子的激发而近场等离激元受低速粒子激发明显，并且辐射强度随粒子速度增加趋于饱和。等离激元模式上，本文论证双层石墨烯对 TM 模等离激元在深亚波长级别的强束缚，并利用光激发将双层石墨烯对 TE 模等离激元束缚程度提升 5 倍以上，有望打破等离激元器件对极化类型的限制。电磁调控上，不同于复杂的结构化电磁环境，本文创新性地阐述了如何通过改变二维材料本身的光学特性（场效应、光掺杂）对远场光子辐射进行调控，为基于渡越辐射的太赫兹光源、粒子探测器提供理论指导。

**关键词 双层石墨烯 渡越辐射 表面等离激元 远场电磁调控 太赫兹技术**

# **Photonic and Plasmonic Transition Radiation from Bilayer Graphene**

## **ABSTRACT**

In this paper, the electromagnetic field distribution of a swift electron passing through bilayer graphene is analytically calculated under the framework of classical Maxwell electromagnetic theory, and the far-field photon emission and near-field plasmon energy spectrum characteristics are investigated. Furthermore, the effects of electron velocity, band gap difference, and photodoping on the intensity, energy spectrum, and directivity of transition radiation are thoroughly investigated.

For the first time in the study of transition radiation, an artificial electromagnetic interface with adjustable optical properties and resonant gain is introduced in this paper. The interlayer coupling, field effect and pump-induced properties of bilayer graphene introduce a new radiation mechanism for transition radiation. The frequency point of the far-field radiation spectrum peak is found to be consistent with that of the optical conductivity spectrum of bilayer graphene, suggesting a new method for detecting 2D material properties that differs from the traditional Electron Energy Loss Spectrum method. In terms of radiation intensity, the pump-induced resonant gain in the optical spectrum increases the far-field radiation by three orders of magnitude. As for radiation directivity, the physical mechanism of better directivity caused by increased particle velocity is revealed. In terms of radiation excitation characteristics, it is found that the far-field photon is obviously excited by high-speed particles, whereas the near-field plasmons favor low-speed electron, and the near-field radiation intensity tends to saturation with the increase of particle velocity. As for the polarization of plasmons, the support of bilayer graphene for TE plasmons with strong confinement is described in this paper theoretically. And this paper improves the confinement of TE plasmons by 5 times based on pump-induced resonant gain which is expected to break the restriction of polarization type of plasmonic applications. In terms of electromagnetic regulation, different from structured electromagnetic environment, this paper creatively expounds how to regulate far-field photon emission by changing the optical properties of 2D materials, field effect and optical doping, for example, providing theoretical guidance for terahertz light source and particle detector based on transition radiation.

**KEY WORDS** Bilayer graphene Transition radiation Far-field radiation regulation Surface plasmon polaritons Terahertz technology

# 目 录

<b>第一章 绪论 .....</b>	1
1.1 背景 .....	1
1.1.1 渡越辐射 (Transition Radiation) .....	1
1.1.2 双层石墨烯 .....	1
1.1.3 基于二维材料的渡越辐射 .....	1
1.2 研究意义 .....	2
1.3 主要研究内容 .....	2
1.4 本文结构 .....	2
<b>第二章 双层石墨烯光导特性 .....</b>	3
2.1 堆叠方式和能带结构 .....	3
2.2 Kubo 机理 .....	4
2.3 K-K 关系 .....	6
2.3.1 因果律 .....	6
2.3.2 希尔伯特变换 .....	7
2.3.3 转化负频响应 .....	8
2.4 结果及讨论 .....	8
2.4.1 光导特点 .....	9
2.4.2 模型有效性 .....	9
2.5 本章小节 .....	9
<b>第三章 辐射电磁模型 .....</b>	10
3.1 运动描述 .....	10
3.2 电磁场求解 .....	11
3.2.1 $z$ 方向分量亥姆霍兹方程 .....	11
3.2.2 边界条件匹配 .....	12
3.2.3 柱坐标下的场量形式 .....	13
3.2.4 索末菲积分 .....	14
3.3 电磁场分布 .....	17
3.4 本章小节 .....	18
<b>第四章 远场：光子辐射 .....</b>	19
4.1 能量角谱与能谱 .....	19
4.2 解析及数值结果 .....	20

4.2.1	解析解 .....	20
4.2.2	强度与定向性 .....	21
4.3	本章小节 .....	23
<b>第五章</b>	<b>近场：等离激元（TM 模）</b> .....	<b>24</b>
5.1	等离激元强度与分布 .....	24
5.1.1	无损色散媒介中的近场能量 .....	24
5.1.2	TM 模等离激元色散 .....	26
5.2	数值结果 .....	27
5.3	TM 等离激元束缚强度 .....	28
5.4	强束缚的 TE 模表面等离激元 .....	30
5.5	本章小节 .....	31
<b>第六章</b>	<b>远场电磁调控</b> .....	<b>32</b>
6.1	温度 .....	32
6.2	光泵激发（光掺杂） .....	32
6.3	场效应 .....	33
6.4	调控准则 .....	34
6.5	本章小节 .....	34
<b>第七章</b>	<b>展望渡越辐射</b> .....	<b>35</b>
7.1	本文贡献 .....	35
7.2	基础辐射机理与应用 .....	35
7.3	电子运动方式 .....	36
7.4	结构化电磁环境 .....	36
7.4.1	二维材料 .....	36
7.4.2	光子晶体 .....	36
7.4.3	(双) 各向异性介质板 .....	36
<b>参考文献</b>	.....	<b>38</b>
<b>致谢</b>	.....	<b>42</b>
<b>附录</b>	.....	<b>43</b>
附录 1 单层石墨烯光导 .....	43	
附录 2. 求解双层石墨烯光导的另一方式 <sup>[36]</sup> .....	43	

# 第一章 绪论

## 1.1 背景

### 1.1.1 渡越辐射 (Transition Radiation)

作为一种典型的辐射过程，渡越辐射 (TR) [1-3]在 1945 年被诺贝尔物理学奖得主 Vitaly Ginzburg 教授和 Ilya Frank 教授理论提出，在 1959 年得到实验验证<sup>[4]</sup>。当带电粒子在空间非均一介质中运动（例如穿过单层界面）时会产生渡越辐射，近场电磁波以表面等离激元形式存在，远场以光子形式辐射。不同于切伦科夫辐射<sup>[5-7]</sup> (Cherenkov Radiation) 对粒子速度  $v$  的阈值限制 ( $v > \frac{c}{n}$ , 即：粒子速度大于介质中光的相速度,  $c$  为真空光速,  $n$  为介质折射率)，渡越辐射对粒子速度没有要求，并且结合周期性微纳结构<sup>[8]</sup>或周期性电子流<sup>[9-11]</sup>，可以激发强度更强，方向性更高的共振（相干）渡越辐射<sup>[12]</sup>。因此，渡越辐射可被用作微波段，太赫兹<sup>[13]</sup>到 X 射线波段<sup>[14,15]</sup>的辐射源。

另一方面，对于实物带电粒子激发的渡越辐射，单位面积远场（光子）辐射能量正比于洛伦兹因数  $\gamma$  ( $\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ )，于是基于渡越辐射的高能粒子探测仪<sup>[16]</sup>应运而生。对于超出切伦科夫探测仪<sup>[17]</sup>有效探测范围的高能粒子，渡越辐射探测仪能实现有效探测。由于没有速度阈值，渡越辐射探测仪对介质材料的选取更为灵活，与介质作用较短距离即可产生高定向性的辐射，为实现更高的集成度提供了更多材料选择。

### 1.1.2 双层石墨烯

单层或少层的二维材料<sup>[18]</sup>较其三维体材料可以获得许多新的特性。如单层石墨烯<sup>[19]</sup>作为碳原子的二维结晶聚合物，激发光谱具有线性特点和手性对称性，以及极强的电子迁移率等独特的电学和晶体特性，使之成为纳米电子学和光子学等众多领域实验、理论研究的热点。

双层石墨烯<sup>[20]</sup>可用二维材料模型描述，聚合方式分为 A-A 和 A-B(Bernal Stacking) 两种，其中 A-A 堆叠处于亚稳态<sup>[21]</sup>，A-B 堆叠双层石墨烯更为稳定，被更为广泛的用于实验当中。Edward McCann<sup>[22]</sup>2006 年提出了有效的紧束缚模型描述双层石墨烯的能带结构，进而后续研究基于 Kubo 机理得出 A-B 双层石墨烯的表面电导率<sup>[23]</sup>，在实验中得到印证。研究<sup>[24-26]</sup>表明，在兼有单层石墨烯良好光学特性的基础上，双层石墨烯带隙差可以通过表面层间压降实现在 0.1 eV~0.3 eV 范围内线性可调，进而在光谱上出现可调的吸收峰<sup>[27-29]</sup>，另外，由于光激发可以产生谐振增益，为新型太赫兹器件和碳基量子点<sup>[30]</sup>与晶体管<sup>[31,32]</sup>提供了应用前景。

基于双层石墨烯独特的光导特性，其表面等离激元特性有许多新奇的发现，如实验上，在中红外区由于层间光子耦合会引发的新的等离子体激元模式<sup>[33]</sup>以及可调的光学透明性窗口<sup>[34,35]</sup>。理论上，基于光泵激发的非稳态双层石墨烯<sup>[36]</sup>，对在带隙差附近具有谐振增益的（群速度）超光速等离子激元进行了预测，为基于表面等离子体激元的放大器和激光<sup>[37]</sup>提供了应用前景。

### 1.1.3 基于二维材料的渡越辐射

电子束能实现在纳米级的精确的空间控制，这为研究高速电子与二维材料<sup>[38]</sup>（或其异质结<sup>[39]</sup>）的相互作用提供了高效的研究手段，电子被广泛用于二维材料表面等离激元特性<sup>[40]</sup>的研究当中，例如电子能量损失谱法（EELS）<sup>[41-43]</sup>中将高速电子作为探测源。另一个角度看，二维材料灵活可调<sup>[44]</sup>的光学特性也为实现更为灵活可控的渡越辐射的控制提供了平台。

## 1.2 研究意义

双层石墨烯（Bilayer graphene）和单层石墨烯（Monolayer graphene）都具有典型二维材料的独特光学特性，但是前者独有的场效应<sup>[45]</sup>控制的带隙差、层间光子耦合产生的光谱吸收峰以及光掺杂引发的共振增益等，为从材料本身实现对于渡越辐射调控提供了一个有前景的平台。另外，受不同光激发强度的准平衡态双层石墨烯<sup>[36]</sup>带来不同的谐振增益，也为实现辐射强度的调控提供了条件。同时，准平衡态双层石墨烯较大的光导虚部，使实现强束缚的TE模<sup>[46]</sup>的表面等离激元成为可能。

在麦克斯韦电磁学框架下，单个快电子激发单层石墨烯的表面等离激元和远场光子的机理<sup>[47]</sup>已经得到研究，但是如何对渡越辐射实现有效的强度、方向控制值得更进一步的研究。结构化的电磁环境能够对辐射的方向性、强度进行调控，但是其设计周期长，实验动态性差，因此如何通过改变二维材料本身的光学特性对渡越辐射实现调控具有重要意义。

## 1.3 主要研究内容

本文在数值求解双层石墨烯光导的前提下，基于麦克斯韦方程组解析得出电磁场分布以及远、近场能谱特性，揭示了近、远场激发的机理与特点。进而研究温度、带隙差、载流子倒置态化学势和电子散射率（电子弛豫时间）等参数对远场辐射强度的影响，为实现调节二维材料本身光导特性对远场电磁波进行调控提供理论指导。本文首次将增益界面纳入渡越辐射的研究范围，为渡越辐射提供了崭新的机理。

## 1.4 本文结构

第一章阐述基于二维材料的渡越辐射的研究背景及意义。第二章利用紧束缚近似得到双层石墨烯的能带结构并基于 Kubo 机理得出其光导特性。第三章在麦克斯韦方程组的经典电磁学框架下，利用平面波展开法并构造索末菲积分路径解析计算了频域电磁场分布。第四、五章基于波印亭定理得出远、近场能谱。第六章从理论上得出利用双层石墨烯光导实现对远场辐射进行调控的准则，为实现太赫兹至光波段的可调光源、高速粒子探测器提供理论基础；第七章对渡越辐射广阔的研究、应用前景进行进行了展望。

## 第二章 双层石墨烯光导特性

本章以求解双层石墨烯为主线，从堆叠方式切入，利用紧束缚模型对双层石墨烯的能带结构进行描述，进而利用多体物理中著名的 Kubo 公式架起光导与能带机构的桥梁。进而，利用电磁材料本身的因果律约束，基于 K-K 关系求得光导虚部，完备了双层石墨烯的光导。为后续电磁辐射机理的研究提供了材料参数的基础与前提。由于 A-A 堆叠双层石墨烯处于亚稳态<sup>[21]</sup>，本章只考虑 A-B 堆叠双层石墨烯。

### 2.1 堆叠方式和能带结构

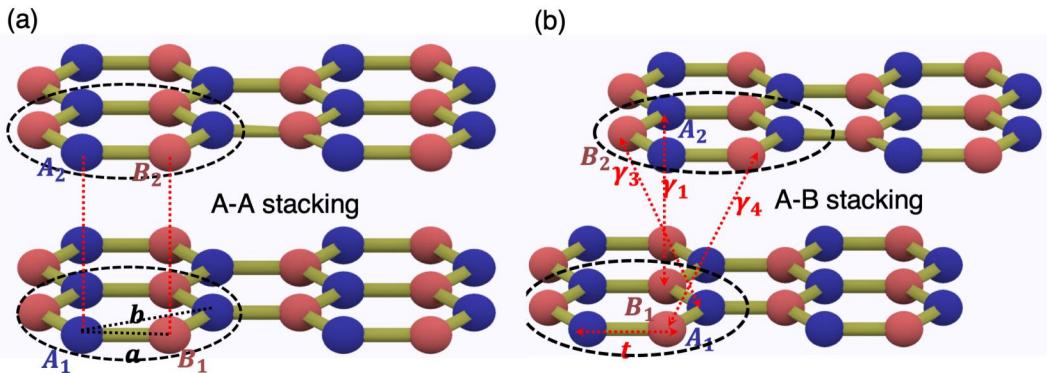


图 2-1(a) A-A 堆叠：紧邻距离  $a$ , 晶格常数  $b$ ; (b) A-B 堆叠：原子间跃迁能  $t$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_3$ ,  $\gamma_4$ 。

为得出双层石墨烯的光导特性，本文先研究其能带结构。A-B 堆叠中<sup>[19]</sup>，每层石墨烯由三角晶格组成，上层 A 基元与下层 B 基元对应相连，其他基元在下层六边形中央上方如图 2-1 所示。(A-A 堆叠中，层间原子空间上一一对应。)

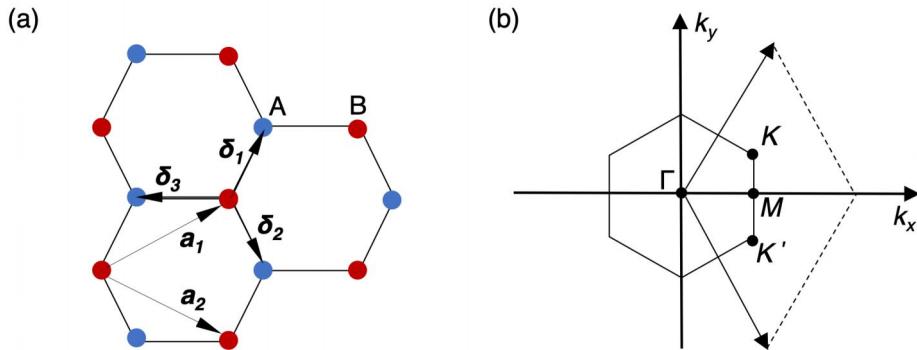


图 2-2 单层石墨烯晶格及布里渊区(a)石墨烯六角晶格；(b)布里渊区,狄拉克锥位于  $K$  和  $K'$

电场作用下双层石墨烯打开带隙  $\Delta$ ，基于紧束缚近似，单自旋哈密顿量为：

$$H = -t \sum_{n,\delta} (a_{1,n+\delta}^\dagger b_{1,n} + H.c.) - t \sum_{n,\delta'} (a_{2,n}^\dagger b_{2,n+\delta'} + H.c.) + \gamma_1 \sum_n (a_{2,n}^\dagger b_{1,n} + H.c.) - \frac{\Delta}{2} \sum_n (a_{1,n+\delta_1}^\dagger a_{1,n+\delta_1} + b_{1,n}^\dagger b_{1,n}) + \frac{\Delta}{2} \sum_n (a_{2,n}^\dagger a_{2,n} + b_{2,n+\delta'_1}^\dagger b_{2,n+\delta'_1}) \quad (2-1)$$

其中，前两项表示层内电子最近邻跃迁项， $t$ 约为 2.8 eV，下标 2、1 表示上、下层，第三项表示层间耦合  $\gamma_1$ （约 0.39 eV），忽略  $\gamma_3$ （约 0.315 eV）， $\gamma_4$ （约 0.04 eV），最后两项表示，层 1 能量降低  $\frac{\Delta}{2}$ ，层 2 提高  $\frac{\Delta}{2}$ 。

式中算符： $a_{m,n}^\dagger$  ( $b_{m,n}^\dagger$ ) 表示在  $m$  层双层石墨烯基元  $A_m$  ( $B_m$ ) 的位矢  $\mathbf{n}$  处产生一个电子， $a_{m,n}$  ( $b_{m,n}$ ) 表示在第  $m$  层双层石墨烯基元  $A_m$  ( $B_m$ ) 的  $n$  处湮灭一个电子。*H.c.* 表示另一项的厄米共轭，如  $a_{1,n+\delta}^\dagger b_{1,n} + H.c. = a_{1,n+\delta}^\dagger b_{1,n} + a_{1,n+\delta} b_{1,n}^\dagger$ 。位矢  $\boldsymbol{\delta}$  表示在位矢  $\mathbf{n}$  处指向最近邻原子的矢量如图 2-2 示，且  $\boldsymbol{\delta}'_i = -\boldsymbol{\delta}_i$ 。

利用哈密顿变换  $\hat{H} = \sum_k \Psi^\dagger(k) H \Psi(k)$ ，本征向量  $\Psi(k) = (a_{1,k}, b_{2,k}, a_{2,k}, b_{1,k})$ ，得到  $\mathbf{k}$  空间哈密顿量为：

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & 0 & 0 & \phi^*(\mathbf{k}) \\ 0 & \frac{\Delta}{2} & \phi(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \phi^*(\mathbf{k}) & \frac{\Delta}{2} & \gamma_1 \\ \phi(\mathbf{k}) & 0 & \gamma_1 & -\frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} \quad (2-2)$$

其中  $\phi(\mathbf{k}) = -t \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\delta} = -t \sum_{\delta'} e^{-i\mathbf{k}\delta'}$ 。双层石墨烯的能带结构<sup>[22]</sup>由  $\hat{H}$  的本征值定义如下：

$$\epsilon_\alpha^2(k) = \frac{\gamma^2}{2} + \frac{\Delta^2}{4} + |\phi(k)|^2 + (-1)^\alpha \sqrt{\left( \frac{\gamma^4}{4} + |\phi(k)|^2 (\gamma^2 + \Delta^2) \right)} \quad (2-3)$$

其中  $\alpha$  可取 1, 2，在这四个能带中， $\pm \epsilon_1(k)$  表征低能修正下的原始石墨烯低能带， $\pm \epsilon_2(k)$  反映了基元  $A_2$  和  $B_1$  之间的二聚键（跃迁能  $\gamma_1$ ），由于主要的低能物理发生在石墨烯布里渊区两个不等价的  $K$  和  $K'$  点， $\phi(\mathbf{k})$  可以在连续介质近似中围绕  $K$  点展开为  $\phi(\mathbf{k}) = \hbar v_F \mathbf{k}$ ，其中  $v_F = \sqrt{3}tb/(2\hbar)$ 。值得注意的是，由场效应<sup>[45]</sup>线性控制的带隙  $\Delta$  为频率独立的光导特性带来了独特的丰富的结构和可控性。

## 2.2 Kubo 机理

进一步，基于 Kubo 公式<sup>[48]</sup>，本文对石墨烯电导率实部进行求解。定义格林函数  $\hat{G}$  如下：

$$\hat{G}^{-1} = z\hat{I} - \hat{H} = \begin{pmatrix} z + \frac{\Delta}{2} & 0 & 0 & \phi^*(\mathbf{k}) \\ 0 & z - \frac{\Delta}{2} & \phi(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \phi^*(\mathbf{k}) & z - \frac{\Delta}{2} & \gamma_1 \\ \phi(\mathbf{k}) & 0 & \gamma_1 & z + \frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} \quad (2-4)$$

其中  $z = i\omega_n$ ,  $\omega_n = \pi T(2n + 1)$  为费米子松原频率  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ,  $T$  为开尔文温度, 为求解光导, 本文对  $G_{11}$ ,  $G_{22}$ ,  $G_{33}$ ,  $G_{44}$ ,  $G_{13}$ ,  $G_{24}$ , 对式(2-4)求逆, 得:

$$\begin{aligned} G_{11} &= \frac{(\Delta - 2z)(\Delta^2 + 4\gamma^2 - 4z^2) - 4|\phi(k)|^2(\Delta + 2z)}{8(z^2 - \epsilon_1^2)(z^2 - \epsilon_2^2)} \\ G_{44} &= \frac{(\Delta - 2z)[(\Delta - 2z)^2 - 4|\phi(k)|^2]}{8(z^2 - \epsilon_1^2)(z^2 - \epsilon_2^2)} \\ G_{13} &= \frac{(2z - \Delta)\gamma\phi(k)}{2(z^2 - \epsilon_1^2)(z^2 - \epsilon_2^2)} \end{aligned} \quad (2-5)$$

由关系  $G_{22}(\Delta) = G_{11}(-\Delta)$ ,  $G_{33}(\Delta) = G_{44}(-\Delta)$ ,  $G_{24}(\Delta, \phi) = G_{13}(-\Delta, \phi^*)$  得出剩余项。下遵循标准 Kubo 公式流程计算电导  $\sigma_{\alpha\beta}$ :

$$\sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{\text{Im}[\Pi_{\alpha\beta}(\Omega + i0^+)]}{\Omega} \quad (2-6)$$

其中  $\alpha, \beta$  为空间方向, 可取  $x, y, z$ , 本文关心平行于石墨烯平面 ( $z = 0$  平面) 的纵电导即,  $\sigma_{zz}$ 。 $\Pi_{\alpha\beta}(\Omega + i0^+)$  为迟滞电流-电流作用方程(极化方程), 可由松原公式<sup>[48]</sup>得出:

$\Pi_{\alpha\beta}(iv_m) = -\int_0^{1/T} d\tau e^{iv_m\tau} \langle T_\tau J_\alpha(\tau)J_\beta(0) \rangle$ ,  $\tau$  为虚时间,  $T_\tau$  为排序算子,  $v_m = 2\pi mT$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ,  $J_\alpha(\tau) = \sum_n j_\alpha^P(\tau, n)$  为电流算符。为计算  $j_\alpha^P(\tau, \mathbf{n})$ , 通过皮尔斯替换<sup>[49]</sup>(Peierls substitution) 关联哈密顿量  $a_{1,n+\delta}^\dagger b_{1,n} \rightarrow a_{1,n+\delta}^\dagger e^{-\frac{ie}{\hbar} \int_n^{n+\delta} dr \cdot A} \mathbf{b}_{1,n}$ 。且  $j_{\alpha P}(\mathbf{n}) = -\frac{\partial H}{\partial(A_\alpha(\mathbf{n}))}$ , 对  $A$  作一阶泰勒展开得  $a_{1,n+\delta}^\dagger b_{1,n} \rightarrow a_{1,n+\delta}^\dagger e^{-\frac{ie}{\hbar} A \delta} \mathbf{b}_{1,n}$ , 所以可得:

$$j_\alpha^P(\mathbf{n}) = -\frac{ite}{\hbar} \sum_{\delta} (\delta)_\alpha (a_{1,n+\delta}^\dagger b_{1,n} - H.c.) + \frac{ite}{\hbar} \sum_{\delta'} (\delta')_\alpha (a_{2,n}^\dagger b_{2,n+\delta'} - H.c.) \quad (2-7)$$

傅立叶变换至  $\mathbf{k}$  域并对  $\mathbf{n}$  求和, 得总顺磁电流算子为  $J_\alpha(\mathbf{k}) = -e \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger \hat{v}_\alpha \Psi$ , 且:

$$\hat{v}_\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & v_{\alpha k}^* \\ 0 & 0 & v_{\alpha k} & 0 \\ 0 & v_{\alpha k}^* & 0 & 0 \\ v_{\alpha k} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2-8)$$

其中:  $v_{\alpha k} = -\left(\frac{it}{\hbar}\right) \sum_{\delta} (\delta)_\alpha e^{ik \cdot \delta} = \frac{\nabla \phi(\mathbf{k})}{\hbar}$ , 因此, 可化简极化函数:

$$\prod_{\alpha\beta} (iv_m) = e^2 T \sum_{i\omega_n} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \text{Tr} [\hat{v}_\alpha \hat{G}(i\omega_n + iv_m, \mathbf{k}) \hat{v}_\beta \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k})] \quad (2-9)$$

或将格林函数展开(形式类似希尔伯特变换)成谱函数

$$G_{ij}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{A_{ij}(\omega')}{2\pi(z - \omega')} \quad (2-10)$$

在单频点展开谱函数:

$$A_{ij}(\omega, \Delta) = \sum_{\alpha=1,2} [a_{ij}(\alpha, \Delta) \delta(\omega - \epsilon_\alpha) + a_{ij}(\alpha, -\Delta) \delta(\omega + \epsilon_\alpha)] \quad (2-11)$$

联立式(2-5), (2-10), (2-11), 得:

$$\begin{aligned}
a_{11}(\alpha, \Delta) &= \frac{(-1)^{(\alpha+1)}\pi}{\epsilon_2^2 - \epsilon_1^2} \left( \left[ \left( \frac{\Delta}{2} \right)^2 + \gamma_1^2 - \epsilon_\alpha^2 \right] \left( 1 - \frac{\Delta}{2\epsilon_\alpha} \right) + |\phi(\mathbf{k})|^2 \left( 1 + \frac{\Delta}{2\epsilon} \right) \right) \\
a_{44}(\alpha, \Delta) &= \frac{(-1)^{(\alpha+1)}\pi}{\epsilon_2^2 - \epsilon_1^2} \left( \left[ \left( \frac{\Delta}{2} \right)^2 - \epsilon_\alpha^2 \right] \left( 1 - \frac{\Delta}{2\epsilon_\alpha} \right) + |\phi(\mathbf{k})|^2 \left( 1 + \frac{\Delta}{2\epsilon} \right) \right) \quad (2-12) \\
a_{13}(\alpha, \Delta) &= \frac{(-1)^\alpha\pi}{\epsilon_2^2 - \epsilon_1^2} \left( 1 - \frac{\Delta}{2\epsilon_\alpha} \right) \gamma_1 \phi(\mathbf{k})
\end{aligned}$$

进而：

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{2\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} [f(E) - f(E + \hbar\omega)] \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \text{Tr} [\hat{v}_\alpha \hat{A}(E + \hbar\omega, \mathbf{k}) \hat{v}_\beta \hat{A}(E, \mathbf{k})] \quad (2-13)$$

其中， $f(E) = \left( e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1 \right)^{-1}$  为费米-狄拉克分布 (Fermi-Dirac Distribution)， $k_B$  为玻尔兹曼常数 (Boltzmann constant)， $\mu$  为化学势 (Chemical Potential)。当双层石墨烯处于在非稳态，如光泵激发下，电子-空穴对处于载流子倒置态，各占一费米能级  $\mu_e$  和  $\mu_h$  (对电中性系统， $\mu_e = -\mu_h$ )，利用准平衡分布  $n_F(\dots)$  替换  $f(\dots)$ ：

$$n_F(E) = \theta(E)f(E - \mu_e) + \theta(-E)f(E - \mu_h) \quad (2-14)$$

其中  $\theta(E)$  为单位阶跃函数 (Heaviside step function)。进一步化简得到 A-B 堆叠双层石墨烯光导实部：

$$\begin{aligned}
\text{Re}[\sigma_s] &= \frac{e^2}{2\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} [f(E) - f(E + \hbar\omega)] \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} |\nu_k|^2 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \\
&\begin{pmatrix} A_{11}(E, \Delta)A_{44}(E + \hbar\omega, \Delta) + A_{44}(E, \Delta)A_{11}(E + \hbar\omega, \Delta) \\ A_{11}(E, -\Delta)A_{44}(E + \hbar\omega, -\Delta) + A_{44}(E, -\Delta)A_{11}(E + \hbar\omega, -\Delta) \\ 2A_{13}(E, \Delta)A_{13}^*(E + \hbar\omega, -\Delta) + 2A_{13}^*(E, -\Delta)A_{13}(E + \hbar\omega, \Delta) \end{pmatrix} \quad (2-15)
\end{aligned}$$

其中  $A_{ij}(\omega, \Delta)$  由式(2-11)定义。值得说明的是，此模型利用狄拉克函数的洛伦兹展开刻画石墨烯中电子散射率：

$$\delta(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{\omega^2 + \eta^2}, \quad \frac{1}{\tau_{imp}} = 2\eta \quad (2-16)$$

$\tau_{imp}$  为强度调制光电流光谱 (Intensity-modulated photocurrent spectroscopy) 反映的电子平均运输时间，在一些工作中称为电子弛豫时间。

## 2.3 K-K 关系

表面电导率满足 Kramers-Krönig relations:

$$\sigma_{SI}(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} d\alpha \frac{\sigma_{SR}(\alpha) - \sigma_{S\infty}}{\alpha^2 - \omega^2} \quad (2-17)$$

其中  $\mathcal{P}$  为柯西主值积分。综上，A-B 堆叠结构双层石墨烯表面电导率由式(2-15), (2-17) 解析表出，进行数值计算得出结果见图 2-4，下对光导 K-K 关系推导。

### 2.3.1 因果律

首先研究复介电常数的实部与虚部,  $\bar{D}(t)$ 可以看作 $\bar{E}(t)$ 经过系统 $\epsilon(t)$ 的线性响应  
 $\bar{D}(t) = \int_{-\infty}^t d\tau \epsilon(t-\tau) \bar{E}(\tau) = \int_0^\infty d\tau \epsilon(\tau) \bar{E}(t-\tau)$ , 傅立叶变换至频域:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \bar{D}(\omega) e^{-i\omega t} &= \int_0^{\infty} d\tau \epsilon(\tau) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \bar{E}(\omega) e^{-i\omega(t-\tau)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[ \int_0^{\infty} d\tau \epsilon(\tau) e^{i\omega\tau} \right] \bar{E}(\omega) e^{-i\omega t} \end{aligned} \quad (2-18)$$

观察电磁场对因子 $e^{-i\omega t}$ 的依赖性, 定义 $\epsilon(\omega)$ 为:

$$\epsilon(\omega) = \int_0^{\infty} d\tau \epsilon(\tau) e^{i\omega\tau} \quad (2-19)$$

注意到,  $\tau$ 的积分下限为 0, 这是由于因果律的体现, 且由式(2-19)不难得到,  $\epsilon(-\omega) = \epsilon^*(\omega)$ , 分离实部和虚部, 亦即:

$$\epsilon_R(-\omega) = \epsilon_R(\omega), \epsilon_I(-\omega) = -\epsilon_I(\omega) \quad (2-20)$$

同理, 双各向异性材料的本构参数在因果律的约束下均满足共轭对称。

基于介电常数, 联立欧姆定律 $\bar{J}_c = \bar{\sigma} \cdot \bar{E}$ 和麦克斯韦方程 $\nabla \times \bar{H} = -i\omega \bar{D} + \bar{J}_c + \bar{J}_f$ 得:

$$\nabla \times \bar{H} = -i\omega [\bar{\epsilon} + \frac{i}{\omega} \bar{\sigma}] \cdot \bar{E} - i\omega \bar{\xi} \cdot \bar{H} + \bar{J}_f \quad (2-21)$$

从而 $\bar{\epsilon}_c = \bar{\epsilon} + i \frac{\bar{\sigma}}{\omega}$ , 即:  $\bar{\sigma}$ 满足形如(2-19)的因果律, 同时取二维极限,  $\bar{\sigma}$ 约化为面电导, 定义:

$$\sigma_s(\omega) = \int_0^{\infty} d\tau \sigma_s(\tau) e^{i\omega\tau} \quad (2-22)$$

由上定义式不难得出 $\sigma_s$ 也满足共轭对称 $\sigma_s(-\omega) = \sigma_s^*(\omega)$ 且 $\sigma_s(i\omega_I) = \sigma_s^*(i\omega_I)$ 。

### 2.3.2 希尔伯特变换

由 $\sigma_s(\omega)$ 定义式, 得 $\sigma_s(\omega_R + i\omega_I) = \int_0^{\infty} d\tau \sigma_s(\tau) e^{i\omega_R\tau} \cdot e^{-\omega_I\tau}$ ,  $e^{-\omega_I\tau}$ 为衰减因子,  $e^{i\omega_R\tau}$ 为振荡因子, 不难得出在 $\omega$ 平面上半部分 $|\sigma_s(\omega) - \sigma_{s\infty}|$ 呈指数衰减至 0, 因此在 $\omega$ 上半平面解析, 这是因果律 $\tau > 0$ 作用的直接结果。

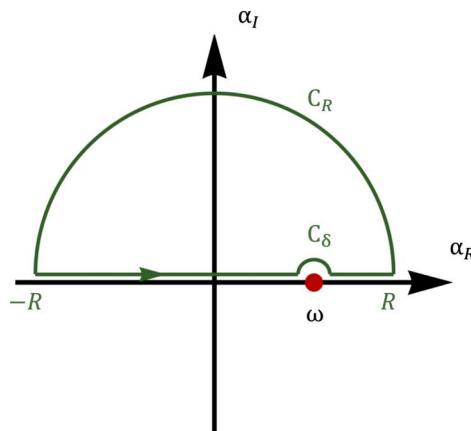


图 2-3 推导 K-K 关系的积分路径,  $R \rightarrow \infty$ ,  $\delta \rightarrow 0^+$ 。

构造曲线积分  $\oint_C d\alpha \frac{\sigma_s(\alpha) - \sigma_{s\infty}}{\alpha - \omega}$ , 由柯西定理:

$\left( \oint_{C_\delta} d\alpha + \oint_{C_R} d\alpha + \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \right) \frac{\sigma_s(\alpha) - \sigma_{s\infty}}{\alpha - \omega} = 0$ , 其中: 对第一项, 令  $\alpha = \omega + \delta e^{i\theta}$ , 则  
 $\lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \oint_{C_\delta} d\alpha \frac{\sigma_s(\alpha) - \sigma_{s\infty}}{\alpha - \omega} = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \int_{\pi}^0 d\theta \frac{\sigma_s(\omega + \delta e^{i\theta}) - \sigma_{s\infty}}{\delta e^{i\theta}} \times (i\delta e^{i\theta}) = -i\pi [\sigma_s(\omega) - \sigma_{s\infty}]$ , 对第二项, 由约当引理<sup>[50]</sup>,  $\oint_{C_R} d\alpha \frac{\sigma_s(\alpha) - \sigma_{s\infty}}{\alpha - \omega} = 0$ , 得:  $\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{\sigma_s(\alpha) - \sigma_{s\infty}}{\alpha - \omega} - i\pi [\sigma_s(\omega) - \sigma_{s\infty}] = 0$ , 且利用  $\sigma_{s\infty} = \sigma_{sR\infty}$ , 即:  $\sigma_{sI\infty} = 0$ , 则:

$$\begin{aligned} \sigma_{sR}(\omega) - \sigma_{s\infty} &= \mathcal{H}(\sigma_{sI}(\alpha)) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{\sigma_{sI}(\alpha)}{\alpha - \omega} \\ \sigma_{sI}(\omega) &= -\mathcal{H}(\sigma_{sR}(\alpha) - \sigma_{s\infty}) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{\sigma_{sR}(\alpha) - \sigma_{s\infty}}{\alpha - \omega} \end{aligned} \quad (2-23)$$

其中,  $\mathcal{H}$  表示由  $\alpha$  域到  $\omega$  域的希尔伯特变换。上式即为联系满足因果律关系的电磁参数实部与虚部的关系, 被称为 K-K 关系, 其数学本质为具有因果关系的平方可积函数的希尔伯特变换。

### 2.3.3 转化负频响应

在求解光导过程中, 由于共轭对称性质的约束, 正频响应决定了负频响应  $\sigma_s(-\omega) = \sigma_s^*(\omega)$ , 即:  $\sigma_{sR}(-\omega) = \sigma_{sR}(\omega)$ ,  $\sigma_{sI}(-\omega) = -\sigma_{sI}(\omega)$ , 进而对负频部分进行转化 (被积函数同乘  $(\alpha + \omega)$  并利用共轭对称性 (实部偶函数, 虚部奇函数)):  $\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{\sigma_{sI}(\alpha)}{\alpha - \omega} = \frac{1}{\pi} \left( \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{\alpha \sigma_{sI}(\alpha)}{\alpha^2 - \omega^2} + \frac{\omega \sigma_{sI}(\alpha)}{\alpha^2 - \omega^2} \right) = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} d\alpha \frac{\alpha \sigma_{sI}(\alpha)}{\alpha^2 - \omega^2}$ , 得:

$$\sigma_{sR}(\omega) - \sigma_{s\infty} = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{\infty} d\alpha \frac{\alpha \sigma_{sI}(\alpha)}{\alpha^2 - \omega^2} \quad (2-24)$$

同理可得其对偶项式(2-17)。

## 2.4 结果及讨论

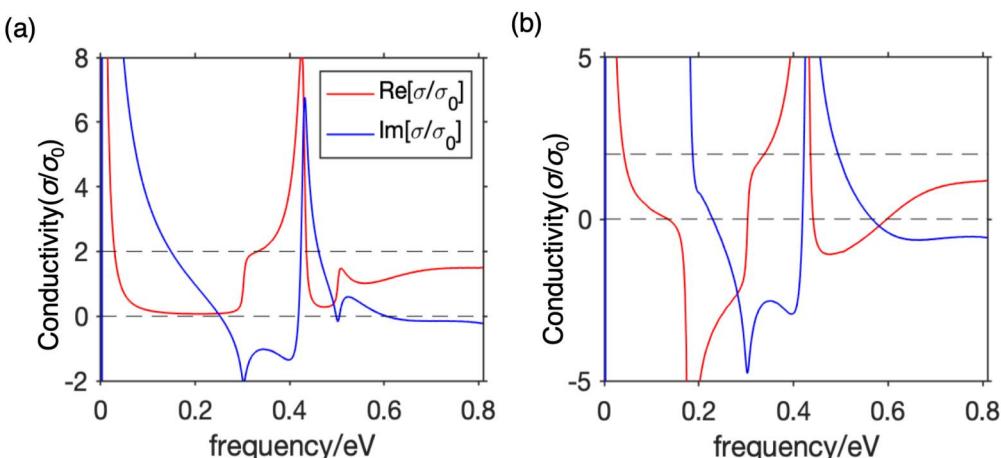


图 2-4A-B 型双层石墨烯光导。  $\sigma_0 = e^2/(4\hbar)$ ,  $T=300$  K, 电子色散率  $\eta = 10/(2\pi)$  mV, 非对称带隙

$\Delta = 0.2 \text{ eV}$ 。 (a) 电子空穴费米能级  $\mu_e = \mu_h = 0.3 \text{ eV}$ ; (b) 处于载流子倒置态  $\mu_e = -\mu_h = 0.3 \text{ eV}$ 。

### 2.4.1 光导特点

如图 2-4(a)所示, 不同于单层石墨烯, 掺杂 A-B 型石墨烯在外加电场作用下打开 0.2 eV 带隙差时, 在  $\hbar\omega \approx \gamma_1$  处存在吸收峰, 可归结为两层导带相差  $\gamma_1$ , 而由于  $\Delta$  的存在, 使得该吸收峰与  $\gamma_1$  存在略微偏移, 并且将此峰拓宽到  $\hbar\omega \pm \frac{\Delta}{2}$  范围。在光激发后的载流子倒置准平衡态, 处于  $\Delta \lesssim \hbar\omega \lesssim \mu_e - \mu_h$ , 且在  $\gamma_1$  附近的吸收峰仍然存在, 二者综合效果。如上图(b)所示, 在  $\Delta$  附近有很高的谐振增益。

### 2.4.2 模型有效性

明尼苏达大学 Tony Low<sup>[33]</sup>教授对 A-B 型石墨烯光导采用另一更为简洁的表达形式:

$$\sigma_{\alpha\alpha}(q, \omega) = -i \frac{g\hbar e^2}{(2\pi)^2} \sum_{nn'} \int d\mathbf{k} \frac{f(E_{n\mathbf{k}}) - f(E_{n'\mathbf{k}'})}{E_{n\mathbf{k}} - E_{n'\mathbf{k}'}} \times \frac{|\langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{v}_\alpha | \Psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle|^2}{E_{n\mathbf{k}} - E_{n'\mathbf{k}'} + \hbar\omega + i\eta} \quad (2-25)$$

其中  $g = g_s g_v$  为简并度、旋简并与谷简并之积。 $\Psi_{n\mathbf{k}}$  为波函数,  $E_{n\mathbf{k}}$  为能量本征值, 可由对角化  $\hat{H}$  得到。 $\eta = \hbar/\tau_e$ ,  $\tau_e$  为电子弛豫时间。不同的是, 本文引入格林函数及狄拉克函数的洛伦兹展开描述电子散射率, 本文将图 2-4 (下称复现图) 与 Tony Low 教授的工作<sup>[36]</sup> (见附录 2) (下称原图) 进行对比验证发现:

复现图  $\eta$  与原图相差  $2\pi$  倍, 观察实部, 原图更为“陡峭”, 观察虚部, 变化趋势十分一致, 在大于  $\gamma_1$  范围强度上差别明显, 由于复现图的虚部基于实部由 K-K 关系得出, 这种“放大”的差别来自于  $\gamma_1$  处吸收峰强度差。原因在于两种模型描述阻尼 (散射) 的近似方式不同, 相差  $2\pi$  倍 (差  $2\pi$  倍只是猜想, 另一种有依据的猜想是 Tony Low 教授参数参数写错了, 通过对比文献<sup>[33,36]</sup>中双层石墨烯光导发现, 虽然 Tony Low 教授选取了相同的阻尼常数, 但其阻尼程度并不自洽)。但都是近似, 在  $\eta$  较小时, 二者差别可以忽略, 本文的代码所基于的模型是有效、可用的。当  $\eta$  较大时, 需要引入自能量。

另外, 两种模型都未涉及层间光子耦合导致的吸收峰 (0.2 eV 左右), 因为理论尚未完善仍然存在争议。

值得说明的是, 虽然本文模型引入格林函数对光导的表达式不够简洁, 但计算复杂度上具有更大的优势。观察到矩阵的对称共轭特点, 将  $4 \times 4$  矩阵的对角化, 简化为格林函数矩阵中 3 个元素的求解, 计算量减小了一倍以上。

## 2.5 本章小节

本章详细阐述如何基于 Kubo 机理得出双层石墨烯的光导特性。首先利用紧束缚近似模型得出能带结构, 进而代入 Kubo 公式, 利用谱展开等方法得出光导实部, 从而利用 K-K 关系以及因果律得出正频范围内光导虚部。最后对双层石墨烯光导进行分析, 并且通过对比标准已发表权威刊物得出本文光导模型的可靠性, 并且将计算量减小一倍以上。

### 第三章 辐射电磁模型

本章在第二章求得双层石墨烯光导的基础上，将其置于前后向介质界面处进行修饰，进而建立高速电子穿过双层石墨烯的渡越辐射模型。利用平面波展开，纵向分量表达电磁场的完备性和索末菲积分等方法对电磁场进行求解。

#### 3.1 运动描述

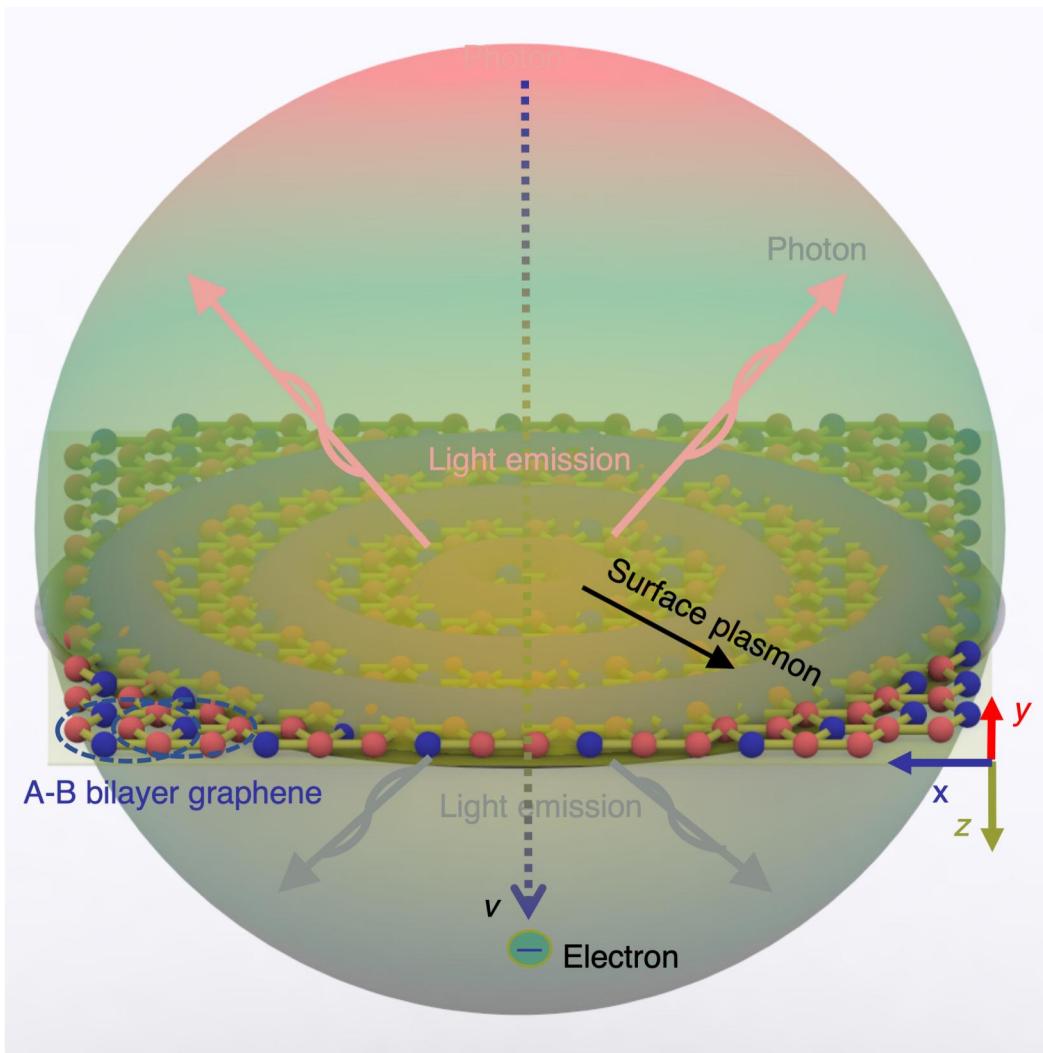


图 3-1 模型示意图：电子以速度  $v$  垂直入射 2D 材料 AB 型双层石墨烯 ( $z = 0$  平面) 激发远场光子和近场表面等离激元。

如图 3-1，电子（电荷量为  $q = -e$ ）以恒定速度  $v$  穿过位于  $z = 0$  表面电导为  $\sigma_s(\omega)$  的 A-B 双层石墨烯，介质 1 ( $z < 0$ ) 和介质 2 ( $z > 0$ ) 的相对磁导率和相对介电常数分别为  $\mu_{r,1}$ ,  $\epsilon_{r,1}$  和  $\mu_{r,2}$ ,  $\epsilon_{r,2}$ , 真空磁导率  $\mu_0$ , 真空介电常数  $\epsilon_0$ , 电荷  $q$  产生的电流密度为：

$$\vec{J}_z^q(\bar{r}, t) = \hat{z} q v \delta(x) \delta(y) \delta(z - vt) \quad (3-1)$$

在此运动情景中，电磁场对时间是调谐的，在垂直电子轨迹运动方向是均一的，所以将  $t$ ,  $\bar{r}_\perp$  作傅立叶变换到  $\omega$ ,  $\bar{k}_\perp$ :

$$\begin{aligned}\bar{J}_z^q(\bar{r}, t) &= \int d\omega d\bar{k}_\perp \bar{J}_{\bar{k}_\perp, \omega}^q(z) e^{i\bar{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp - i\omega t} \\ \bar{E}(\bar{r}, t) &= \int d\omega d\bar{k}_\perp \bar{E}_{\bar{k}_\perp, \omega}(z) e^{i\bar{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp - i\omega t} \\ \bar{H}(\bar{r}, t) &= \int d\omega d\bar{k}_\perp \bar{H}_{\bar{k}_\perp, \omega}(z) e^{i\bar{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp - i\omega t}\end{aligned}\quad (3-2)$$

其中,  $\bar{k}_\perp = (k_x, k_y, 0)$ ,  $\bar{r}_\perp = (r_x, r_y, 0)$ , 反变换解得:

$$\bar{J}_{\bar{k}_\perp, \omega}^q(z) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dt d\bar{r}_\perp \hat{z} q v \delta(x) \delta(y) \delta(z - vt) e^{-i\bar{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp + i\omega t} = \hat{z} \frac{q}{(2\pi)^3} e^{i\frac{\omega z}{v}}$$

## 3.2 电磁场求解

麦克斯韦方程组经典电磁学框架下, 对单各向同性介质 ( $\bar{D} = \epsilon \bar{E}$ ,  $\bar{B} = \mu \bar{H}$ ) 有:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \times \bar{E} = i\omega \mu \bar{H} \\ \nabla \times \bar{H} = -i\omega \epsilon \bar{E} + \bar{J} \\ \nabla \cdot \bar{H} = 0 \\ \nabla \cdot \bar{E} = \frac{\rho}{\epsilon} \end{array} \right. \quad (3-3)$$

令  $\bar{E}_{\bar{k}_\perp, \omega}(z) = (E_x(z), E_y(z), E_z(z))$ ,  $\bar{E}_z = (0, 0, E_z(z))$ ,  $\bar{E}_s = (E_x(z), E_y(z), 0)$ ,  $\bar{H}_{\bar{k}_\perp, \omega}(z) = (H_x(z), H_y(z), H_z(z))$ ,  $\bar{H}_z = (0, 0, H_z(z))$ ,  $\bar{H}_s = (H_x(z), H_y(z), 0)$ , 采用柱波导中“用  $E_z, H_z$  求出所有场分量”的思想, 把对所有场量的求解转化为对  $E_z(z)$ ,  $H_z(z)$  的求解。

### 3.2.1 $\hat{z}$ 方向分量亥姆霍兹方程

$\hat{z}$  方向分量亥姆霍兹方程可对旋度方程求旋度, 利用矢量恒等式  $\nabla \times \nabla \times \bar{A} = (\nabla \nabla) \cdot \bar{A} - \nabla(\nabla \cdot \bar{A})$  并联立麦克斯韦方程得出, 但为说明纵向分量  $\bar{E}_z$ ,  $\bar{H}_z$  与横向分量  $\bar{E}_s$ ,  $\bar{H}_s$  的关系, 下给出另一求解方式, 改写两个旋度方程为:

$$\left( \nabla_s + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} \right) \times (\bar{E}_s + \bar{E}_z) = i\omega \mu (\bar{H}_s + \bar{H}_z) \quad (3-4)$$

$$\left( \nabla_s + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} \right) \times (\bar{H}_s + \bar{H}_z) = -i\omega \epsilon (\bar{E}_s + \bar{E}_z) + (\bar{J}_z + \bar{J}_s) \quad (3-5)$$

分离纵向和横向分量, 得:

$$i\omega \mu \bar{H}_s = \nabla_s \times \bar{E}_z + \hat{z} \times \frac{\partial}{\partial z} \bar{E}_s \quad (3-6)$$

$$-i\omega \epsilon \bar{E}_s + \bar{J}_s = \nabla_s \times \bar{H}_s + \hat{z} \times \frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_s \quad (3-7)$$

$$i\omega \mu \bar{H}_z = \nabla_s \times \bar{E}_s \quad (3-8)$$

$$-i\omega \epsilon \bar{E}_z + \bar{J}_z = \nabla_s \times \bar{H}_s \quad (3-9)$$

$\left( \frac{1}{i\omega \mu} \hat{z} \times \frac{\partial}{\partial z} \right)$  作用于式(3-6), 并加上(3-7)消去  $\hat{z} \times \frac{\partial}{\partial z} \bar{H}_s$ , 得:  $-i\omega \epsilon \bar{E}_s + \bar{J}_s = \nabla_s \times \bar{H}_s + \left( \frac{1}{i\omega \mu} \hat{z} \times \frac{\partial}{\partial z} \right) (\nabla_s \times \bar{E}_z) + \left( \frac{1}{i\omega \mu} \hat{z} \times \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( \hat{z} \times \frac{\partial}{\partial z} \bar{E}_s \right)$ , 利用  $\hat{z} \times (\nabla_s \times \bar{E}_z) = \nabla_s E_z$  和  $\hat{z} \times (\hat{z} \times \bar{E}_s) = -\bar{E}_s$  化简得  $\bar{E}_s$ ,  $\bar{E}_s$  代入(3-6)得  $\bar{H}_s$ , 如下:

$$\bar{E}_s = \frac{i\omega\mu(\nabla_s \times \bar{H}_z - \bar{J}_s) + \nabla_s \frac{\partial}{\partial z} E_z}{\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \omega^2\mu\epsilon} \quad (3-10)$$

$$\bar{H}_s = \frac{-i\omega\epsilon\nabla_s \times \bar{E}_z - \hat{z} \times \frac{\partial \bar{J}_s}{\partial z} + \nabla_s \frac{\partial H_z}{\partial z}}{\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \omega^2\mu\epsilon} \quad (3-11)$$

至此，本文得到了用纵向分量表达横向分量的关系式(3-10)与(3-11)，分别代入(3-8)，(3-9)得 $\hat{z}$ 方向场满足的亥姆霍兹方程：

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \omega^2\mu\epsilon + \nabla_s^2 \right) \begin{pmatrix} E_z \\ H_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \omega^2\mu\epsilon \right] \frac{J_z}{i\omega\epsilon} - \nabla_s \cdot \frac{\partial \bar{J}_s}{\partial z} \\ -\frac{\nabla_s \cdot \frac{\partial}{\partial z} \bar{J}_s}{i\omega\mu} \end{pmatrix} \quad (3-12)$$

由 $J_s = 0$ 知 $H_z = 0$ ，值得注意的是，数学角度上 $H_z$ 只有齐次解，系数可以取任意值，违背了唯一性定理。所以从物理上看， $H_z$ 齐次解对应的双层石墨烯的一种本征模式（TE模）是未被激发的，所以取 $H_z = 0$ 。对 $E_z$ ，由式(3-2)平面波展开知： $\nabla_s = (ik_x, ik_y, 0)$ ，则，可化简 $E_z$ 满足的亥姆霍兹方程：

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} E_z + \left( \frac{\omega^2}{c^2} \mu_r \epsilon_r - k_\perp^2 \right) E_z = \frac{iq\omega\mu}{(2\pi)^3} \left( \frac{c^2}{v^2 \epsilon_r \mu_r} - 1 \right) \quad (3-13)$$

齐次解为：

$$E_{z,m}^R = \frac{iq}{\omega\epsilon_0 (2\pi)^3} a_m e^{i(-1)^m \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} z} \quad (3-14)$$

$E_{z,m}^R$ 表示介质 $m$ 中电场强度， $\mu_{r,m}$ ， $\epsilon_{r,m}$ 分别为介质指数 $m$ 中磁导率，相对介电常数， $m$ 可取1、2。 $(-1)^m$ 约束了电磁波传播方向，介质1( $z < 0$ )中朝 $-z$ 方向传播，介质2( $z > 0$ )中朝 $+z$ 方向传播；

非齐次解：

$$E_z^q = \frac{iq\omega\mu \left( \frac{c^2}{v^2 \epsilon_r \mu_r} - 1 \right)}{(2\pi)^3 \left( \frac{\omega^2}{c^2} \mu_r \epsilon_r - k_\perp^2 - \frac{\omega^2}{v^2} \right)} e^{i\frac{\omega}{v} z} \quad (3-15)$$

$E_z^q$ 为电荷 $q$ 感应产生的电场，即切伦科夫辐射的电场。

### 3.2.2 边界条件匹配

下通过匹配边界条件确定系数 $a_m$ ，由相位匹配（动量守恒）得 $\bar{k}_{\perp 1} = \bar{k}_{\perp 2} = \bar{k}_\perp$ ，取 $\hat{n} = -\hat{z}$ ，有： $\hat{n} \times (\bar{H}_{\perp 2} - \bar{H}_{\perp 1}) = \sigma_s \bar{E}_{\perp 1}$ 且 $(\bar{E}_{\perp 2} - \bar{E}_{\perp 1}) = 0$ （即 $\hat{n} \times (\bar{E}_{\perp 2} - \bar{E}_{\perp 1}) = 0$ ）。等式两边点积 $i\bar{k}_\perp$ ，并利用 $\nabla_s = (ik_\perp, 0)$ 替换，观察恒等式 $(\nabla \times \bar{H}_j)_z = i\bar{k}_\perp \cdot (\hat{n} \times \bar{H}_j)$ 得： $\nabla_s \cdot (\bar{E}_{\perp 2} - \bar{E}_{\perp 1}) = 0$ 且 $(\nabla \times (\bar{H}_1 - \bar{H}_2))_z = \nabla_s \cdot \bar{E}_{\perp 1}$ ，利用麦克斯韦方程组得到，在 $z = 0$ ：

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{J_z}{i\omega\epsilon_1} - E_{z,1} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{J_z}{i\omega\epsilon_2} - E_{z,2} \right) \quad (3-16)$$

$$(-i\omega\epsilon_1 E_{z,1} + J_z) - (-i\omega\epsilon_2 E_{z,2} + J_z) = \sigma_s \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{J_z}{i\omega\epsilon_1} - E_{z,1} \right) \quad (3-17)$$

代入 $E_{z,1}, E_{z,2}, J_z$ , 解二元一次方程组可得:

$$a_1 = \frac{\frac{v}{c} \cdot \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2 \epsilon_{r,1}} (\epsilon_{r,2} - \epsilon_{r,1}) \left[ \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \epsilon_{r,1} + \frac{v}{c} \sqrt{\epsilon_{r,2} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \right) + \frac{\sigma_s}{c \epsilon_0 (\epsilon_{r,2} - \epsilon_{r,1})} \sqrt{\epsilon_{r,2} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \left( 1 + \frac{v}{c} \sqrt{\epsilon_{r,2} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \right) \right]}{\left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \epsilon_{r,1} + \frac{k_\perp^2 v^2}{\omega^2} \right) \left( 1 + \frac{v}{c} \sqrt{\epsilon_{r,2} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \right)} \quad (3-18)$$

$$a_2 = \frac{\frac{v}{c} \cdot \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2 \epsilon_{r,2}} (\epsilon_{r,2} - \epsilon_{r,1}) \left[ \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \epsilon_{r,2} - \frac{v}{c} \sqrt{\epsilon_{r,1} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \right) - \frac{\sigma_s}{c \epsilon_0 (\epsilon_{r,2} - \epsilon_{r,1})} \sqrt{\epsilon_{r,1} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \left( 1 + \frac{v}{c} \sqrt{\epsilon_{r,1} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \right) \right]}{\left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \epsilon_{r,2} + \frac{k_\perp^2 v^2}{\omega^2} \right) \left( 1 - \frac{v}{c} \sqrt{\epsilon_{r,1} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \right)} \quad (3-19)$$

值得说明的是, 由于运动的对称性,  $a_1$ 与 $a_2$ 存在 $\epsilon_{r,2} \leftrightarrow \epsilon_{r,1}$ ,  $\mu_{r,2} \leftrightarrow \mu_{r,1}$ ,  $v \leftrightarrow -v$ 的对偶关系, 解得 $a_1$ 后通过对偶关系得出 $a_2$ 。

### 3.2.3 柱坐标下的场量形式

至此得到 $\omega$ ,  $\bar{k}_\perp$ 域 $E_z$ 的解析解, 代入傅立叶反变换, 可得时域场, 即:

$$\bar{E}_{z,m}^R(\bar{r}, t) = \hat{z} \int d\omega d\bar{k}_\perp \frac{iq}{\omega \epsilon_0 (2\pi)^3} a_m e^{i(-1)^m \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} z} e^{i\bar{k}_\perp \bar{r}_\perp - i\omega t} \quad (3-20)$$

由 $\int d\bar{k}_\perp = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty k_\perp dk_\perp$ ,  $\bar{r}_\perp = (r_\perp \cos \phi, r_\perp \sin \phi)$ ,  $\bar{k}_\perp = (k_\perp \cos \theta, k_\perp \sin \theta)$ ,

代入得:

$$\bar{E}_{z,m}^R(\bar{r}, t) = \hat{z} \int d\omega \int_0^\infty dk_\perp \frac{iq}{\omega \epsilon_0 (2\pi)^3} a_m e^{i(-1)^m \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} z - i\omega t} \times \int_0^{2\pi} d\theta e^{ik_\perp r_\perp \cos(\theta - \phi)} \quad (3-21)$$

利用第一类贝塞尔函数积分定义式<sup>[51]</sup> $\int_0^{2\pi} d\theta e^{ik_\perp r_\perp \cos \theta} = 2\pi J_0(k_\perp r_\perp)$ , 以及 $\phi$ 的旋转对称性, 不妨取 $\phi = 0$ , 得:

$$\bar{E}_{z,m}^R(\bar{r}, t) = \hat{z} \int d\omega \int_0^\infty dk_\perp \frac{iq}{\omega \epsilon_0 (2\pi)^3} a_m (2\pi J_0(k_\perp r_\perp)) e^{i(-1)^m \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} z - i\omega t} \quad (3-22)$$

由于本问题的柱对称性, 在柱坐标 $(\rho, \phi, z)$ 下表示所有场量, 上式代入(3-10), (3-11),

利用 $\nabla_s \Phi = \hat{\rho} \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} + \hat{\phi} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Phi}{\partial \phi}$ ,  $\nabla_s \times \bar{H} = \frac{1}{\rho} \begin{vmatrix} \hat{\rho} & \rho \hat{\phi} & 0 \\ \frac{\partial}{\partial \rho} & \frac{\partial}{\partial \phi} & \frac{\partial}{\partial z} \\ H_\rho & \rho H_\phi & H_z \end{vmatrix}$ ,  $\frac{dJ_0(k_\perp \rho)}{d\rho} = -k_\perp J_1(k_\perp \rho)$ , 得:

$$\bar{H}_m^R(\bar{r}, t) = \hat{\phi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^\infty dk_\perp \frac{iq}{\omega \epsilon_0 (2\pi)^3} a_m (-\omega \epsilon_0 \epsilon_{r,m}) (i2\pi J_1(k_\perp \rho)) \times e^{i(-1)^m \left( \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} \right) z - i\omega t} \quad (3-23)$$

$$\begin{aligned} \bar{E}_m^R(\bar{r}, t) = & \hat{\rho} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^\infty dk_\perp \frac{iq a_m (-1)^{m+1}}{\omega \epsilon_0 (2\pi)^3} \left( \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} \right) (i2\pi J_1(k_\perp \rho)) \times \\ & e^{i(-1)^m \left( \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} \right) z - i\omega t} + \hat{z} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^\infty dk_\perp \frac{iq}{\omega \epsilon_0 (2\pi)^3} \times \\ & a_m (2\pi k_\perp J_0(k_\perp \rho)) e^{i(-1)^m \left( \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} \right) z - i\omega t} \end{aligned} \quad (3-24)$$

其中,  $\mu_{r,m}$  和  $\epsilon_{r,m}$  分别为介质指数  $m$  中磁导率和相对介电常数,  $m$  可取 1、2。同理, 求解切伦科夫辐射, 作反变换:

$$\bar{E}_z^q(\bar{r}, t) = \hat{z} \int d\omega d\bar{k}_\perp \frac{i q \omega \mu \left( \frac{c^2}{v^2 \epsilon_r \mu_r} - 1 \right)}{(2\pi)^3 \left( \frac{\omega^2}{c^2} \mu_r \epsilon_r - k_\perp^2 - \frac{w^2}{v^2} \right)} e^{i \frac{\omega}{v} z} e^{i \bar{k}_\perp \bar{r}_\perp - i \omega t} \quad (3-25)$$

当  $1 - \frac{c^2}{v^2 \epsilon_r \mu_r} > 0$ , 即:  $v > \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r \mu_r}}$  时 (此条件为切伦科夫辐射的速度阈值条件), 上式被积函数在  $k_\perp = \frac{\omega}{c} \sqrt{\mu_r \epsilon_r} \sqrt{1 - \frac{c^2}{v^2 \epsilon_r \mu_r}}$  存在极点, 可通过索末菲积分求解, 下直接给出结果, 如何构造索末菲积分路径以及上式的化简过程在下一小节给出。

$$\bar{H}_m^q(\bar{r}, t) = \hat{\rho} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{i q}{8\pi} \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{r,m} \mu_{r,m} - \frac{\omega^2}{v^2}} H_1^{(1)} \left( \rho \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{r,m} \mu_{r,m} - \frac{\omega^2}{v^2}} \right) e^{i \frac{\omega}{v} z - \omega t} \quad (3-26)$$

$$\begin{aligned} \bar{E}_m^q(\bar{r}, t) &= \hat{\rho} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{q}{8\pi \omega \epsilon_0 \epsilon_{r,m}} \left( i \frac{\omega}{v} \right) \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{r,m} \mu_{r,m} - \frac{\omega^2}{v^2}} \times \\ &H_1^{(1)} \left( \rho \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{r,m} \mu_{r,m} - \frac{\omega^2}{v^2}} \right) e^{i \frac{\omega}{v} z - \omega t} + \hat{z} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{-q}{8\pi \omega \epsilon_0 \epsilon_{r,m}} \left( \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{r,m} \mu_{r,m} - \frac{\omega^2}{v^2} \right) \times \\ &H_0^{(1)} \left( \rho \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{r,m} \mu_{r,m} - \frac{\omega^2}{v^2}} \right) e^{i \frac{\omega}{v} z - \omega t} \end{aligned} \quad (3-27)$$

$$\bar{E}_m(\bar{r}, t) = \bar{E}_m^q(\bar{r}, t) + \bar{E}_m^R(\bar{r}, t), \quad \bar{H}_m(\bar{r}, t) = \bar{H}_m^q(\bar{r}, t) + \bar{H}_m^R(\bar{r}, t) \quad (3-28)$$

综上(3-23), (3-24), (3-26), (3-27)和(3-28)式, 本文得出了所有场分量的解。

### 3.2.4 索末菲积分

观察式(3-23)-(3-24),  $k_\perp$  沿着实轴积分, 被积函数在  $\left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \epsilon_{r,2} + \frac{k_\perp^2 v^2}{\omega^2} \right) \left( 1 - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2 \epsilon_r \mu_r} - \frac{c^2}{v^2 \epsilon_r \mu_r} \right) = 0$ ,  $\left[ \epsilon_{r,1} \sqrt{\epsilon_{r,2} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} + \epsilon_{r,2} \sqrt{\epsilon_{r,1} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} + \frac{\sigma_s}{c \epsilon_0} \sqrt{\epsilon_{r,1} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \cdot \sqrt{\epsilon_{r,2} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \right] = 0$  处分母为 0, 数学上无意义, 但引入独特的物理结构, 使得本文能够在特殊的复变路径上积分数值求解。如经典的索末菲定义式通过规避极点得到球面波的柱面波 (或平面波) 展开, (幅值为  $\frac{k_\rho}{k_z} e^{ik_z|z|}$  的柱面波  $H_0^{(1)}(k_\rho \rho)$ , 也可以理解为幅值为  $\frac{k_\rho}{k_z} H_0^{(1)}(k_\rho \rho)$  的平面波  $e^{ik_z|z|}$ ):

$$\frac{e^{ik_r}}{r} = \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_\rho \frac{k_\rho}{k_z} H_0^{(1)}(k_\rho \rho) e^{ik_z|z|} \quad (3-29)$$

其中  $k_z = \sqrt{(k_0^2 - k_\rho^2)}$ 。

此处本文沿用式(3-29)的思路化简(3-25), 对非磁介质  $\mu = \mu_0$ ,  $\mu_r = 1$ , 有:

$$\begin{aligned}
\bar{E}_z^q(\bar{r}, t) &= \hat{z} \int d\omega \int_0^\infty dk_\perp \frac{i q \omega \mu \left( \frac{c^2}{v^2 \epsilon_r \mu_r} - 1 \right)}{(2\pi)^3 \left( \frac{\omega^2}{c^2} \mu_r \epsilon_r - k_\perp^2 - \frac{w^2}{v^2} \right)} e^{i \frac{\omega}{v} z - i \omega t} \int_0^{2\pi} d\theta e^{ik_\perp \rho \cos(\theta - \phi)} \\
&= \hat{z} \int d\omega e^{i \frac{\omega}{v} z - i \omega t} \int_0^\infty dk_\perp \frac{iq}{\omega \epsilon_0 \epsilon_r (2\pi)^3} \cdot \frac{\left( \frac{c^2}{v^2 \epsilon_r \mu_r} - 1 \right)}{\left( 1 - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2 \epsilon_r \mu_r} - \frac{c^2}{v^2 \epsilon_r \mu_r} \right)} (2\pi k_\perp J_0(k_\perp \rho)) \\
&= \hat{z} \int d\omega e^{i \frac{\omega}{v} z - i \omega t} \int_0^\infty dk_\perp \frac{iq}{\omega \epsilon_0 \epsilon_r (2\pi)^3} \cdot \frac{k_{\rho,q}^2 k_\perp}{k_\perp^2 - k_{\rho,q}^2} (2\pi J_0(k_\perp \rho))
\end{aligned}$$

其中  $k_{\rho,q} = \sqrt{\left( \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r - \frac{w^2}{v^2} \right)}$ , 令  $SI(\omega, \rho) = \int_0^\infty dk_\perp \frac{k_{\rho,q}^2 k_\perp}{k_\perp^2 - k_{\rho,q}^2} (2\pi J_0(k_\perp \rho))$ , 则:

$$\bar{E}_z^q(\bar{r}, t) = \hat{z} \int d\omega e^{i \frac{\omega}{v} z - i \omega t} \frac{iq}{\omega \epsilon_0 \epsilon_r (2\pi)^3} \cdot SI(\omega, \rho) \quad (3-30)$$

化简  $SI(\omega, r_\perp) = \int_0^\infty dk_\perp \frac{k_{\rho,q}^2 k_\perp}{k_\perp^2 - k_{\rho,q}^2} \pi [H_0^{(1)}(k_\perp \rho) + H_0^{(2)}(k_\perp \rho)]$ , 由汉克尔函数反射关系:

$$(-1)H_0^{(1)}(e^{i\pi}x) = H_0^{(2)}(x), \text{ 得:}$$

$$SI(\omega, \rho) = \int_{-\infty}^\infty dk_\perp \frac{k_{\rho,q}^2 k_\perp}{k_\perp^2 - k_{\rho,q}^2} \pi H_0^{(1)}(k_\perp \rho) \quad (3-31)$$

当  $k_{\rho,q} \in \mathcal{R}_+$  即:  $v > c/\sqrt{\epsilon_r}$ , 在实轴  $k_\perp = \pm k_{\rho,q}$  处产生极点。为介质引入极小损耗得:  $k_{\rho,q} = k_{\rho,q,R} + ik_{\rho,q,I}$ , 即  $k_{\rho,q,R}, k_{\rho,q,I} \in \mathcal{R}_+$ ,  $k_{\rho,q,I} \rightarrow 0^+$ , 得积分路径如图 3-2(a) 所示:

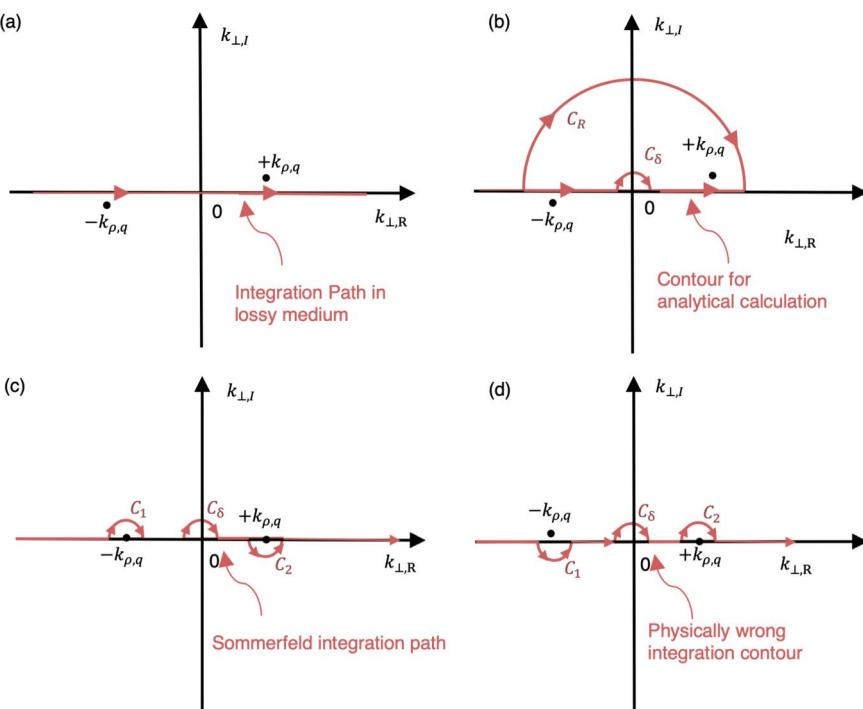


图 3-2 索末菲积分路径 (Sommerfeld integration path, SIP)。(a)有损媒介的积分路径; (b)有损媒介利用留数定理解析求解; (c)无损材料索末菲积分求数值解; (d)不符合辐射条件的积分路径。

由于  $H_0^{(1)}(k_{\perp}r_{\perp})$  在上半平面  $k_{\perp,l} \rightarrow \infty$  时呈指数衰减（由  $H_m^{(1)}(\xi) \sim \sqrt{2/\pi\xi} \exp[i(\xi - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4})]$ ， $\xi \rightarrow \infty$ ），由留数定理， $C_R$  半圆上积分为 0。从而，构造积分路径如图(b)求解，其中  $C_{\delta}$  半径无穷小， $C_R$  半径无穷大。由  $H_m^{(1)}(\xi) \sim -i\frac{2}{\pi} \ln \xi$ ， $\xi \rightarrow 0$ ，做代换  $k_{\perp} = \delta e^{i\phi}$  得  $\int_{C_{\delta}} dk_{\perp} = \int_0^{2\pi} i\delta e^{i\phi} d\phi$ ，进而不难得出  $C_{\delta}$  围线积分为 0，由留数定理：

$$\begin{aligned} SI(\omega, \rho) &= \left[ \left( \int_{C_R} dk_{\perp} + \int_{C_{\delta}} dk_{\perp} \right) \frac{k_{\rho,q}^2 k_{\perp}}{k_{\perp}^2 - k_{\rho,q}^2} \pi H_0^{(1)}(k_{\perp}\rho) \right] + (2\pi i) \text{Res}[+k_{\rho,q}] \\ &= (2\pi i) \text{Res}[+k_{\rho,q}] \\ &= (2\pi i) \frac{k_{\rho,q}^2 k_{\perp}}{k_{\perp} + k_{\rho,q}} \pi H_0^{(1)}(k_{\perp}\rho) \Big|_{k_{\perp}=k_{\rho,q}} \\ &= i\pi^2 k_{\rho,q}^2 H_0^{(1)}(k_{\rho,q}\rho) \end{aligned} \quad (3-32)$$

代入(3-28)得  $\bar{E}_z^q(\bar{r}, t) = \hat{z} \int d\omega e^{i\frac{\omega}{v}z - i\omega t} \frac{iq}{\omega\epsilon_0\epsilon_r(2\pi)^3} \cdot (i\pi^2) k_{\rho,q}^2 H_0^{(1)}(k_{\rho,q}\rho)$ ，即：

$$\bar{E}_z^q(\bar{r}, t) = \hat{z} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{-q}{8\pi\omega\epsilon_0\epsilon_r} \left( \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r - \frac{\omega^2}{v^2} \right) H_0^{(1)} \left( \rho \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r - \frac{\omega^2}{v^2}} \right) e^{i\frac{\omega}{v}z - \omega t} \quad (3-33)$$

上式代入(3-10)可得(3-27)，至此本文利用平面波展开法求解了切伦科夫辐射场，与经典的格林函数（柱面波展开）求解方法是统一的。

对无损介质构造图(c)积分路径即： $\int_{-\infty}^{\infty} dk_{\perp} = \int_{C_1} dk_{\perp} + \int_{C_{\delta}} dk_{\perp} + \int_{C_2} dk_{\perp} + PV \int_{-\infty}^{\infty} dk_{\perp}$ ， $C_1, C_2$  半径无穷小，则(c)即为(a)的极限形式，故图 3-2(b)与 (c) 是等价的，因此式(3-33)对无损介质仍然成立（对  $v < c/\sqrt{\epsilon_r}$  也成立，但此时的场是倏逝的）。然而图(d)也是一种可能的积分路径，但是对应解的辐射项为  $H_0^{(1)} \left( -\rho \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r - \frac{\omega^2}{v^2}} \right)$ ，电磁波传播方向为来波 (Incoming wave) 而非辐射波 (Outgoing wave)，不符合索末菲辐射条件，舍去此解。

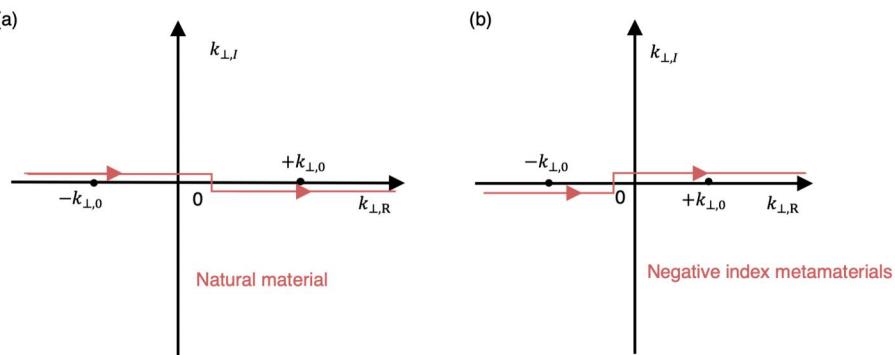


图 3-3 索末菲积分路径。(a)自然材料积分路径在二、四象限满足索末菲辐射条件；(b)负折射率新型人工材料积分路径在一三象限。

本例特殊的是，被积函数在 $\left(\frac{\omega^2}{c^2}\mu_r\epsilon_r - k_\perp^2 - \frac{\omega^2}{v^2}\right) = 0$ 处极点为一阶（整数阶），在有损介质中可以求得其解析解，但并非所有极点都可用留数定理进行处理。但基于本例，不难得出只要指定符合物理情景的积分路径，不论极点的类型，都可数值计算得出符合索末菲辐射条件的解。以索末菲定义式(3-27)为例，一般形式下的索末菲积分路径如图3-3所示，不赘述推导过程<sup>[52]</sup>。

### 3.3 电磁场分布

区域1与区域2介质参数取 $\epsilon_{r,1} = \epsilon_{r,2} = 1$ ,  $\mu_{r,1} = \mu_{r,2} = 1$ , 参数可简化

$$a = a_1 = -a_2 = \frac{\frac{v}{c} \cdot \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2 \epsilon_r} \cdot \frac{\sigma_s}{c \epsilon_0}}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2} \epsilon_r + \frac{k_\perp^2 v^2}{\omega^2}\right) \left(2 \epsilon_r + \frac{\sigma_s}{c \epsilon_0} \sqrt{\epsilon_r - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}}\right)} \quad (3-34)$$

本节本文关心在增益峰（47.1THz）与吸收峰（96.7THz）处的场分布，数值计算结果如下图：

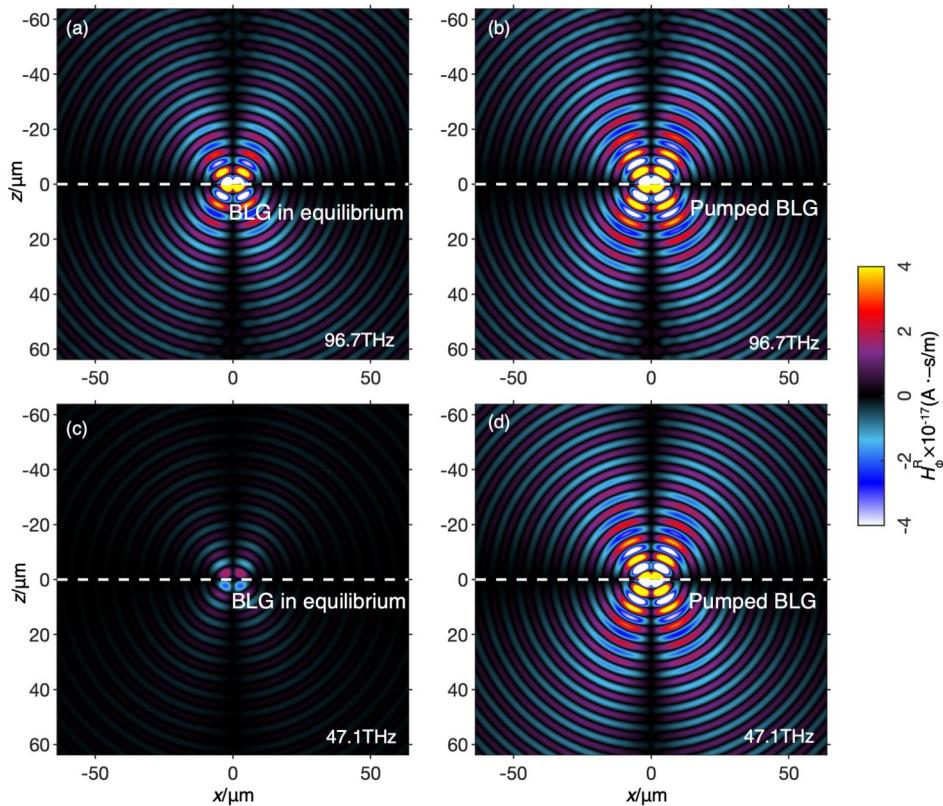


图 3-4 光激发前后场分布，粒子速度为 $0.9c$ ，双层石墨烯参数与图 2-4 一致。(a)96.7THz, 平衡态双层石墨烯; (b)96.7THz, 光激发双层石墨烯; (c)47.1THz, 平衡态双层石墨烯; (d)47.1THz, 光激发双层石墨烯。

综上，本文给出了电磁场量的解析形式，并数值求解得出了场图，不难看出光掺杂后（尤其在增益峰 47.1THz 处）的磁场强度要强于平衡态的磁场强度，这个结论是平庸的，为进一步定量探究渡越辐射的方向性、强度特性，需要进一步对辐射能量进行研究。

### 3.4 本章小节

本章延续了诺贝尔物理学奖得主 Vitaly Ginzburg 教授在 1973 年<sup>[1]</sup>提出的渡越辐射的一般模型，利用平面波展开法对电磁场量进行处理，进而匹配边界条件解析求得  $\mathbf{k}_\perp$  空间,  $\omega$  域下的电磁场分布。

不同的是，本文电磁模型中在二维界面处引入了新型人工二维材料双层石墨烯进行修饰，并且更进一步对地给了柱坐标系时域场和实际空间中的电磁场量，通过索末菲数值积分给出单频点场图。此外，本章深入探讨了将电磁场量化归为其纵向分量的合理性，并且系统阐述了在电磁辐射中如何利用索末菲积分对积分极点进行规避，并以切伦科夫辐射为例，创新地利用平面波展开法结合索末菲路径解析计算了切伦科夫辐射场。

## 第四章 远场：光子辐射

站在电磁波角度分析， $k_z = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2}$ ，当 $k_\perp > \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_r}$ 时， $k_z$ 是纯虚数，电磁场在 $z$ 方向是倏逝的；当 $k_\perp < \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_r}$ 时，电磁波为辐射波可传播到远场，从粒子角度看，远、近场能量的辐射形式分别为光子与表面等离激元。本章在 $k_\perp > \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_r}$ 条件下研究远场辐射，第一小节解析求解远场光子辐射的角谱能量；第二小节数值计算辐射的强度与定向性。

### 4.1 能量角谱与能谱

定义后向（前向）能量角谱为 $U_1(\omega, \theta, \beta)$  ( $U_2(\omega, \theta, \beta)$ )，满足：

$$W_m = \int_0^{+\infty} d\omega w_m(\omega) = \int_0^{+\infty} d\omega \int_0^{2\pi} d\theta U_m(\omega, \theta, \beta) \cdot (2\pi \sin\theta) \quad (4-1)$$

其中， $\theta$ 表示波矢 $\bar{k}$ 与速度 $\bar{v}$ 方向夹角， $\beta$ 表示归一化速度 $v/c$ ， $\omega$ 为角频率。以后向辐射为例，自由空间电磁能量为：

$$W_1 = \epsilon_r \lim_{t \rightarrow \infty} \int d\bar{r} |\bar{E}_1^R(\bar{r}, t)|^2 = \epsilon_r \lim_{t \rightarrow \infty} \int d\bar{r}_\perp \int_{-\infty}^{\infty} dz |\bar{E}_1^R(\bar{r}, t)|^2 \quad (4-2)$$

上式中要求 $k_\perp < \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_r}$ ，即电磁波是辐射场，并且材料无色散，因此磁场能量与电场能量相等。这里令 $t \rightarrow \infty$ 而并不是对 $t$ 在 $(-\infty, +\infty)$ 积分，值得注意的是，这是因为在 $t \rightarrow \infty$ 时，辐射场波列远离双层石墨烯，与电荷场 $E^q$ 剥离。

结合(3-2)式平面波展开式：

$$|\bar{E}(\bar{r}, t)|^2 = \epsilon_r \left[ \int d\omega d\bar{k}_\perp \bar{E}_{\bar{k}_\perp, \omega, 1}^R(z) e^{i\bar{k}_\perp \bar{r}_\perp - i\omega t} \right] \cdot \left[ \int d\omega' d\bar{k}'_\perp \bar{E}_{\bar{k}'_\perp, \omega', 1}^R(z) e^{i\bar{k}'_\perp \bar{r}_\perp - i\omega' t} \right]^* \quad (4-3)$$

代入得(4-2)，先对 $\bar{r}_\perp$ 积分，利用 $\int d\bar{r}_\perp e^{i\bar{k}_\perp \bar{r}_\perp - i\bar{k}'_\perp \bar{r}_\perp} = (2\pi)^2 \delta(\bar{k}_\perp - \bar{k}'_\perp)$ 可得：

$$W_1 = (2\pi)^2 \epsilon_r \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \int d\bar{k}_\perp \bar{E}_{\bar{k}_\perp, \omega, 1}^R(z) \left[ \bar{E}_{\bar{k}_\perp, \omega', 1}^R(z) \right]^* e^{-i\omega t + i\omega' t} \quad (4-4)$$

实际上，由式(4-2)到式(4-4)可直接由帕塞瓦尔定理推出。为简化计算，令 $W_1 = W_{1,z} + W_{1,\perp}$ ，将 $\bar{E}_{\bar{k}_\perp, \omega, 1}^R(z) = \frac{iq}{\omega \epsilon_0 (2\pi)^3} a_{\bar{k}_\perp, \omega, 1} e^{-i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r - k_\perp^2} z}$ 代入式(4-4)，先对 $z$ 在 $(-\infty, +\infty)$ 积分，由 $\delta(f(x) - y) = \frac{\delta(x - x_0)}{|f'(x)|} |_{f(x_0)=y}$ 知：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-i\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r - k_\perp^2} z} e^{+i\sqrt{\frac{\omega'^2}{c^2} \epsilon_r - k_\perp^2} z} = (2\pi) \begin{bmatrix} \delta(\omega - \omega') \frac{\frac{\sqrt{\epsilon_r}}{c}}{\sqrt{1 - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2 \epsilon_r}}} \end{bmatrix} \quad (4-5)$$

代入(4-4)得：

$$W_{1,z} = \epsilon_r \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int d\bar{k}_\perp \frac{q^2}{\omega^2 \epsilon_0^2 (2\pi)^3} |a_1|^2 \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r}} \sqrt{1 - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2 \epsilon_r}} \quad (4-6)$$

由式(3-10)得:  $W_{1,\perp} = W_{1,z} \cdot \left[ \frac{v_s \left( -i \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r - k_\perp^2} \right)}{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r - \left( \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r - k_\perp^2} \right)^2} \right]^2 = W_{1,z} \cdot \left[ \frac{i k_\perp \left( -i \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r - k_\perp^2} \right)}{k_\perp^2} \right]^2 = W_{1,z} \cdot$

$\left( \frac{\omega^2}{k_\perp^2 c^2} \epsilon_r - 1 \right)$ , 则:

$$W_{1,\perp} = \epsilon_r \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int d\bar{k}_\perp \frac{q^2}{\omega^2 \epsilon_0^2 (2\pi)^3} |a_1|^2 \left( \frac{\omega^2}{k_\perp^2 c^2} \epsilon_r - 1 \right) \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r}} \sqrt{1 - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2 \epsilon_r}} \quad (4-7)$$

从而易得:

$$W_1 = \epsilon_r \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int d\bar{k}_\perp \frac{q^2}{\omega^2 \epsilon_0^2 (2\pi)^3} |a_1|^2 \frac{\omega^2}{k_\perp^2 c^2} \epsilon_r \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r}} \sqrt{1 - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2 \epsilon_r}} \quad (4-8)$$

由远场  $k_\perp < \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_r}$ , 可定义  $k_\perp = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_r} \sin \theta$ , 代换  $d\bar{k}_\perp = 2\pi k_\perp dk_\perp d\theta$ , 整理(4-8)得:

$$W_1 = \int_0^{+\infty} d\omega \int_0^{\pi/2} d\theta \frac{\epsilon_r^{3/2} q^2 \cos^2 \theta |a_1|^2}{4\pi^3 \epsilon_0 c \sin^2 \theta} \cdot (2\pi \sin \theta) \quad (4-9)$$

恒等比较式(4-1),(4-9), 得前后向角谱为:

$$U_1(\omega, \theta, \beta) = \frac{\epsilon_r^{3/2} q^2 \cos^2 \theta |a_1|^2}{4\pi^3 \epsilon_0 c \sin^2 \theta} \quad (4-10)$$

由模型中  $\epsilon_{r,1} = \epsilon_{r,2} = 1$ ,  $\mu_{r,1} = \mu_{r,2} = 1$ , 得前向角谱为:  $U_2(\omega, \theta, \beta) = U_1(\omega, \theta, \beta)$ . 后向能量谱为:

$$w_1(\omega) = \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\epsilon_r^{3/2} q^2 \cos^2 \theta |a_2|^2}{4\pi^3 \epsilon_0 c \sin^2 \theta} (2\pi \sin \theta) \quad (4-11)$$

前向能量谱  $w_2(\omega) = w_1(\omega)$ . 总能谱为:  $w(\omega) = w_1(\omega) + w_2(\omega) = 2w_1(\omega)$ .

## 4.2 解析及数值结果

### 4.2.1 解析解

化简式(3-18), (3-19),  $a(\omega, \theta, \beta) = a_1 = a_2 = \frac{\beta \cdot \sin^2 \theta \cdot \frac{\sigma_S}{c\epsilon_0}}{(1 - \beta^2 \epsilon_r + \beta^2 \epsilon_r \sin^2 \theta)(2\epsilon_r + \frac{\sigma_S}{c\epsilon_0} \sqrt{\epsilon_r - \epsilon_r \sin^2 \theta})} = \frac{\beta \cdot \sin^2 \theta \cdot \frac{\sigma_S}{c\epsilon_0}}{(1 - \beta^2 \epsilon_r \cos^2 \theta)(2\epsilon_r + \frac{\sigma_S}{c\epsilon_0} \sqrt{\epsilon_r \cos \theta})}$ , 代入(4-10), 得:

$$U_1(\omega, \theta, \beta) = \frac{\epsilon_r^{3/2} q^2 \cos^2 \theta}{4\pi^3 \epsilon_0 c \sin^2 \theta} \left| \frac{\beta \cdot \sin^2 \theta \cdot \frac{\sigma_S}{c\epsilon_0}}{(1 - \beta^2 \epsilon_r \cos^2 \theta)(2\epsilon_r + \frac{\sigma_S}{c\epsilon_0} \sqrt{\epsilon_r \cos \theta})} \right|^2 \quad (4-12)$$

整理得:

$$\begin{aligned}
U_1(\omega, \theta, \beta) &= \frac{\varepsilon_r^{3/2} q^2 \beta^2 \left| \frac{\sigma_S}{c \varepsilon_0} \right|^2}{4\pi^3 \varepsilon_0 c} \cdot \left| \frac{\sin \theta \cdot \cos \theta}{(1 - \beta^2 \varepsilon_r \cos^2 \theta) \left( 2\varepsilon_r + \frac{\sigma_S}{c \varepsilon_0} \sqrt{\varepsilon_r} \cos \theta \right)} \right|^2 \\
&= \frac{\varepsilon_r^{3/2} q^2 \beta^2 \left| \frac{\sigma_S}{c \varepsilon_0} \right|^2}{4\pi^3 \varepsilon_0 c} \cdot \frac{\sin^2 \theta \cdot \cos^2 \theta}{\left[ \left( 2\varepsilon_r + \frac{\sigma_{S,R}}{c \varepsilon_0} \sqrt{\varepsilon_r} \cos \theta \right)^2 + \left( \frac{\sigma_{S,I}}{c \varepsilon_0} \sqrt{\varepsilon_r} \cos \theta \right)^2 \right]} \quad (4-13) \\
&= \frac{\varepsilon_r^{3/2} q^2 \beta^2 \left| \frac{\sigma_S}{c \varepsilon_0} \right|^2}{4\pi^3 \varepsilon_0 c} \cdot \frac{\sin^2 \theta \cdot \cos^2 \theta}{\left[ 4\varepsilon_r \left( \varepsilon_r + \frac{\sigma_{S,R}}{c \varepsilon_0} \sqrt{\varepsilon_r} \cos \theta \right) + \left| \frac{\sigma_S}{c \varepsilon_0} \right|^2 \cos^2 \theta \right]}
\end{aligned}$$

由上式分母中易知角谱强度与光导实部 $\sigma_{S,R}$ 的符号相关，而由 $\left( \frac{\sigma_{S,I}}{c \varepsilon_0} \sqrt{\varepsilon_r} \cos \theta \right)^2$ 可知，光导虚部 $\sigma_{S,I}$ 的符号并不影响角谱能量大小。但要解析求得上式的极值分布是困难的。下面本文关心特殊情形下的解析解，并对一般情景进行数值求解。

特殊地，当 $\beta \rightarrow 1$ 时，有： $U_1(\omega, \theta, \beta) = \frac{q^2 \left| \frac{\sigma_S}{c \varepsilon_0} \right|^2}{4\pi^3 \varepsilon_0 c \tan^2 \theta \left[ 4 \left( 1 + \frac{\sigma_{S,R}}{c \varepsilon_0} \cos \theta \right) + \left| \frac{\sigma_S}{c \varepsilon_0} \right|^2 \cos^2 \theta \right]}$ ，在 $\theta \rightarrow 0$ 时，角谱能量无穷大。因此，当粒子速度趋于光速时，几乎所有远场光子全部沿电子轨迹方向辐射。

#### 4.2.2 强度与定向性

首先，关注光激发前后对远场辐射强度与定向性的影响。数值求解角谱及如下图 4-1 所示，不难得出，辐射强度方面：光激发后能谱比平衡态大近两个数量级，极大增强了渡越辐射强度；定向性方面：随着速度的增大，虽然最大辐射角 $\theta_m$ 与速度关系无明显变化，但从角谱图中可以看出，辐射的定向性增强。

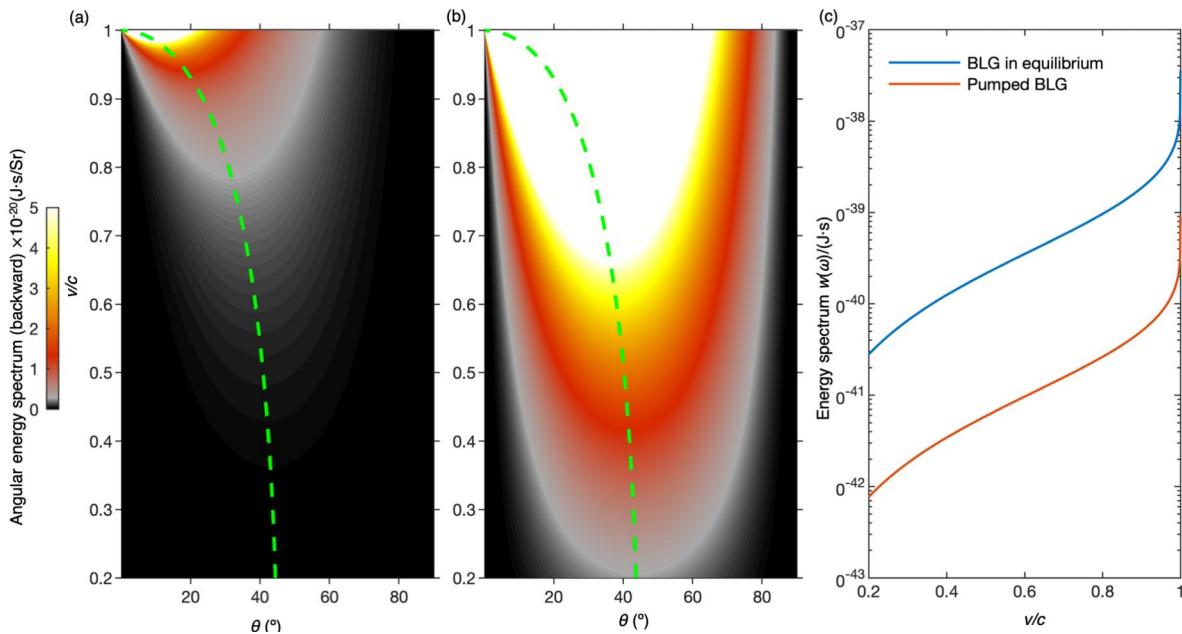


图 4-1 工作频率为 47.1THz，双层石墨烯参数与 2-4 保持一致。(a)平衡态石墨烯后向角谱；(b)光激发后石墨烯后向角谱；(c)能谱密度。

另外，本文考虑能谱随着频率、速度的变化，同时为了说明双层石墨烯的特性，本文加入单层石墨烯进行对比（除无带隙  $\Delta = 0.2$  eV 外，参数与平衡态石墨烯完全一致，即： $T=300K$ ，散射率  $\eta = \frac{\hbar}{2\tau} = \frac{10}{2\pi}$  meV，化学势  $\mu$  为 0.3 eV，另外，光激发后石墨烯能级为  $\mu_e = -\mu_h = \mu = 0.3$  eV。）其中单层石墨烯的光导电导<sup>[53]</sup>计算公式不在此赘述（见附录 1）：

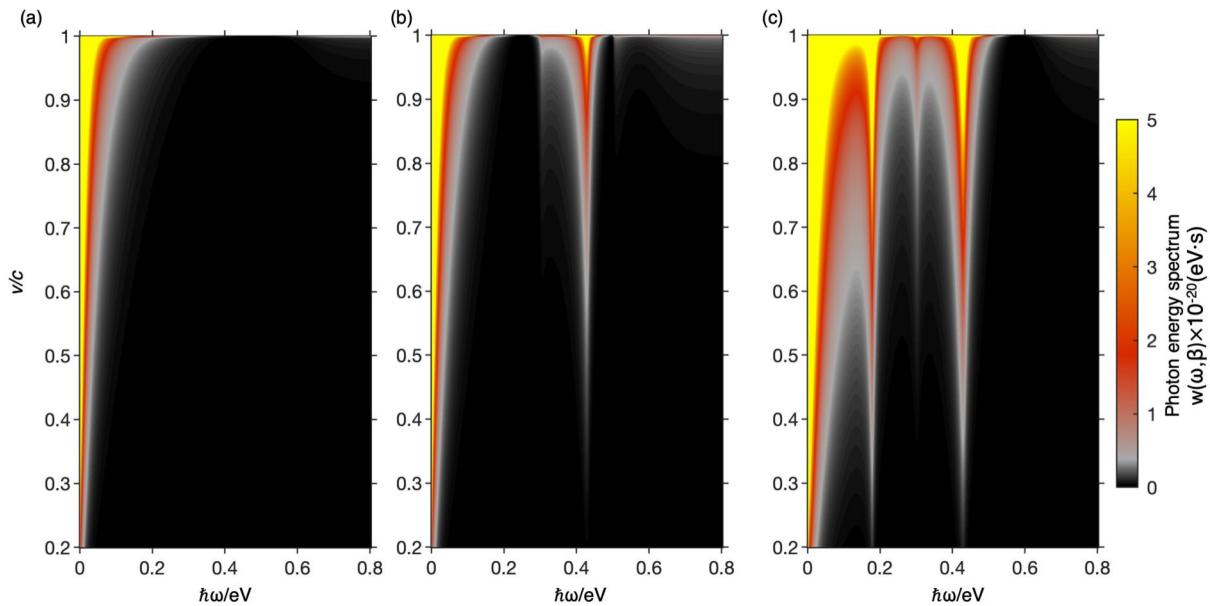


图 4-2 激发光子能谱与频率、速度的关系。(a)单层石墨烯；(b)双层平衡态石墨烯；(c)光激发双层石墨烯。

从图 4-2 中发现，异常能谱峰如双层石墨烯光导实部的吸收峰（0.4eV 处）、增益峰（0.5eV 处）以及虚部的峰（0.3eV 处）完全一一对应，如图(b)在 0.3, 0.4, 0.5eV 处的峰，图(c)在 0.2, 0.3, 0.4eV 处的光谱峰，与图 2-4 完全对应，并且在强度上也有一定对应关系。因此，这样的辐射机制为二维材料光导特性的研究提供强有力的理论支持，不同于 EELS（电子能量损失谱），本方法直接对远场光子辐射进行探测，并且远场光子无论是在吸收峰、增益峰处都会产生增益，这与近场等离激元在吸收峰处产生损耗的机制不一致并且违反了常识，限于能量谱未能解析求解，这背后的物理机制仍然值得进一步研究。

另外，不难看出，在更高的速度下，有更宽频率范围的光子受激发，换言之，远场光子激发更偏好更高速的电子，下关注光激发后的双层石墨烯，数值求解不同速度场图如图 4-3 示。

从图 4-3 可以看出，分别选取  $0.85c$ ,  $0.95c$ ,  $0.98c$ ,  $0.999c$  的粒子速度，在较低速度时，磁场的平面波特性不够明显，但是随着速度的增加，磁场强度增加，更重要的是，平面波特性显著地体现出来，说明此时电磁场有非常高的定向性，基于此实现粒子探测具有广阔的前景。

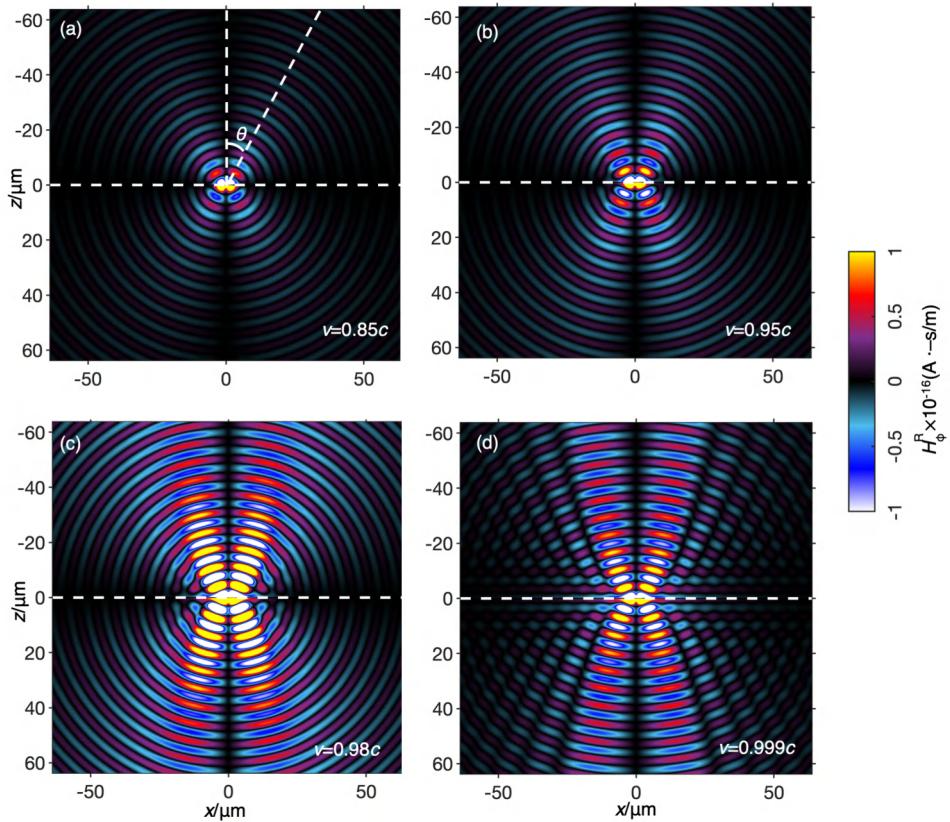


图 4-3 47.1THz 光激发双层石墨烯不同粒子速度下的场分布。(a)-(d)电子速度分别为  $0.85c$ ,  $0.95c$ ,  $0.98c$ ,  $0.999c$ 。

### 4.3 本章小节

本章在第三章解析计算了电磁场量的基础上，利用波印亭矢量，对自由传播的平面波的电磁场能量进行求解，得出了远场辐射角谱、能谱的解析表达。

本章发现，在双层石墨烯受光激发前后，辐射方向性无明显变化，但能谱增大近两个数量级。并且能谱峰的极值与光谱吸收峰、谐振峰和虚部的极值峰呈一一对应的关系，为实现新型二维材料的光导特性的探测与研究提供完全不同于传统电子能量损失谱（EELS）的实现思路。反之，这启发本文通过对已知二维材料的光导特性进行调控，实现对远场电磁辐射的调控（第六章详细阐述）。同时，通过不同速度下的场图分布，揭示更高速的电子能够激发强度更强、方向性更好的光子的现象与机理。

## 第五章 近场：等离激元（TM 模）

本章在  $k_{\perp} < \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_r}$  条件下研究近场辐射，第一小节研究渡越辐射激发的 TM 模等离激元的强度，以及分布特点尤其在理论上将电磁场能量的求解一般化（运用到色散介质中），第二小节定量研究 TM 模等离激元表面波束缚强度（趋肤深度）；第三小节宕开一笔，关注光激发后的双层石墨烯对 TE 模等离激元表面波的支持。

### 5.1 等离激元强度与分布

双层石墨烯等离激元分布能够解析地表达，忽略材料损耗， $t \rightarrow \infty$  时，等离激元对应的电磁场的能量即为激发等离激元的能量，表达激发等离子激元的电磁能量<sup>[2]</sup>为：

$$W^s = \lim_{t \rightarrow \infty} \int d\bar{r}_{\perp} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^t dt' \left( \bar{E}_z^R(\bar{r}, t') \cdot \frac{\partial}{\partial t'} \bar{D}_z^R(\bar{r}, t') + \bar{E}_{\perp}^R(\bar{r}, t') \cdot \frac{\partial}{\partial t'} \bar{D}_{\perp}^R(\bar{r}, t') + \right. \\ \left. + \bar{H}_z^R(\bar{r}, t') \cdot \frac{\partial}{\partial t'} \bar{B}_z^R(\bar{r}, t') + \bar{H}_{\perp}^R(\bar{r}, t') \cdot \frac{\partial}{\partial t'} \bar{B}_{\perp}^R(\bar{r}, t') \right) \quad (5-1)$$

值得注意的是，上式中  $k_{\perp} > \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_r}$ ，即电磁波在  $z$  方向上是倏逝的，因此磁场能量与电场能量并不相等，因此无法利用辐射波(4-2)式进行计算，并且式(4-5)中不再成立，即无法在式中通过对  $z$  方向积分  $\int_{-\infty}^{+\infty} dz$  产生  $\delta(\omega - \omega')$  项。

并且，式(5-1)采用  $\bar{E}_z^R(\bar{r}, t') \cdot \frac{\partial}{\partial t'} \bar{D}_z^R(\bar{r}, t')$  而非  $\epsilon_r |\bar{E}_z^R(\bar{r}, t')|^2$  是考虑介质色散的结果<sup>[54]</sup>，在无色散媒介中二者等价。(5-1)式是(4-2)式的一般形式，在无色散媒介、辐射波条件下，简并为(4-2)式。

#### 5.1.1 无损色散媒介中的近场能量

为了突出重点，本文以  $z$  方向电场能量，即含  $\bar{E}_z^R(\bar{r}, t') \cdot \frac{\partial}{\partial t'} \bar{D}_z^R(\bar{r}, t')$  项为例：将场量代入式(5-1)，利用积分与积分变量表示形式无关，做代换  $\omega \Leftarrow -\omega'$ ， $\bar{k}_{\perp} \Leftarrow -\bar{k}'_{\perp}$ ，将结果对称化简，即：

$$\bar{E}_z^R(\bar{r}, t) = \hat{z} \left[ \int d(-\omega') d(-\bar{k}'_{\perp}) \bar{E}_{z, -\omega', -\bar{k}'_{\perp}}^R(z) e^{i(-\bar{k}'_{\perp})\bar{r}_{\perp} - i(-\omega')t} \right] \quad (5-2)$$

进而：

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \int d\bar{r}_{\perp} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^t dt' \bar{E}_z^R(\bar{r}, t') \cdot \frac{\partial}{\partial t'} \bar{D}_z^R(\bar{r}, t') = \frac{1}{2} \lim_{t \rightarrow \infty} \int d\bar{r}_{\perp} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^t dt' \\ \left\{ \left[ \int d(-\omega') d(-\bar{k}'_{\perp}) \bar{E}_{z, -\omega', -\bar{k}'_{\perp}}^R(z) e^{i(-\bar{k}'_{\perp})\bar{r}'_{\perp} - i(-\omega')t'} \times \right. \right. \\ \left. \left. \left[ \int d\omega d\bar{k}_{\perp} \epsilon_z(z, \omega) \bar{E}_{z, \omega, \bar{k}_{\perp}}^R(z) e^{i\bar{k}_{\perp}\bar{r}_{\perp} - i\omega t'} \right] + \left[ \int d\omega d\bar{k}_{\perp} \bar{E}_{z, \omega, \bar{k}_{\perp}}^R(z) e^{i\bar{k}_{\perp}\bar{r}_{\perp} - i\omega t'} \right] \times \right. \right. \\ \left. \left. \left[ \int d(-\omega') d(-\bar{k}'_{\perp}) \epsilon_z(z, -\omega') \bar{E}_{z, -\omega', -\bar{k}'_{\perp}}^R(z) e^{i(-\bar{k}'_{\perp})\bar{r}'_{\perp} - i(-\omega')t'} \right] \right\} \right\} \quad (5-3) \end{aligned}$$

利用  $\int d\bar{r}_{\perp} e^{i\bar{k}_{\perp}\bar{r}_{\perp} - i\bar{k}'_{\perp}\bar{r}_{\perp}} = (2\pi)^2 \delta(\bar{k}_{\perp} - \bar{k}'_{\perp})$ ，式(5-3)化简为：

$\lim_{t \rightarrow \infty} 2\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} d\omega d\omega' \int d\bar{k}_\perp \int_{-\infty}^t dt' e^{-i(\omega-\omega')t'} \bar{E}_{z,\omega,\bar{k}_\perp}^R(z) \bar{E}_{z,-\omega',-\bar{k}_\perp}^R(z) [-i\omega\epsilon_z(z,\omega) + i\omega'\epsilon_z(z,-\omega')]$ 。先对  $t'$  积分  $\int_{-\infty}^t dt' e^{-i(\omega-\omega')t'} (-i\omega\epsilon_z(z,\omega) + i\omega'\epsilon_z(z,-\omega'))$ , 得:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} 2\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} d\omega d\omega' \int d\bar{k}_\perp e^{-i(\omega-\omega')t'} |_{t'=-\infty}^{t'=t} \frac{\omega\epsilon_z(z,\omega) - \omega'\epsilon_z(z,-\omega')}{\omega - \omega'} \bar{E}_{z,\omega,\bar{k}_\perp}^R(z) \bar{E}_{z,-\omega',-\bar{k}_\perp}^R(z)$$

同理, 不难得出其他方向的电场、磁场能量, 并利用  $H_z = 0$ , 得:

$$\begin{aligned} W^s &= \lim_{t \rightarrow \infty} 2\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} d\omega d\omega' \int d\bar{k}_\perp e^{-i(\omega-\omega')t'} |_{t'=-\infty}^{t'=t} \times \\ &\quad \left[ \frac{\omega\epsilon_z(z,\omega) - \omega'\epsilon_z(z,-\omega')}{\omega - \omega'} \bar{E}_{z,\omega,\bar{k}_\perp}^R(z) \bar{E}_{z,-\omega',-\bar{k}_\perp}^R(z) + \right. \\ &\quad \frac{\omega\epsilon_\perp(z,\omega) - \omega'\epsilon_\perp(z,-\omega')}{\omega - \omega'} \bar{E}_{\perp,\omega,\bar{k}_\perp}^R(z) \cdot \bar{E}_{\perp,-\omega',-\bar{k}_\perp}^R(z) + \\ &\quad \left. \frac{\omega\mu(z,\omega) - \omega'\mu(z,-\omega')}{\omega - \omega'} \bar{H}_{\perp,\omega,\bar{k}_\perp}^R(z) \cdot \bar{H}_{\perp,-\omega',-\bar{k}_\perp}^R(z) \right] \end{aligned} \quad (5-4)$$

上式特点在于, 在介质无损条件下, 即  $\epsilon_z^*(z,\omega') = \epsilon_z(z,\omega')$ , 结合因果律约束下电磁参数的共轭对称性  $\epsilon_z(z,-\omega') = \epsilon_z^*(z,\omega')$  得:  $\epsilon_z(z,\omega') = \epsilon_z(z,-\omega')$ , 进而:

$$\lim_{\omega \rightarrow \omega'} \frac{\omega\epsilon_z(z,\omega) - \omega'\epsilon_z(z,-\omega')}{\omega - \omega'} = \lim_{\omega \rightarrow \omega'} \frac{\omega\epsilon_z(z,\omega) - \omega'\epsilon_z(z,\omega')}{\omega - \omega'} = \frac{\partial(\epsilon(\omega)\omega)}{\partial\omega} \quad (5-5)$$

当  $\epsilon(\omega)$  为常实数且电磁波是辐射波时, 式(5-4)与(4-2)统一。且当  $\omega \neq \omega'$  时, 在  $t \rightarrow \infty$  处,  $e^{-i(\omega-\omega')t}$  项使得电磁能量随时间飞速振荡。所以只有稳定的能量, (即  $\omega = \omega'$  条件下) 对表面等离激元能量有贡献。因此约化表面等离激元能量表达式:

$$\begin{aligned} W^s &= \lim_{t \rightarrow \infty} 2\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} d\omega d\omega' \int d\bar{k}_\perp e^{-i(\omega-\omega')t'} |_{t'=-\infty}^{t'=t} \times \\ &\quad \left[ \frac{\partial(\epsilon_z(z,\omega)\omega)}{\partial\omega} \bar{E}_{z,\omega,\bar{k}_\perp}^R(z) \cdot \bar{E}_{z,-\omega',-\bar{k}_\perp}^R(z) + \frac{\partial(\epsilon_\perp(z,\omega)\omega)}{\partial\omega} \bar{E}_{\perp,\omega,\bar{k}_\perp}^R(z) \cdot \bar{E}_{\perp,-\omega',-\bar{k}_\perp}^R(z) + \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial(\mu(z,\omega)\omega)}{\partial\omega} \bar{H}_{\perp,\omega,\bar{k}_\perp}^R(z) \cdot \bar{H}_{\perp,-\omega',-\bar{k}_\perp}^R(z) \right] \end{aligned} \quad (5-6)$$

实际上能量被分为双层石墨烯上方、内部和下方三部分, 即  $\int_{-\infty}^{\infty} dz = \int_{0+}^{\infty} dz = \int_{-\infty}^{0-} dz + \int_{0-}^{0+} dz$ 。对石墨烯内部 ( $\int_{0-}^{0+} dz$ ): 本文采用了二维材料模型描述双层石墨烯, 即:  $\epsilon_{\text{gra},\perp} = \frac{i\sigma_s}{\omega} \delta(z)$ ,  $\epsilon_{\text{gra},z} = 0$ , 所以只有平行石墨烯表面方向 (垂直粒子运动方向) 的场量对石墨烯内部能量有贡献; 对前向  $z > 0$  区域积分 ( $\int_{0+}^{\infty} dz$ ) 有:

$$\int_{0+}^{\infty} dz e^{-\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_r-k_\perp^2}z} e^{-\sqrt{\frac{\omega'^2}{c^2}\epsilon_r-k_\perp^2}z} = \frac{1}{\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_r-k_\perp^2} + \sqrt{\frac{\omega'^2}{c^2}\epsilon_r-k_\perp^2}} \quad (5-7)$$

同理, 对后向部分  $z < 0$  区域积分 ( $\int_{-\infty}^{0-} dz$ ):

$$\int_{-\infty}^{0-} dz e^{\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_r-k_\perp^2}z} e^{\sqrt{\frac{\omega'^2}{c^2}\epsilon_r-k_\perp^2}z} = \frac{1}{\sqrt{\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_r-k_\perp^2} + \sqrt{\frac{\omega'^2}{c^2}\epsilon_r-k_\perp^2}} \quad (5-8)$$

### 5.1.2 TM 模等离激元色散

对式(5-4)的进一步化简可利用 TM 等离激元色散关系（详见本章第二节）：

$$\epsilon_{r1} \sqrt{\epsilon_{r2} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} + \epsilon_{r2} \sqrt{\epsilon_{r1} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} + \frac{\sigma_s}{c \epsilon_0} \sqrt{\epsilon_{r1} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \sqrt{\epsilon_{r2} - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} = 0 \quad (5-9)$$

为简化计算，定义共振因子：

$$\bar{\zeta}_{\omega, k_\perp} = \epsilon_{r1} \sqrt{\frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2} - \epsilon_{r2}} + \epsilon_{r2} \sqrt{\frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2} - \epsilon_{r1}} + \frac{i \sigma_s}{c \epsilon_0 |\omega|} \sqrt{\frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2} - \epsilon_{r1}} \sqrt{\frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2} - \epsilon_{r2}} \equiv 0 \quad (5-10)$$

此处利用了  $\sqrt{\epsilon_r - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} = \frac{i\omega}{|\omega|} \sqrt{\frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2} - \epsilon_r}$ ，从而，改写前后向辐射幅度系数：

$$a_1 = \frac{1}{i\omega |\omega|} b_{1,\omega,k_\perp}, a_2 = \frac{1}{i\omega |\omega|} b_{2,\omega,k_\perp} \quad (5-11)$$

在本例模型中， $a_1 = -a_2$ ， $\epsilon_{r1} = \epsilon_{r2} = \epsilon_r = 1$ ，从而： $\bar{\zeta}_{\omega, k_\perp} = 2\epsilon_r \sqrt{\frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2} - \epsilon_r} + \frac{i\sigma_s}{c\epsilon_0 |\omega|} \left( \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2} - \epsilon_{r2} \right)$ ，进而解得：

$$b_{\omega, k_\perp} = b_{1,\omega,k_\perp} = -b_{2,\omega,k_\perp} = \frac{\frac{v}{c} \cdot \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2 \epsilon_r} \cdot \frac{\sigma_s}{c \epsilon_0} \sqrt{\frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2} - \epsilon_r}}{\left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \epsilon_r + \frac{k_\perp^2 v^2}{\omega^2} \right)} \quad (5-12)$$

用  $b_{\omega, k_\perp}$  表达 (5-6) 式  $W^s$  为：

$$W^s = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{q^2}{32\pi^3 \epsilon_0} \int_0^\infty d(k_\perp^2) \int_{-\infty}^\infty d\omega \int_{-\infty}^\infty d\omega' \frac{e^{-i(\omega-\omega')t}}{\bar{\zeta}_{\omega, k_\perp} \bar{\zeta}_{-\omega', k_\perp}} \frac{|b_{\omega, k_\perp}|^2}{\omega^2} \times \left\{ \frac{\epsilon_r \left( 2 - \frac{\epsilon_r \omega^2}{k_\perp^2 c^2} \right) + \frac{\omega^2 \epsilon_r^2}{k_\perp^2 c^2}}{\sqrt{k_\perp^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r}} + \frac{\partial \left[ \frac{i\sigma_s(\omega)}{\epsilon_0} \right]}{\partial \omega} \left( 1 - \frac{\omega^2 \epsilon_r(\omega)}{k_\perp^2 c^2} \right) \right\} \quad (5-13)$$

注意，上式中将除  $\frac{e^{-i(\omega-\omega')t}}{\bar{\zeta}_{\omega, k_\perp} \bar{\zeta}_{-\omega', k_\perp}}$  外所有项进行了  $\omega = \omega'$  处理，这一点在式(5-6)中进行了说明，注意到上式符合如下积分形式：

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^\infty d\omega \varphi(\omega) \int_{-\infty}^\infty d\omega' \frac{e^{-i(\omega-\omega')t}}{\bar{\zeta}_{\omega, k_\perp} \bar{\zeta}_{-\omega', k_\perp}} = 8\pi^2 \int_0^\infty d\omega \varphi(\omega) \frac{\delta(\bar{\zeta}_{\omega, k_\perp})}{(\partial/\partial\omega) \bar{\zeta}_{\omega, k_\perp}} \quad (5-14)$$

其中  $\varphi(\omega)$  为偶函数，代入(5-13)得：

$$W^s = \int_0^\infty W^s(\omega) d\omega = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega^2} \int_0^\infty dk_\perp^2 \frac{|b_{\omega, k_\perp}|^2 \delta(\bar{\zeta}_{\omega, k_\perp})}{(\partial/\partial\omega) \bar{\zeta}_{\omega, k_\perp}} \times \left[ \frac{\frac{\partial(\omega \epsilon_r)}{\partial\omega} \left( 2 - \frac{\epsilon_r \omega^2}{k_\perp^2 c^2} \right) + \frac{\omega^2 \epsilon_r^2}{k_\perp^2 c^2}}{\sqrt{k_\perp^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r}} \right] \quad (5-15)$$

对  $dk_\perp^2$  积分得近场等离激元能谱：

$$w^s(\omega) = \frac{q^2 \epsilon_r}{\pi \epsilon_0 c} \frac{\nu^2 \left| \frac{\sigma_s(\omega)}{\epsilon_0 c} - 4 \epsilon_r \frac{\epsilon_0 c}{\sigma_s} \right|^2}{\left[ 1 - \frac{\nu^2}{c^2} \left( \frac{2 \epsilon_r \epsilon_0 c}{\sigma_s} \right)^2 \right]^2} \cdot \frac{1}{-\frac{i \sigma_s}{\epsilon_0 c} \left[ 2 \epsilon_r - \frac{1}{2} \left( \frac{\sigma_s(\omega)}{\epsilon_0 c} \right)^2 \right]} \quad (5-16)$$

值得说明的是，上式仅在介质无损下成立，或者是损耗很小下的近似式，因为在式(5-5)中本文对介质做了无损的近似 $\epsilon_z(z, -\omega') = \epsilon_z(z, \omega')$ ，即介电常数的虚部为0。所以严格意义上 $\frac{i \sigma_s(\omega)}{\epsilon_0}$ 应该为一个纯实数，这种情况下，能量谱密度 $w^s(\omega)$ 为纯实数。但在 $\sigma_s(\omega)$ 实部很小时，本文对能谱的计算并不妨碍结论的正确性。

## 5.2 数值结果

本模型也无法激发 TE 模等离激元，因此能谱 $w^s(\omega, \beta)$ 数值求解关注中、远红外区 0.05-0.2 eV 范围 TM 等离激元的能谱特性。并且式(5-16)只是在 $\sigma_s(\omega)$ 实部较小时的近似式，所以无法对光激发后双层石墨烯的能谱进行准确求解。而平衡态双层石墨烯、单层石墨烯在 0.05 -0.2 eV 范围内光导实部是比较小的（见附录图 1 及光导图 2-4），可以用式(5-16)进行近似，但值得说明的是本文对近场场图的刻画是准确无近似的，所以可间接通过场图体现单频点近场能量大小。

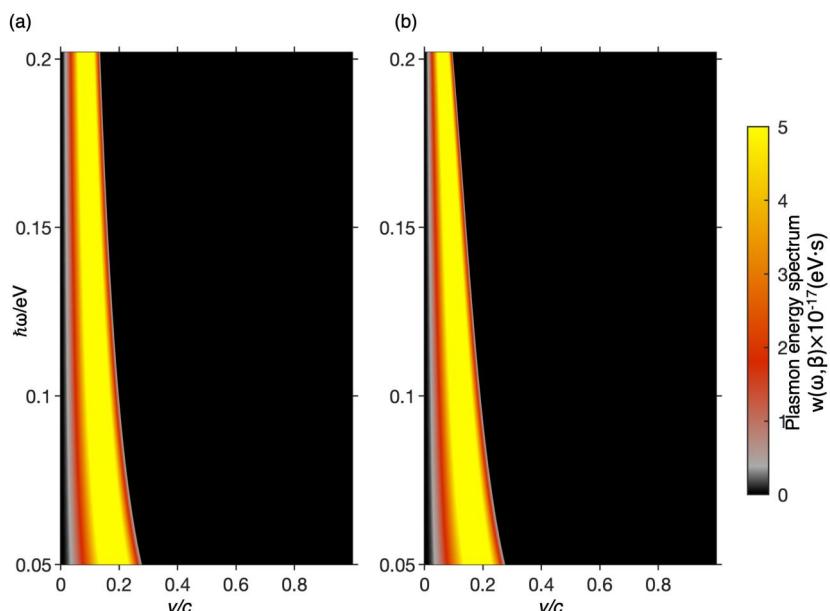


图 5-1 近场等离激元能谱，激发等离子激元能谱与频率，速度的关系。(a)单层石墨烯；(b) 平衡态双层石墨烯；(a)-(b)中材料参数与图 4-2 完全一致。

由上图可以得出，与单层石墨烯相同，电子穿过双层石墨烯，电子在低速情况下能在更宽的频率范围内激发等离激元，体现出远场光子完全不同的特性，如第四章所述，远场光子的激发更青睐高速电子。另外，与远场光子的能谱强度进行比较，近场等离激元的强度比远场大三个数量级，在强度上优越性明显。

下图为 47.1THz 下近场场图特性：

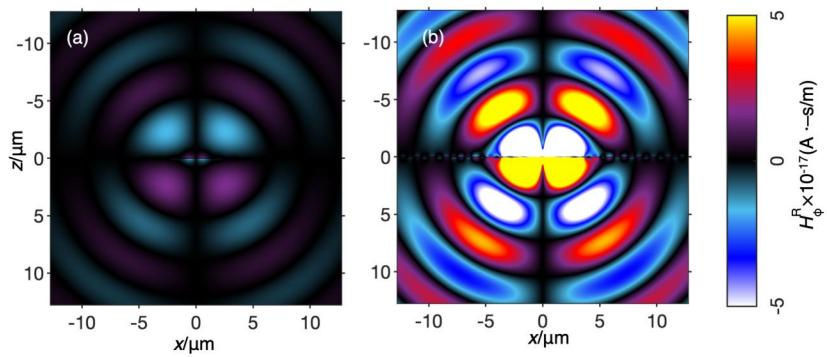


图 5-2 工作频率为 47.1THz 光激发前后双层石墨烯中红外区近场分布，工作频点为 47.1THz；(a) 平衡态石墨烯；(b)光激发石墨烯。

如上图，等离子激元在谐振峰附近从无到有（从很弱到主导整个辐射场）。另外，本文关心近场等离激元对速度的敏感性（选择性），如下图分别在近场、远场尺度上展现光激发双层石墨烯对非超高速粒子的速度的敏感度。

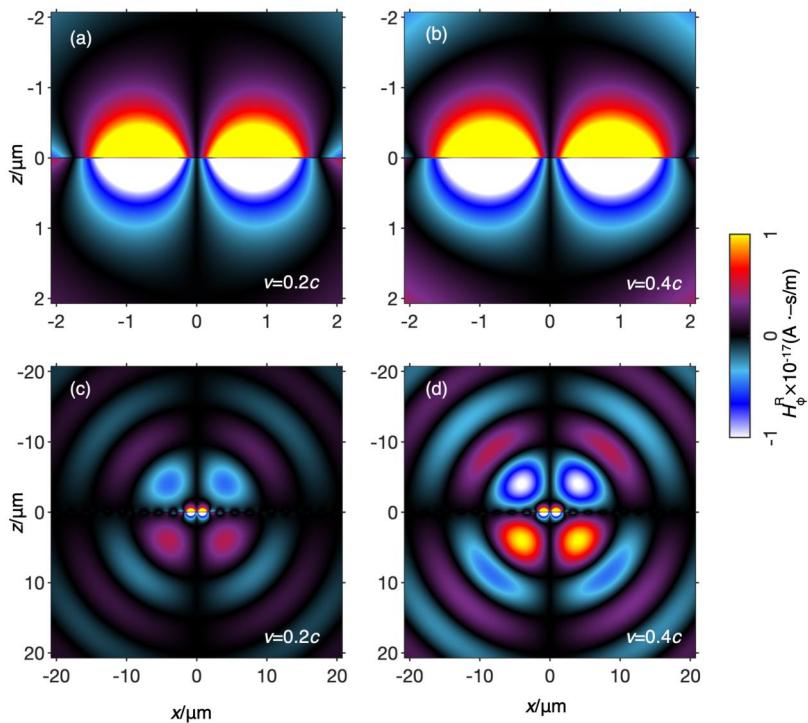


图 5-3 工作频率为 20THz，光激发后双层石墨烯（参数与图 2-4 一致）在不同（非超高速） $0.2c$ ,  $0.4c$  下的场分布。(a)电子速度为  $0.2c$ , 图为  $1/10$  个波长范围；(b)电子速度速度为  $0.4c$ , 图为  $1/10$  个波长范围；(c)与(a)一致但选取更大空间范围；(d)与(b)一致但选取更大空间范围（1 个波长）。

如上图所示，虽然粒子速度提高，但是如图(a)-(b)近场（十分之一个波长范围）却没有明显增强，体系中增加的能量转化为光子的形式辐射到远场如图(c), (d)（一个波长范围）所示，但值得说明的是这种特性并非光激发后双层石墨烯独有，单层石墨烯、平衡态双层石墨烯的近场等离激元拥有类似的速度选择性特点。

### 5.3 TM 等离激元束缚强度

首先叙述一般情境下 TM 等离激元色散关系。电磁模型同图 3-1，考虑单调谐振波，设区域 1 ( $z < 0$ ) TM 波场量：

$$\begin{cases} \bar{H}_i = \hat{y} e^{i\bar{k}_i \cdot \bar{r}} \\ \bar{E}_i = -\frac{1}{\omega\epsilon_1} \bar{k}_i \times \bar{H}_i \\ \bar{k}_i = -\hat{z} k_z + \hat{x} k_x \end{cases} \quad (5-17)$$

区域 2 ( $z > 0$ ) :

$$\begin{cases} \bar{H}_t = \hat{y} T e^{i\bar{k}_t \cdot \bar{r}} \\ \bar{E}_t = -\frac{T}{\omega\epsilon_2} \bar{k}_t \times \bar{H}_t \\ \bar{k}_t = \hat{z} k_{tz} + \hat{x} k_x \end{cases} \quad (5-18)$$

匹配边界条件：

$$\begin{cases} \hat{n} \times (\bar{E}_i - \bar{E}_t) = 0 \\ \hat{n} \times (\bar{H}_i - \bar{H}_t) = \sigma_s \bar{E}_i \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{k_z}{\omega\epsilon_1} = -\frac{T k_{tz}}{\omega\epsilon_t} \\ 1 - T = \sigma_s \frac{k_z}{\omega\epsilon_1} \end{cases}$$

其中  $\hat{n} = -\hat{z}$ , 进而得：

$$\frac{\epsilon_2}{k_{tz}} + \frac{\sigma_s}{\omega} + \frac{\epsilon_1}{k_z} = 0 \quad (5-19)$$

电磁场在  $z$  方向为倏逝，即  $k_{tz}$ ,  $k_z$  为纯正虚数。 $k_z = iq$ ,  $q \in \mathcal{R}_+$ 。要求定义趋肤深度  $d_p$  为：

$$d_p = \frac{1}{q} \quad (5-20)$$

取前后相对介电常数、相对磁导率均为 1，即前后都是空气，由空气色散条件，得：

$k_z = -\frac{2\epsilon_r\omega}{\sigma_s}$ , 进而得：

$$q = \frac{2\epsilon_r\epsilon_0\omega}{-i\sigma_s} = \frac{2\omega\epsilon_0}{\sigma_{s,I}} = \frac{2k_0}{\sigma_{s,I}\eta} \quad (5-21)$$

其中  $k_0$  为真空波数， $\eta$  为真空波阻抗  $\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}$ 。由此不难得出在前后正介电常数材料的边界必须满足虚部为正才能支持 TM 波。进一步化简得到趋肤深度与波长的关系：

$$\frac{d_p}{\lambda} = \frac{1}{\frac{2\pi}{\lambda} \frac{2k_0}{\sigma_{s,I}\eta}} = \frac{\sigma_{s,I}\eta}{4\pi} \quad (5-22)$$

这里针对石墨烯材料做简单估算，一般  $\sigma_{s,I}$  用  $\sigma_0 = \frac{e^2}{4\hbar}$  归一化， $\frac{\sigma_0\eta}{4\pi} = 0.0018$ 。在太赫兹至光波段，即使在光激发下，(双层) 石墨烯光导虚部  $\sigma_{s,I}$  不会超过 10 倍  $\sigma_0$  量级，取  $\sigma_{s,I} = 10\sigma_0$ ，得  $\frac{d_p}{\lambda} = 0.018$ ，因此 TM 等离激元能实现在深亚波长级别实现束缚。

在渡越辐射中，虽然无法得到倏逝场的解析解，但其不违背单调谐振波的色散条件式(5-19)。同时，除  $\sigma_{s,I}$  项外，没有与频率有关项，所以通过上述讨论，不难得出在太赫兹波段至 X 射线，双层石墨烯能够保持任意频点对 TM 表面等离激元的强束缚。

## 5.4 强束缚的 TE 模表面等离激元

上一小节解析地说明（双层）石墨烯能够保持任意频点对 TM 表面等离激元的强束缚，由此实现对光在亚波长、甚至实现几纳米范围内的灵活控制，促发了许多前景无限的应用，如太赫兹到 X 射线波段的片上集成光源<sup>[55,56]</sup>，小型化调制器<sup>[57]</sup>、亚波长导航<sup>[58]</sup>和深亚波长成像<sup>[59,60]</sup>。

而单层石墨烯对 TE 模表面等离激元的支持早在 2007 年<sup>[61]</sup>被发现，但是迄今为止基于 TE 模的表面等离激元的光学器件，只有布鲁斯特效应<sup>[62]</sup>、光学传感器<sup>[63]</sup>、偏光器<sup>[64]</sup>被实现，无法实现像 TM 模等离激元一样广泛地应用，根源在于 TE 模等离激元较弱的束缚度。但随着微纳光学器件的飞速发展，新型光子器件对强束缚 TE 模等离子激元有着迫切的需要，从而抛开对极化类型的限制。研究<sup>[46]</sup>通过将界面正介电常数材料改为负介电常数新型人工材料，从而实现利用更大的光导实部，理论上可以实现对深亚波长段的强束缚。本文关注二维材料本身，注意到由于光激发带来的谐振增益，双层石墨烯较单层石墨烯具有更大的光导虚部，增强了 TE 模的束缚性，通过材料本身光激发的方式为提供强束缚的 TE 模等离激元提供新思路。

下面本文解析分析双层石墨烯材料对 TE 模等离激元的支持原理以及束缚强度。与上节类似，设区域 1 ( $z < 0$ ) TE 波场量：

$$\begin{cases} \bar{E}_i = \hat{y} e^{i\bar{k}_i \cdot \bar{r}} \\ \bar{H}_i = -\frac{1}{\omega\mu_1} \bar{k}_i \times \bar{E}_i \\ \bar{k}_i = -\hat{z} k_z + \hat{x} k_x \end{cases} \quad (5-23)$$

区域 2 ( $z > 0$ )：

$$\begin{cases} \bar{E}_t = \hat{y} T e^{i\bar{k}_t \cdot \bar{r}} \\ \bar{H}_t = -\frac{T}{\omega\mu_2} \bar{k}_t \times \bar{E}_t \\ \bar{k}_t = \hat{z} k_{tz} + \hat{x} k_x \end{cases} \quad (5-24)$$

匹配边界条件：

$$\begin{cases} \hat{n} \times (\bar{E}_i - \bar{E}_t) = 0 \\ \hat{n} \times (\bar{H}_i - \bar{H}_t) = \sigma_s \bar{E}_i \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1 = T \\ -\frac{k_z}{\omega\mu_1} - \frac{T k_{tz}}{\omega\varepsilon_t} = \sigma_s T \end{cases}$$

其中  $\hat{n} = -\hat{z}$ ，进而得：

$$\frac{k_z}{\mu_1} + \frac{k_{tz}}{\mu_2} + \sigma_s \omega = 0 \quad (5-25)$$

电磁场在  $z$  方向为倏逝，即  $k_{tz}$ ， $k_z$  为纯正虚数， $k_z = iq$ ， $q \in \mathcal{R}_+$ 。同理，取前后向介质相对介电常数、相对磁导率均为 1，即前后都是空气。由空气色散条件得： $k_z = -\frac{2\epsilon_r\omega}{\sigma_s}$ 。进而：

$$q = i\sigma_s \omega \mu_r \mu_0 = \frac{-\sigma_{s,I} \omega \mu_r \mu_0}{2} = -\frac{k_0 \eta \sigma_{s,I}}{2} \quad (5-26)$$

其中  $k_0$  为真空波数， $\eta$  为真空波阻抗  $\sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}$ 。同理，不难得出在前后正介电常数的边界必须满足虚部为负才能支持 TE 波。进一步化简得到趋肤深度与波长的关系：

$$\frac{d_p}{\lambda} = \frac{1}{-\frac{2\pi k_0 \eta \sigma_{s,I}}{k_0^2}} = -\frac{1}{\sigma_{s,I} \eta \pi} \quad (5-27)$$

由上式可知，同理， $\sigma_{s,I}$  用  $\sigma_0 = \frac{e^2}{4\hbar}$  归一化，简单估算  $-\frac{1}{\sigma_0 \eta \pi} = 13.88$ ，则中红外至 X 射线波段，单层石墨烯有很小的虚部  $\sigma_{s,I}$ ，不超过 1 倍  $\sigma_0$ ，因此  $\frac{d_p}{\lambda} = 13.88$ ，这样得到的束缚度是非常弱的，双层石墨烯  $\sigma_{s,I}$  在此波段约负 2 倍左右，将束缚程度增强一倍，而光激发下的双层石墨烯，以图 2-4 参数为例， $\sigma_{s,I}$  可达到负 5 倍  $\sigma_0$  左右，取  $\sigma_{s,I} = 5\sigma_0$ ，则  $\frac{d_p}{\lambda} = 2.78$ ，束缚程度是单层石墨烯（平衡态双层石墨烯）至少 5 倍以上。

值得注意的是，虽然本辐射模型无法激发 TE 模等离激元，但由式(3-12)约束  $H_z$  的亥姆霍兹方程知， $H_z$  的激发由  $-\frac{\nabla_s \cdot \frac{\partial}{\partial z} J_s}{i\omega\mu}$  决定，只需引入对电子引入平行界面方向速度分量，即可实现对 TE 模等离激元的激发。因此，本节宕开一笔对 TE 模等离激元的讨论仍然是有意义的。

## 5.5 本章小节

本章在非自由传播，色散媒介中对电磁能量进行求解得到在无损近似下的近场等离激元能谱。发现近场等离激元收激发崭新的机理。

不同于远场光子，更低速的电子能够在更大频率范围内激发近场等离激元，并且随着电子速度的增加，近场等离激元辐射强度的增大会趋于饱和，即，即使进一步提高速度，等离激元强度无明显增强。同时，等离激元的强度与远场光子强度差异明显，等离激元能谱强度比远场光子大三个量级，为等离激元器件提供广阔应用前景。本章最后对等离激元的束缚性进行理论阐述，得出本电磁辐射模型中 TM 等离激元的强束缚性，同时宕开一笔论证了光激发下双层石墨烯对 TE 模等离激元的束缚程度的加强，有望打破等离激元器件对极化类型的限制。

## 第六章 远场电磁调控

影响双层石墨烯光导的参数有温度、带隙差、化学势、载流子倒置态化学势和电子散射率（电子弛豫时间），在实验手段中分别对应调节实验温度、调节双层石墨烯层间压降、调节化学掺杂浓度、调节光激发强度和控制双层石墨烯样品的纯净程度。其中电子散射率（双层石墨烯样品的纯净程度）取为 20 meV。本文在四、五章近场、远场特性中已经考虑了光激发的影响，所以此章中本文用载流子倒置态化学势  $\mu_e = -\mu_h = \mu$  取代化学掺杂的化学势，即不考虑处于平衡态的双层石墨烯。在实验中通过外加场效应调节带隙差，以及调整外加光激发的强度能够对辐射进行动态调控。另外，由于现有手段无法对近场能谱进行精确表达，本文在这一章关注远场辐射。

为了便于理解，本文提出双层石墨烯的一组典型参数如表 6-1 所示，在本章所有小节中，除参与调控的一个参数外，其余参数均取典型值。

表 6-1 本章电磁调控确定的一组双层石墨烯的典型值

温度 $T/K$	带隙差 $\Delta/eV$	光掺杂浓度 $\mu/eV$
300	0.2	0.3

### 6.1 温度

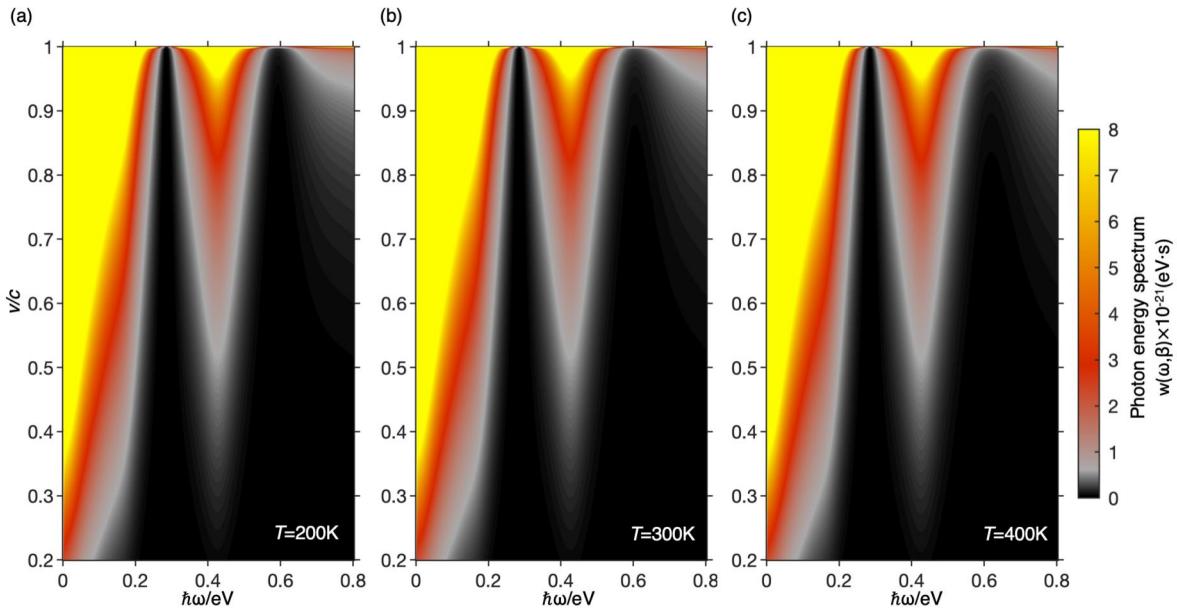


图 6-1 不同温度下的光子能谱。(a)-(c)温度分别为 100, 200 和 300 eV, 其余参数取表 6-1 典型值。

选取温度分别为 200, 300, 400 K, 如图 6-1 可知，在室温正负 100 摄氏度范围内，温度对光子能谱无明显影响。从电磁调控的角度来看是缺点，但是这里反应出实验对温度的灵敏度不高，对于实际实验环境的温度无严格要求，恰恰是优点。

### 6.2 光泵激发（光掺杂）

光激发后，本文利用载流子倒置态化学势  $\mu_e = -\mu_h = \mu$  来对光激发的强度进行表征。在光激发前后的对比已经在第四章、第五章进行了探讨，而在本小节中本文主要研究不同光激发强度不同所带来的强度差异。分别取  $\mu_e = -\mu_h = \mu = 0.1, 0.2$  和  $0.3 \text{ eV}$ 。

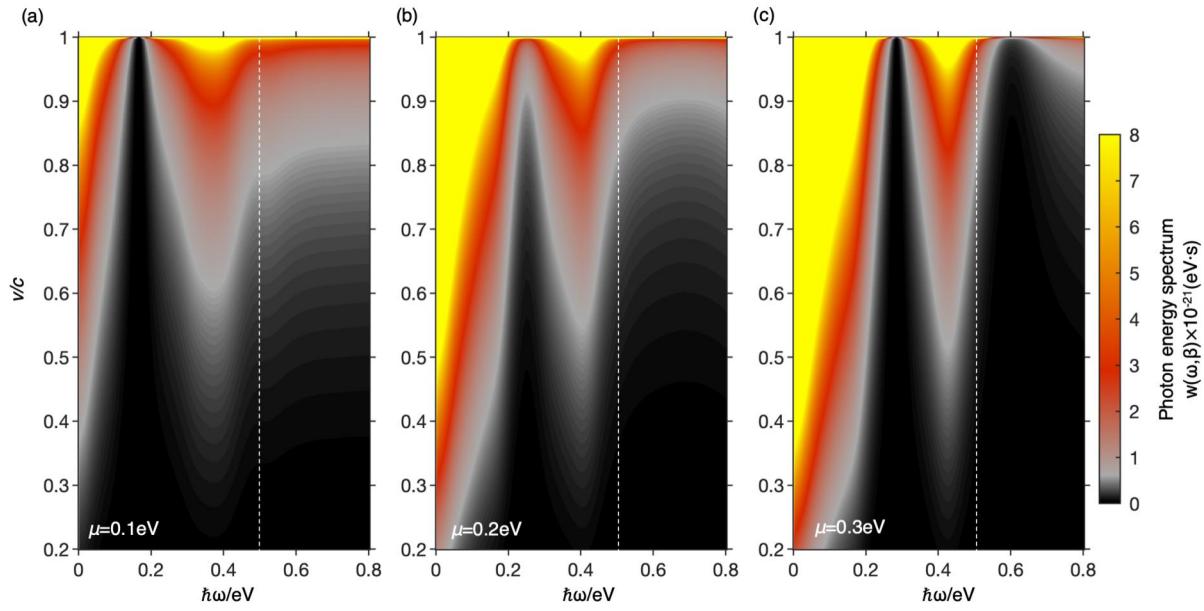


图 6-2 不同光掺杂浓度（光激发强度）下的光子能谱。(a)-(c)光激发化学势能分别为 0.1, 0.2 和 0.3 eV, 其余参数均取表 6-1 中典型值。

上图中, 本文重点关注两个特点, 第一, 在  $\hbar\omega \lesssim \gamma_1 + \frac{\Delta}{2}$  范围 (白色虚线左侧): 如  $\hbar\omega \lesssim \mu$  (左侧黄色填涂区) 有着较强的辐射行为, 换言之, 随着  $\mu$  的增大, 可以允许更低速度的电子在  $\hbar\omega \lesssim \mu$  区域激发出强辐射。并且同一速度电子随着光掺杂浓度的增大会辐射更强 (如在谐振峰  $\hbar\omega \approx \gamma_1 = 0.4$  eV 附近); 第二, 反常的是 (白虚线右侧) 光掺杂浓度变大也会导致辐射强度更弱 (如在  $\hbar\omega > \gamma_1 + \frac{\Delta}{2} = 0.5$  eV 区域)。

### 6.3 场效应

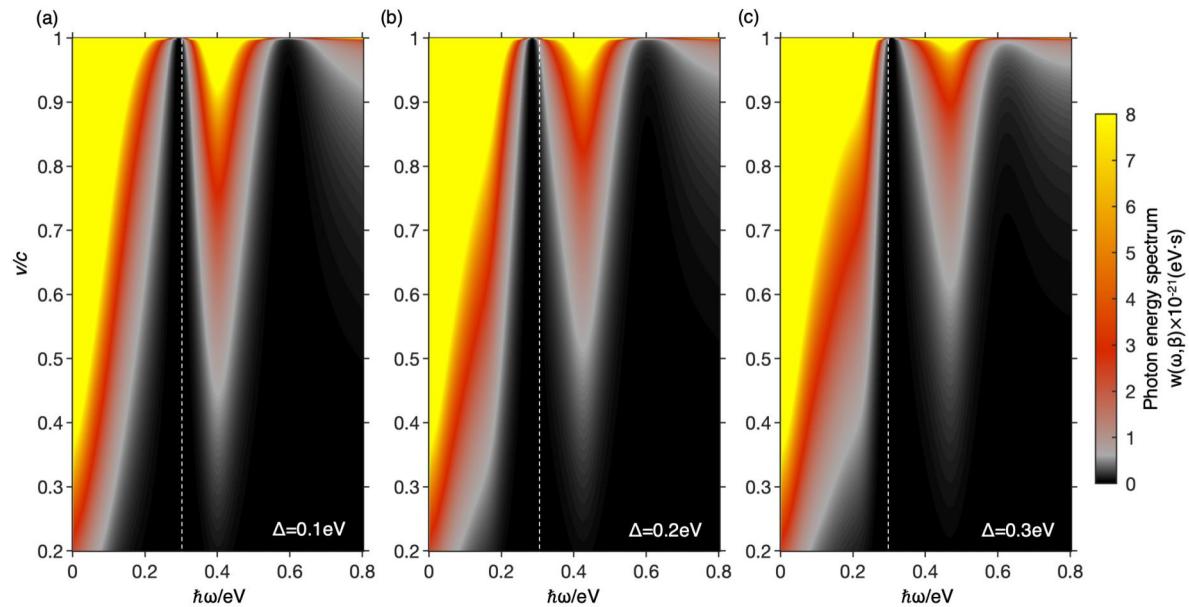


图 6-3 不同带隙差 (外加电场强度) 下的光子能谱。(a)-(c)带隙差分别为 0.1, 0.2 和 0.3 eV, 其余参数均取表 6-1 中典型值。

研究<sup>[24-26]</sup>表明，通过双层石墨烯层间压降可以使得非对称带隙在 0.1 eV~0.3 eV 范围内线性可调，这里取  $\Delta = 0.1, 0.2$  和  $0.3 \text{ eV}$ 。如图 6-3，带隙差变化带来的光子能量分布变化与光激发相似但不尽相同，变化的分界频率在  $\hbar\omega \approx \mu$ （图 6-3 白色虚线），在分界频率左侧同一速度电子随着带隙差的增大能激发更强的光谱，右侧反之。

## 6.4 调控准则

综上，上述理论对于实验的意义为在确定电子速度下，使得指定工作频点远场辐射增强（可调）。对于光掺杂，增大光掺杂浓度来增大  $\hbar\omega \lesssim \gamma_1 + \frac{\Delta}{2}$  区域远场光子辐射强度，反之，减小光掺杂浓度来增大  $\hbar\omega \gtrsim \gamma_1 + \frac{\Delta}{2}$  区域远场光子辐射强度；对于外加电场，增大外加电场来增大  $\hbar\omega \lesssim \mu$  区域远场光子辐射强度，反之，减小外加电场来减小  $\hbar\omega \lesssim \mu$  区域远场光子辐射强度。

另外，对比图 6-2 与图 6-3，不难发现远场辐射对于光激发的灵敏度要大于场效应，通过调整光掺杂浓度在大范围内“粗调”，进而通过调整场效应“细调”，使工作频点的辐射强度符合实验条件。

## 6.5 本章小节

本章探究温度、带隙差和载流子倒置态化学势对远场电磁辐射强度的影响，即，研究远场辐射的温度灵敏度以及场效应、光掺杂对远场辐射的调控作用。系统地得出了如何利用场效应、光掺杂对远场辐射进行有效的调控的准则。本章基于二维材料本身而非设计周期长的结构化电磁环境，理论上实现对远场光子调控。

## 第七章 展望渡越辐射

### 7.1 本文贡献

基于高速电子穿过双层石墨烯的运动情景，本文探究新型二维材料双层石墨烯的层间耦合、场效应和光激发等特性为渡越辐射带来的全新机理。本文利用平面波展开法结合索末菲积分路径得出渡越辐射远、近电磁场分布。进而利用波印亭定理，对远、近场能谱进行了解析表达。并研究了电子运动速度、双层石墨烯带隙差和光掺杂浓度等变量与自由电子渡越辐射的强度、能谱、方向性的关系。

本文揭示了远场光子与近场等离子激元的激发特点；发现了远场辐射能谱与双层石墨烯光导谱峰的一致性，为二维材料特性的探测提供区别于传统电子能量损失谱法的新思路；探究了光掺杂对辐射强度的增强作用；论证了不同等离激元模式的束缚程度，利用光激发将 TE 等离激元束缚程度提高 5 倍以上；阐述了通过改变二维材料本身的光学特性对远场光子辐射进行调控的准则，为基于渡越辐射的太赫兹光源、粒子探测器提供理论指导。

下对未来渡越辐射的研究方向与重点进行展望。

### 7.2 基础辐射机理与应用

从基础物理的角度，渡越辐射的机理研究仍然是值得科学家深耕的领域。在辐射机理上，渡越辐射与切伦科夫辐射、史密斯-帕塞尔辐射（Smith-Purcell radiation）为三种典型的自由电子辐射（轫致辐射和同步辐射也是典型的自由电子辐射，本文不做探究），物理学家用简洁唯美的公式解析表达了切伦科夫辐射角与宿主介质色散的关系，在宿主材料在有损耗甚至奇异色散关系下仍然适用。其机理的普适、简洁带来了许多创新性的成果，如实验利用双曲新型人工电磁材料实现的切伦科夫辐射将速度阈值降低到 0.01 倍光速量级<sup>[65]</sup>。对于史密斯-帕塞尔辐射，虽然具体的辐射机理<sup>[66]</sup>仍然处于猜想阶段，但通过动量能量守恒、多普勒频移得出的史密斯-帕塞尔辐射角<sup>[66]</sup>与周期光栅的关系是简洁完备的，并通过广泛的实验得到了验证。而对于渡越辐射的公式化表述是不够优美、完备的，例如诺贝尔物理学奖得主 Vitaly Ginzburg<sup>[2]</sup>教授对渡越辐射近场等离激元特性进行了解析表达，但对介质做了无吸收（无损）的近似，而切伦科夫辐射波前辐射、速度阈值等特征在介质有损、色散条件下仍然适用。渡越辐射理论亟待完备。

从工程应用的角度，太赫兹波段是电磁波谱中唯一没有被广泛应用的波段，在此波段如何实现高定向性、高强度的辐射源<sup>[67]</sup>是亟待解决的问题，虽然科学家通过自由电子辐射实现了宽频段的辐射源，但是强度、定向性仍未达到应用推广的程度，集成程度与应用也仍有较大差距。其进一步优化仍然受限于理论的不完善，如电子科技大学刘盛纲院士提出的表面极化切伦科夫辐射光源<sup>[68]</sup>中对金属片的设计停留在电磁场仿真阶段，因此未来对渡越辐射理论的研究是提升太赫兹波段辐射源特性的关键一环。另外，渡越辐射对粒子探测的重要意义早在 1975 年<sup>[69]</sup>就被发掘，但即便拥有没有速度阈值的优点，

渡越辐射粒子探测器的实现较切伦科夫探测器相比仍不够成熟，根源也是因为科学家对渡越辐射理论了解得不够彻底。

### 7.3 电子运动方式

对于电子的运动方式，已有实验通过斜入射电子流与范德华异质结作用实现可调的X光源<sup>[70]</sup>，但是其理论并不完备，无法站在更高的角度对实验参数进行优化。因此，斜入射电子的渡越辐射是亟待解决的问题。另外，对于变速运动的高速电子产生的电磁辐射也没有相关理论，高速运动电子在加速或者减速产生的辐射机理被轫致辐射理论<sup>[71]</sup>概括，那么变速运动的电子穿过界面时会为渡越辐射带来新的机理。综上，渡越辐射对电子运动方式的扩展会为渡越辐射这一沉淀了几十载的机理带来新的活力。

### 7.4 结构化电磁环境

#### 7.4.1 二维材料

渡越辐射将自由电子与界面相关联，而二维材料契合“界面”的特点，同时其新奇的光学特性为渡越辐射提供了可调控的平台，本世纪对于二维材料及其异质结的研究异常火爆，如石墨烯良好的光学特性及其“魔角”石墨烯的超导特性一直引领着凝聚态物理、多体物理、纳米电子学、光子学和材料科学的研究前沿。而丰富的二维材料库如氮化硼、黑磷、扭曲碳原子层及其范德华异质结为自由电子施展拳脚的空间提供了无限可能。当然，另一个思考角度是将二维材料与结构化的电磁环境联系起来。如：“空气—二维材料界面—介质板—二维材料界面—空气”，这样的结构使得前后向电磁波产生干涉。同时，在此结构中，介质板的厚度以增强远场辐射的方向性、强度以及近场电磁波束缚程度的目标进行优化。

另外，碳基材料<sup>[72]</sup>（如碳纳米管）取代硅实现大规模甚至超大规模集成电路前景无限，虽然渡越辐射对高速电子与二维材料的作用的研究尺度与半导体器件处于不同的物理研究尺度，但是前者（单个电子尺度）的研究能够为更为宏观（电流尺度）的半导体器件提供更底层的理论基础。

#### 7.4.2 光子晶体

除二维材料外，电子与由纯电介质周期性排列形成的“晶体”结构（如一维光子晶体，它由二维无限大电解质A，B在一个方向上交替填充，周期厚度与空气中光波长可比拟）作用产生的渡越辐射能够获得高定向性的谐振渡越辐射<sup>[8]</sup>。但是受限于谐振带来的窄频带的特点，如何通过设计光子晶体的结构（电介质A厚度 $d_1$ ，相对介电常数 $\epsilon_{r,1}$ ，电解质B厚度 $d_2$ ，相对介电常数 $\epsilon_{r,2}$ ）在满足高定向性的前提下，实现对一定频段内甚至宽频段内最大强度的渡越辐射仍是研究的重要方向。对于更高维度的光子晶体，切伦科夫辐射在二维光子晶体<sup>[73]</sup>中的无阈值特性以及反向的波前特性得到了研究，这启发本文渡越辐射与二维光子晶体也蕴含新的机理。另外，一维光子晶体界面处用二维材料加以修饰，那么二维材料支持的等离子激元也能为这样的辐射带来新的物理特性。

#### 7.4.3 （双）各向异性介质板

实际实验中的光子晶体，如一维光子晶体，在一维方向上不是无限大的，因此，如果将此“准”光子晶体等效为一个介质板，那么是否可以根据等效介质理论<sup>[74]</sup>，确定一组相对介电常数张量 $\bar{\epsilon}_r$ ，相对磁导率张量 $\bar{\mu}_r$ ，将此光子晶体等效为一个介质板，从而本文将一个复杂的数千层（如在光波段 2 mm 周期与光波长可比拟的光子晶体）的电磁波干涉问题等效为两个界面的前后干涉，这样的研究能够简化对光子晶体的计算。另一方面，对渡越辐射与各向异性介质板的研究也是充满前景的。研究表明各向同性的介质板<sup>[8]</sup>与光子晶体的渡越辐射都具有高定向性。那么，在此基础上设计各向异性介质，能够实现对辐射强度与定向性的优化。同时如果在各向介质板界面处加上二维材料进行修饰，数学上电磁场干涉项新的可控变量，物理上介质板表面引入了表面等离激元。另外对手性材料，同时，高速电子与手性材料<sup>[75]</sup>这一引起广泛的关注的双各向同性材料的研究也能引发新的物理机制。如果将负数拓展入介质板相对介电常数、相对磁导率张量的可行域得到负折射率材料，又为渡越辐射提供了崭新的平台。

综上，新型人工电磁材料（理论上，所有材料都可以由四个电磁本构参数 $\bar{\epsilon}, \bar{\mu}, \bar{\zeta}, \bar{\xi}$ 进行描述）、新型二维材料及其结构化的电磁结构让渡越辐射的研究常研常新。

## 参考文献

- [1] GINZBURG V L, TSYTOVICH V N. Several problems of the theory of transition radiation and transition scattering[J]. Physics Reports, 1979, 49(1): 1-89.
- [2] GINZBURG V L. Transition radiation and transition scattering[M]. A. Hilger, 1990.
- [3] GINZBURG V L, FRANK I M. Radiation of a uniformly moving electron due to its transition from one medium into another[J]. Journal of Physics (USSR), 1945, 9: 353-362.
- [4] GOLDSMITH P, JELLEY J V. Optical transition radiation from protons entering metal surfaces[J]. Philosophical Magazine, 1959, 4(43): 836-844.
- [5] CHERENKOV P A. Visible emission of clean liquids by action of gamma radiation[J]. Dokl. Akad. Nauk SSSR, 1934, 2(451-454).
- [6] FRANK I, TAMM Ig. Coherent Visible Radiation of Fast Electrons Passing Through Matter[M] In TAMM I E, BOLOTOVSKII B M, FRENKEL V Ya, et al. Selected Papers. Berlin, Heidelberg: Springer, 1991: 29-35.
- [7] GONG S, HU M, WU Z, et al. Direction controllable inverse transition radiation from the spatial dispersion in a graphene-dielectric stack[J]. Photonics Research, 2019, 7(10): 1154-1160.
- [8] LIN X, EASO S, SHEN Y, et al. Controlling Cherenkov angles with resonance transition radiation[J]. Nature Physics, 2018, 14(8): 816-821.
- [9] OCHIAI T. Efficiency and angular distribution of graphene-plasmon excitation by electron beam[J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2014, 83(5): 54705.
- [10] ZHANG K C, CHEN X X, SHENG C J, et al. Transition radiation from graphene plasmons by a bunch beam in the terahertz regime[J]. Optics Express, 2017, 25(17): 20477-20485.
- [11] LIAO G Q, LI Y T, ZHANG Y H, et al. Demonstration of coherent terahertz transition radiation from relativistic laser-solid interactions[J]. Physical Review Letters, 2016, 116(20): 205003.
- [12] DE VRIES K D, PROHIRA S. Coherent transition radiation from the geomagnetically induced current in cosmic-ray air showers: Implications for the anomalous events observed by ANITA[J]. Physical Review Letters, 2019, 123(9): 91102.
- [13] CASALBUONI S, SCHMIDT B, SCHMÜSER P, et al. Ultrabroadband terahertz source and beamline based on coherent transition radiation[J]. Physical Review Special Topics-Accelerators and Beams, 2009, 12(3): 30705.
- [14] CHU A N, PIESTRUP M A, BARBEE JR T W, et al. Transition radiation as a source of x rays[J]. Journal of Applied Physics, 1980, 51(3): 1290-1293.
- [15] PIESTRUP M A, BOYERS D G, PINCUS C I, et al. Observation of soft-x-ray spatial coherence from resonance transition radiation[J]. Physical Review A, 1992, 45(2): 1183.
- [16] DOLGOSHEIN B. Transition radiation detectors[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 1993, 326(3): 434-469.
- [17] LIN X, HU H, EASO S, et al. A Brewster route to Cherenkov detectors[J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 1-7.
- [18] AVOURIS P, HEINZ T F, LOW T. 2D Materials[M]. Cambridge University Press, 2017.
- [19] CASTRO NETO A H, GUINEA F, PERES N M R, et al. The electronic properties of graphene[J]. Reviews of Modern Physics, 2009, 81(1): 109-162.
- [20] MCCANN E, KOSHINO M. The electronic properties of bilayer graphene[J]. Reports on Progress in Physics, 2013, 76(5): 56503.
- [21] ROZHKOVA V, SBOYCHAKOV A O, RAKHMANOV A L, et al. Electronic properties of

- graphene-based bilayer systems[J]. Physics Reports, 2016, 648: 1-104.
- [22] MCCANN E. Asymmetry gap in the electronic band structure of bilayer graphene[J]. Physical Review B, 2006, 74(16): 161403.
- [23] NICOL E J, CARBOTTE J P. Optical conductivity of bilayer graphene with and without an asymmetry gap[J]. Physical Review B, 2008, 77(15): 155409.
- [24] MIN H, SAHU B, BANERJEE S K, et al. Ab initio theory of gate induced gaps in graphene bilayers[J]. Physical Review B, 2007, 75(15): 155115.
- [25] CASTRO E V, NOVOSELOV K S, MOROZOV S V, et al. Electronic properties of a biased graphene bilayer[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2010, 22(17): 175503.
- [26] CASTRO E V, NOVOSELOV K S, MOROZOV S V, et al. Biased Bilayer Graphene: Semiconductor with a Gap Tunable by the Electric Field Effect[J]. Physical Review Letters, 2007, 99(21): 216802.
- [27] KUZMENKO A B, BENFATTO L, CAPPELLUTI E, et al. Gate Tunable Infrared Phonon Anomalies in Bilayer Graphene[J]. Physical Review Letters, 2009, 103(11): 116804.
- [28] CAPPELLUTI E, BENFATTO L, KUZMENKO A B. Phonon switching and combined Fano-Rice effect in optical spectra of bilayer graphene[J]. Physical Review B, 2010, 82(4).
- [29] TANG T T, ZHANG Y, PARK C H, et al. A tunable phonon-exciton Fano system in bilayer graphene[J]. Nature Nanotechnology, 2010, 5(1): 32-36.
- [30] GE Z, JOUCKEN F, QUEZADA E, et al. Visualization and Manipulation of Bilayer Graphene Quantum Dots with Broken Rotational Symmetry and Nontrivial Topology[J]. Nano Letters, 2020, 20(12): 8682-8688.
- [31] LOW T. Graphene Nanoelectronics[M]. Springer, 2011.
- [32] SUI Y, LOW T, LUNDSTROM M, et al. Signatures of disorder in the minimum conductivity of graphene[J]. Nano Letters, 2011, 11(3): 1319-1322.
- [33] LOW T, GUINEA F, YAN H, et al. Novel Midinfrared Plasmonic Properties of Bilayer Graphene[J]. Physical Review Letters, 2014, 112(11): 116801.
- [34] YAN H, LOW T, GUINEA F, et al. Tunable Phonon-Induced Transparency in Bilayer Graphene Nanoribbons[J]. Nano Letters, 2014, 14(8): 4581-4586.
- [35] FEI Z, RODIN A S, ANDREEV G O, et al. Gate-tuning of graphene plasmons revealed by infrared nano-imaging[J]. Nature, 2012, 487(7405): 82-85.
- [36] LOW T, CHEN P Y, BASOV D N. Superluminal plasmons with resonant gain in population inverted bilayer graphene[J]. Physical Review B, 2018, 98(4): 41403.
- [37] BERINI P, DE LEON I. Surface plasmon-polariton amplifiers and lasers[J]. Nature Photonics, 2012, 6(1): 16-24.
- [38] RIVERA N, KAMINER I. Light-matter interactions with photonic quasiparticles[J]. Nature Reviews Physics, 2020, 2(10): 538-561.
- [39] SHENTCIS M, BUDNIAK A K, SHI X, et al. Tunable free-electron X-ray radiation from van der Waals materials[J]. Nature Photonics, 2020, 14(11): 686-692.
- [40] LOW T, CHAVES A, CALDWELL J D, et al. Polaritons in layered two-dimensional materials[J]. Nature Materials, 2017, 16(2): 182-194.
- [41] DE ABAJO F J G. Optical excitations in electron microscopy[J]. Reviews of Modern Physics, 2010, 82(1): 209.
- [42] DE ABAJO F J. Multiple excitation of confined graphene plasmons by single free electrons[J]. ACS Nano, 2013, 7(12): 11409-11419.
- [43] MIŠKOVIĆ Z L, SEGUI S, GERVASONI J L, et al. Energy losses and transition radiation produced by the interaction of charged particles with a graphene sheet[J]. Physical Review B, 2016, 94(12):

- 125414.
- [44] OHTA T, BOSTWICK A, SEYLLER T, et al. Controlling the electronic structure of bilayer graphene[J]. *Science*, 2006, 313(5789): 951-954.
  - [45] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films[J]. *Science*, 2004, 306(5696): 666-669.
  - [46] ZHANG X, HU H, LIN X, et al. Confined transverse-electric graphene plasmons in negative refractive-index systems[J]. *npj 2D Materials and Applications*, 2020, 4(1): 25.
  - [47] LIN X, KAMINER I, SHI X, et al. Splashing transients of 2D plasmons launched by swift electrons[J]. *Science Advances*, 2017, 3(1): e1601192.
  - [48] MAHAN G D. *Many-Particle Physics*[M]. Springer Science & Business Media, 2000.
  - [49] PEIERLS R. Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen[J]. *Zeitschrift für Physik*, 1933, 80(11): 763-791.
  - [50] BROWN J W, CHURCHILL R V. *Complex variables and applications*[M]. McGraw-Hill, 2009.
  - [51] ABRAMOWITZ M, STEGUN I A, ROMER R H. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*[M]. American Association of Physics Teachers, 1988.
  - [52] CHEW W. *Waves and fields in inhomogeneous media*[M]. Springer, 1990.
  - [53] GUSYNIN V P, SHARAPOV S G, CARBOTTE J P. Unusual microwave response of dirac quasiparticles in graphene[J]. *Physical Review Letters*, 2006, 96(25): 256802.
  - [54] LANDAU L D, LIFSHITZ E M. *Electrodynamics of Continuous Media*[M]. Amsterdam: Pergamon, 1984.
  - [55] ROSOLEN G, WONG L J, RIVERA N, et al. Metasurface-based multi-harmonic free-electron light source[J]. *Light: Science & Applications*, 2018, 7(1): 1-12.
  - [56] WONG L J, KAMINER I, ILIC O, et al. Towards graphene plasmon-based free-electron infrared to X-ray sources[J]. *Nature Photonics*, 2015, 10(1): 46-52.
  - [57] LIU M, YIN X, ULIN-AVILA E, et al. A graphene-based broadband optical modulator[J]. *Nature*, 2011, 474(7349): 64-67.
  - [58] VAKIL A, ENGHETA N. Transformation optics using graphene[J]. *Science*, 2011, 332(6035): 1291-1294.
  - [59] SAPIENZA R, COENEN T, RENGER J, et al. Deep-subwavelength imaging of the modal dispersion of light[J]. *Nature Materials*, 2012, 11(9): 781-787.
  - [60] ZHU J, CHRISTENSEN J, JUNG J, et al. A holey-structured metamaterial for acoustic deep-subwavelength imaging[J]. *Nature Physics*, 2010, 7(1): 52-55.
  - [61] MIKHAILOV S A, ZIEGLER K. New electromagnetic mode in graphene[J]. *Physical Review Letters*, 2007, 99(1): 016803.
  - [62] LIN X, SHEN Y, KAMINER I, et al. Transverse-electric Brewster effect enabled by nonmagnetic two-dimensional materials[J]. *Physical Review A*, 2016, 94(2): 023836.
  - [63] SUN L, ZHANG Y, WANG Y, et al. Refractive index mapping of single cells with a graphene-based optical sensor[J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2017, C(242): 41-46.
  - [64] BAO Q, ZHANG H, WANG B, et al. Broadband graphene polarizer[J]. *Nature Photonics*, 2011, 5(7): 411-415.
  - [65] LIU F, XIAO L, YE Y, et al. Integrated Cherenkov radiation emitter eliminating the electron velocity threshold[J]. *Nature Photonics*, 2017, 11(5): 289-292.
  - [66] POTYLITSYN A P, RYAZANOV M I, STRIKHANOV M N, et al. *Diffraction Radiation from Relativistic Particles*[M]. Springer, 2010.
  - [67] ADAMO G, MACDONALD K F, FU Y H, et al. Light well: A tunable free-electron light source on

- a chip[J]. Physical Review Letters, 2009, 103(11): 113901.
- [68] LIU S, ZHANG P, LIU W, et al. Surface polariton Cherenkov light radiation source[J]. Physical Review Letters, 2012, 109(15): 153902.
- [69] ARSTRU X, YODH G B, MENNESSIER G. Practical theory of the multilayered transition radiation detector[J]. Physical Review D, 1975, 12(5): 1289.
- [70] HUANG S, DUAN R, PRAMANIK N, et al. Enhanced Versatility of Table-Top X-Rays from Van der Waals Structures[J]. Advanced Science, 2022: 2105401.
- [71] WENDIN G, NUROH K. Bremsstrahlung Resonances and Appearance-Potential Spectroscopy near the \$3d\$ Thresholds in Metallic Ba, La, and Ce[J]. Physical Review Letters, 1977, 39(1): 48-51.
- [72] QIU C, ZHANG Z, XIAO M, et al. Scaling carbon nanotube complementary transistors to 5-nm gate lengths[J]. Science, 2017, 355(6322): 271-276.
- [73] LUO C, IBANESCU M, JOHNSON S G, et al. Cerenkov Radiation in Photonic Crystals[J]. Science, 2003, 299(5605): 368-371.
- [74] CHOY T C. Effective Medium Theory[M]. Oxford University Press, 2016.
- [75] CIATTONI A. Fast electrons interacting with chiral matter: mirror symmetry breaking of quantum decoherence and lateral momentum transfer[J]. ArXiv preprint arXiv:2204.03490, 2022.

## 致 谢

过去二十一年的人生，充满感激。

谢谢祖国的培养，我为我是中国人感到幸运，为我是一个中国人自豪。

谢谢养育我的土地，谢谢我的家乡浒湾镇，这个只应天上有的美丽小镇。小的时候，我在抚河里和小伙伴戏水打闹，在巷子里捉迷藏，打弹珠，疯跑，每路过后街大黄狗家门口都小心翼翼踮起脚尖。偶尔有人带着相机光顾书铺街，我是不稀得指路的，好像外来者闯进了自己的乐园。爸爸在穿梭在巷子里各户人家安装修理水电，点一根烟，拧一个螺丝，平凡充实。我喜欢抬起下巴指着屋顶的太阳能，不经意对儿时的玩伴说，“哟，这家又是我爸爸装的，上次数到多少台了来着。”妈妈在书铺街广场跳广场舞，和镇上的姊妹们议论着谁家的谁谁。奶奶好像永远都穿着围裙，喜欢捧着碗和街坊们开时事大会，探讨小镇时蔬物价的合理性。时光荏苒，我早就不在巷子里疯跑，巷子里也贴上了很多亮堂堂的牌匾，爸爸的店搬到了新街上，老房子旁的羁绊牵连随着搬家渐行渐远。但总有孩童在巷子里不知疲倦地跑着，爸爸还是在给小镇安装水电，妈妈最近学了新舞，奶奶又发明了新的菜肴。家乡的风土人文塑造了我的性格，伴随着我的成长。

谢谢我亲爱的家人，毛头小子咕咕落地是二十一年前了，家人们给予我无尽的关心和爱。打记事起，奶奶无微不至的照顾我，说来惭愧，奶奶从小到大的陪伴让我一直过着衣来伸手，饭来张口的生活。谢谢奶奶不求回报地为我，为家默默的付出。爸爸妈妈为了家忙前忙后，不辞辛劳地打拼，除了给我基本的物质保障，在各方面严格地要求我，教我坚韧，教我谦逊内敛，我的所有优点（如果说有的话哈哈哈），好的品德大都来自这两个大半辈子都在中国偏远小镇上劳作的两个平凡却伟大的人。谢谢我的长辈们，外婆、姑婆们、姑姑们、舅舅、小姨们在我成长路上指点迷津。谢谢这个充满爱的大家庭，造就了今天的我。

谢谢我的老师们，无畏后生自迈进学堂起过去十七年了。从小学到大学，许多老师们给了我许许多多的帮助。幼儿园王琴老师、小学班主任吴慧芬老师、小学数学老师朱禹民、陈竞芳老师、初中班主任丁仙华老师、英语老师朱琴芝老师、高中班主任徐高东老师和纪燕敏老师（果然我还是把致谢写成了花名册哈哈哈）教会我许多微不足道但却让我一生受益的行为规范。我在一个升学压力、应试竞争压力与工业化水平完全不匹配的“才子之乡”受教育，老师们不仅教会我知识，更教会我坚持，给了我不到最后一刻绝不放弃的毅力与决心。更重要的，谢谢老师们让我在这个失败成本很大的时代里，拥有直面失败的勇气以及不断试错的信心。

谢谢我的母校北京邮电大学，懵懂的少年拖着行李箱站在沙河校区校门口已经是四年前了。这四年来的生快乐而充实，谢谢学校给予我世界一流的教育，谢谢后勤阿姨叔叔们默默的付出，谢谢学业班主任王小卉老师在我最黑暗的时刻用亲身经历开导我，让我面对失败时走出沮丧。谢谢学术导师崔岩松老师不厌其烦地给予我帮助。谢谢黄德兴、齐皓清等好朋友们，室友们理解与宽容。谢谢与小西瓜的相遇，谢谢我们一起走过的无数小欢喜。也谢谢自己，四年的光阴不被虚度，不愧于心。

谢谢所有我爱的和爱我的人们，今后别离的日子里，早安，午安，晚安。

## 附录

### 附录 1 单层石墨烯光导

单层石墨烯光导的推导方式与双层石墨烯类似，即：能带结构结合 Kubo 机理，由于结构更为简单，最终公式表达形式也更为简单：

$$\begin{aligned}\sigma_s(\omega, \mu_c, \tau, T) = & -\frac{ie^2(\omega + i/\tau)}{\pi\hbar^2} \left[ \frac{1}{(\omega + i/\tau)^2} \int_0^{+\infty} E \left( \frac{\partial f_d(E)}{\partial E} - \frac{\partial f_d(-E)}{\partial E} \right) dE \right. \\ & \left. - \int_0^{+\infty} \frac{f_d(-E) - f_d(E)}{(\omega + i/\tau)^2 - 4(E/\hbar)^2} dE \right]\end{aligned}$$

其中  $\omega$  为角频率， $\mu_c$  为化学势， $\tau$  为弛豫时间， $T$  为开尔文温度， $f_d(E)$  为费米-狄拉克分布  $f_d(E) = \left( e^{\frac{E-\mu_c}{k_B T}} + 1 \right)^{-1}$ ， $k_B$  为玻尔兹曼常数，或者表述为：

$$\sigma_s(\omega, \mu_c, \tau, T) = \sigma_{s,\text{intra}} + \sigma_{s,\text{inter}}$$

其中  $\sigma_{s,\text{intra}}$  和  $\sigma_{s,\text{inter}}$  分别表示与单层石墨烯带内，带间相关的光导， $\sigma_{s,\text{intra}} = \frac{ie^2 k_B T}{\pi\hbar^2 (\omega + i/\tau)} \left( \frac{\mu_c}{k_B T} + 2 \ln \left( e^{-\frac{\mu_c}{k_B T}} + 1 \right) \right)$ ， $\sigma_{s,\text{inter}} = \frac{ie^2 (\omega + i/\tau)}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{f_d(-E) - f_d(E)}{\left( \omega + \frac{i}{\tau} \right)^2 - 4(E/\hbar)^2} dE$ ，下给出正文中单层石墨烯的光导图：

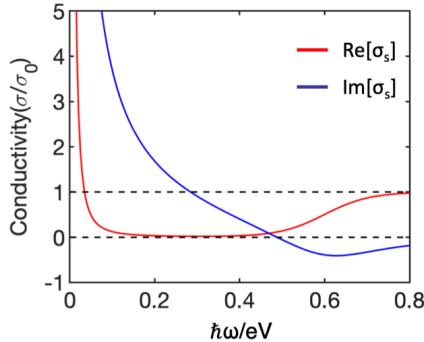


图 1 单层石墨烯光导，参数与正文一致， $\mu_c = 0.3$  eV， $T = 300$  K， $\tau = \hbar/(2\eta)$

$$, \quad \eta = 10/(2\pi) \text{ mV}$$

### 附录 2. 求解双层石墨烯光导的另一方式<sup>[36]</sup>

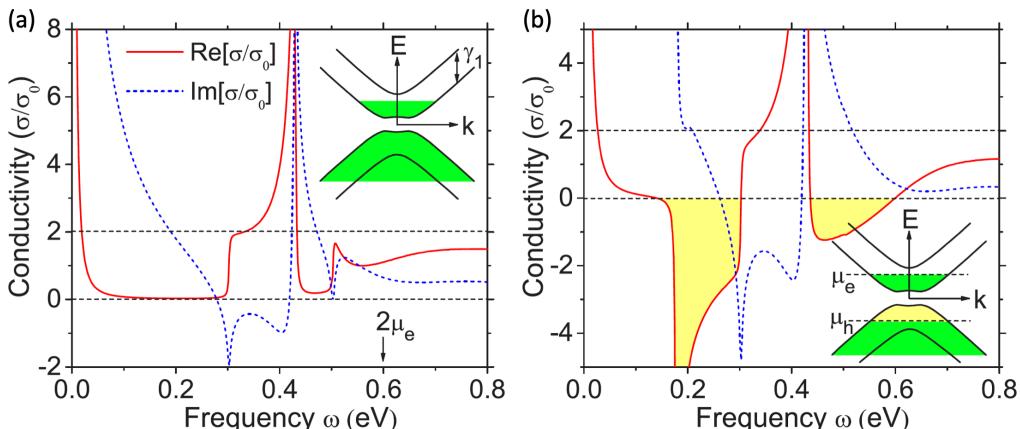


图 2<sup>[36]</sup>正文图 2-4 的标准对比图， $\eta = 10$  meV，其他参数与图 2-4 一致。(a)平衡态双层石墨烯；(b)光激发双层石墨烯

# 外文译文

## 1.1 外文原文

SCIENCE ADVANCES | RESEARCH ARTICLE

### MATERIALS SCIENCE

## Splashing transients of 2D plasmons launched by swift electrons

Xiao Lin,<sup>1,2</sup> Ido Kaminer,<sup>2\*</sup> Xihang Shi,<sup>3</sup> Fei Gao,<sup>3</sup> Zhaoju Yang,<sup>3</sup> Zhen Gao,<sup>3</sup> Hrvoje Buljan,<sup>4</sup> John D. Joannopoulos,<sup>2</sup> Marin Soljačić,<sup>2</sup> Hongsheng Chen,<sup>1,\*</sup> Baile Zhang<sup>3,5\*</sup>

2017 © The Authors,  
some rights reserved;  
exclusive licensee  
American Association  
for the Advancement  
of Science. Distributed  
under a Creative  
Commons Attribution  
NonCommercial  
License 4.0 (CC BY-NC).

Launching of plasmons by swift electrons has long been used in electron energy-loss spectroscopy (EELS) to investigate the plasmonic properties of ultrathin, or two-dimensional (2D), electron systems. However, the question of how a swift electron generates plasmons in space and time has never been answered. We address this issue by calculating and demonstrating the spatial-temporal dynamics of 2D plasmon generation in graphene. We predict a jet-like rise of excessive charge concentration that delays the generation of 2D plasmons in EELS, exhibiting an analog to the hydrodynamic Rayleigh jet in a splashing phenomenon before the launching of ripples. The photon radiation, analogous to the splashing sound, accompanies the plasmon emission and can be understood as being shaken off by the Rayleigh jet-like charge concentration. Considering this newly revealed process, we argue that previous estimates on the yields of graphene plasmons in EELS need to be reevaluated.

### INTRODUCTION

Since the first successful confirmation of surface plasmons (1, 2) on the platform of thin metal films, swift electrons have long been used to investigate plasmonic properties of ultrathin, or two-dimensional (2D), electron systems, including graphene plasmons recently (3–10). Electron energy-loss spectroscopy (EELS) (1, 3, 11), which uses swift electrons as a probe, has been an indispensable tool in studying 2D plasmons. On the other hand, despite the long history of studies of 2D plasmons (1, 2), the dynamic mechanism of how a swift electron launches 2D plasmons has never been clearly revealed.

This is because the impact of an electron will generate not only plasmons but also photons [the so called “transition radiation” (12, 13)], whose emission cannot be achieved at a single space-time point but demands a finite space-time region. Historically, the concepts of “formation time” and “formation zone” [that is, “it takes a relatively long time and, therefore, a long distance for an energetic electron to create a photon,” as retailed by Uggerhøj (14)] were first presented by Ter-Mikaelian in Landau’s seminar in 1952 (15). Landau strongly opposed these concepts at first (15), but soon realized their correctness and significance and further developed them in the Landau-Pomeranchuk-Migdal effect, which was experimentally confirmed 40 years later. The existence of formation time and formation zone reflects our ignorance about the exact moment and location at which a photon is generated. In the early days of the quantum uncertainty principle, Bohr already commented on the impossibility of describing the electron-photon interaction “without considering a finite space-time region” (16). Later, it was Ginzburg and colleagues (12, 13) who included the formation time and formation zone with mathematical form into the classical framework of transition radiation (established by Ginzburg and Frank in 1945) while still admitting that “comparatively little is known.”

Although the above space-time discussions in the context of photon emission have lasted for decades, similar discussions have never been conducted on the generation of plasmons in EELS experiments. This explains why the spatiotemporal process of 2D plasmon launching by a swift electron remains elusive after a long research history.

In this paper, we introduce the concepts of formation time and formation zone into plasmon generation in EELS. On the platform of a graphene monolayer, we show within the framework of classical electrodynamics the dynamical process of 2D plasmon launching by a swift electron affecting on the graphene monolayer (see movie S1 for this process). We link this dynamical process during the formation time of graphene plasmons to the deep-water hydrodynamic splashing phenomenon, in which a picosecond jet-like rise of excessive charge concentration is formed on graphene as an analog of the “Rayleigh jet” (also called “Worthington jet”) in hydrodynamic splashing (17, 18). In this newly revealed physical process, a significant part of electromagnetic energy has already been dissipated before graphene plasmons are generated. In view of this consideration, we show that previous estimates of graphene plasmon yields (3–6) from the electron energy-loss (EEL) spectra need to be reevaluated. Note that although we adopt graphene as the platform, our analysis is general in any 2D electron system. In addition, although the formal similarity of dispersion between hydrodynamic water waves and 2D electron systems (19–23) [including graphene plasmons (24, 25)] has been investigated with some hydrodynamic wave-like phenomena predicted (26–29), the analog to the splashing phenomenon has never been discussed.

Downloaded from https://www.science.org on May 22, 2022

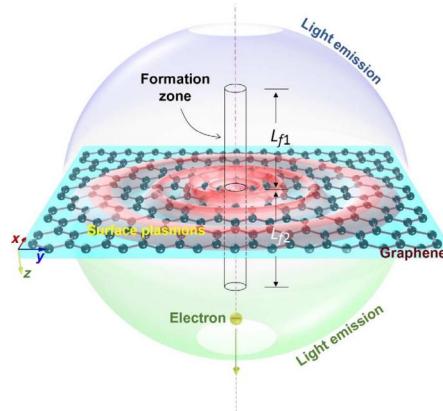
### RESULTS

#### Modeling of 2D plasmon launching by swift electrons

The model of calculation is schematically shown in Fig. 1. We consider a swift electron with charge  $q$ , moving with a velocity  $\bar{v} = \hat{z}v = \hat{z}\beta c$ , where  $c$  is the speed of light in free space. Because the energy loss of the electron (coupled to plasmons and transition radiation) is much lower than the electron’s kinetic energy, the electron’s velocity is treated as constant (13). The space-time dependence of the current density due to the electron is classically described as  $j^d(\vec{r}, t) = \hat{z}j_z^d(\vec{r}, t) = \hat{z}qv\delta(\vec{r} - \vec{vt})$ , in which  $t = 0$  when the electron goes through the origin. A graphene layer is located at the interface between medium 1 ( $z < 0$ ) with permittivity  $\epsilon_1, \epsilon_0$  and medium 2 ( $z > 0$ ) with

<sup>1</sup>State Key Laboratory of Modern Optical Instrumentation, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China. <sup>2</sup>Department of Physics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139, USA. <sup>3</sup>Division of Physics and Applied Physics, School of Physical and Mathematical Sciences, Nanyang Technological University, Singapore 637371, Singapore. <sup>4</sup>Department of Physics, University of Zagreb, Bijenička c. 32, 10000 Zagreb, Croatia. <sup>5</sup>Centre for Disruptive Photonic Technologies, Nanyang Technological University, Singapore 637371, Singapore.

\*Corresponding author. Email: kaminer@mit.edu (I.K.); hansomchen@zju.edu.cn (H.C.); blzhang@ntu.edu.sg (B.Z.)



**Fig. 1.** Schematic of 2D plasmons launching with a swift electron penetrating through a graphene monolayer.  $L_{f1}$  and  $L_{f2}$  are the lengths of the formation zone in the region above and below the graphene layer, respectively.

permittivity  $\epsilon_2/\epsilon_0$ , where  $\epsilon_0$  is the permittivity of free space. To simplify the analysis, we set mediums 1 and 2 to be free space. As a typical 2D electron system, graphene can be characterized by two macroscopic variables (24): the deviation of the electron density from its average value  $\delta n(\bar{r}, t)$  and the associated current density  $\delta \vec{j}(\bar{r}, t)$ , which depends on graphene's surface conductivity  $\sigma_s$ . Here, we calculate graphene's surface conductivity based on the Kubo formula (see section S2) (30, 31) and set the relaxation time to  $\tau = 0.5$  ps and the chemical potential in graphene to  $\mu_c = 0.4$  eV [well within experimental capabilities (32, 33)]. Because of the rotational symmetry of the system, all fields must be transverse magnetic and thus can be characterized by an electric field component  $E_z$  in the  $\hat{z}$  direction. By decomposing all the quantities into Fourier components in time and in the coordinates  $\bar{r}_\perp = \hat{x}x + \hat{y}y$  with corresponding wavevectors  $\hat{k}_\perp = \hat{x}k_x + \hat{y}k_y$ , we have

$$J_z^q(\bar{r}, t) = \int j_{\hat{k}_\perp, 0}(z) e^{i(\hat{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp - \omega t)} d\hat{k}_\perp d\omega \quad (1)$$

$$E_z(\bar{r}, t) = \int E_{\hat{k}_\perp, 0}(z) e^{i(\hat{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp - \omega t)} d\hat{k}_\perp d\omega \quad (2)$$

By writing the fields due to the electron field as  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^q$  and the radiation fields in regions of  $z < 0$  and  $z > 0$  as  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^1$  and  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^2$  we can get the total fields in regions of  $z < 0$  and  $z > 0$  as  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^q + E_{\hat{k}_\perp, 0}^1$  and  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^q + E_{\hat{k}_\perp, 0}^2$ , respectively. Derivation from matching boundary conditions at the graphene plane shows phase relations of  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^q \sim \exp(i\omega z/v)$  and  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^{1,2} \sim \exp(\mp i\omega z/c\sqrt{1 - \kappa_\perp^2 c^2/\omega^2})$ , where “ $\mp$ ” in the exponent corresponds to “ $1,2$ ” in the superscript of  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^{1,2}$  and  $\kappa_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$  (see section S2).

#### Formation zone and formation time

Ginzburg estimated the length of the formation zone (denoted as “formation length”  $L_f$ ) for photon emission in transition radiation based on the following considerations (13). Inside the formation zone, the total energy of the fields  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^q + E_{\hat{k}_\perp, 0}^{1,2}$  is proportional to  $(E_{\hat{k}_\perp, 0}^q + E_{\hat{k}_\perp, 0}^{1,2})^2$ . The length  $L_f$  describes a boundary at which the total

energy becomes practically equal to the sum of the energy of the electron field [that is,  $(E_{\hat{k}_\perp, 0}^q)^2$ ] and the energy of the radiation field [that is,  $(E_{\hat{k}_\perp, 0}^{1,2})^2$ ] meaning that the electron field and the radiation field are separated from each other. That is, the interference term  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^q \cdot E_{\hat{k}_\perp, 0}^{1,2}$  must play a trivial role. Ginzburg thus set the phase difference of  $2\pi$  between  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^q$  and  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^{1,2}$  to determine the length  $L_f$ . That is,  $\frac{\omega L_f}{v} \pm \frac{\omega L_f}{c} \sqrt{1 - \frac{\kappa_\perp^2 c^2}{\omega^2}} = 2\pi$ , which gives

$$L_{f1} = \frac{2\pi}{|\frac{\omega}{v} + \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \frac{\kappa_\perp^2 c^2}{\omega^2}}|}, L_{f2} = \frac{2\pi}{|\frac{\omega}{v} - \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \frac{\kappa_\perp^2 c^2}{\omega^2}}|} \quad (3)$$

where  $L_{f1}$  and  $L_{f2}$  correspond to the length of the formation zones in regions of  $z < 0$  and  $z > 0$ , respectively (see Fig. 1). Apparently, the formation length depends not only on the frequency of emitted photons and the swift electron's velocity but also on the emission angle of photons. As a numerical example, with the electron's velocity  $v = 0.8c$ , to emit a photon at frequency 10 THz in the backward  $-\hat{z}$  direction ( $\kappa_\perp^2 = 0$ ), it takes the electron about  $\frac{L_{f1}}{v} = 0.06$  ps to accomplish it. For photon emission in the forward  $+\hat{z}$  direction ( $\kappa_\perp^2 = 0$ ) at the same frequency, it takes about  $\frac{L_{f2}}{v} = 0.5$  ps. These time intervals of 0.06 and 0.5 ps are considered as formation times for the backward and forward photon emission at 10 THz.

Ginzburg's estimation only applies to photon emission with the condition  $\kappa_\perp^2 < \omega^2/c^2$  to satisfy the square root in Eq. 3. Yet, it is well known that surface plasmons have  $\kappa_\perp^2 > \omega^2/c^2$ . Compared to the electron-photon interaction as analyzed by Ginzburg, in the interaction between the electron and surface plasmons, only the electron field has phase variation along the  $z$  axis, whereas the surface plasmons have zero phase variation. Therefore, along the line of Ginzburg's thought, the phase difference of  $2\pi$  between  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^q$  and  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^{1,2}$  should only come from  $E_{\hat{k}_\perp, 0}^q$ , that is,  $\frac{\omega L_f}{v} = 2\pi$ . This gives

$$L_{f1} = L_{f2} = \frac{2\pi v}{\omega} \quad (4)$$

Numerically, it means that it will take the electron about  $(L_{f1} + L_{f2})/v = 0.2$  ps to launch a 2D plasmon at 10 THz. The value 0.2 ps is considered as the formation time for the 2D plasmon at 10 THz.

#### Transients of photon emission

It is interesting to see what happens during the formation time of 2D plasmons when the electron goes through the formation zone, as schematically illustrated in Fig. 1. The dynamical process of photon emission and 2D plasmon launching by a swift electron moving with  $v = 0.8c$  (or kinetic energy 340 keV), which can be conveniently realized in modern electron microscope systems (1, 34), is shown in movie S1. (The relatively large velocity considered in this simulation shows that our theoretical analysis is not limited to low electron speeds.) The bandwidth of calculation is from 0 to 20 THz, as justified in fig. S3. Figure 2 shows the temporal evolution of photon emission. When the incident electron moves close to the graphene interface (Fig. 2A), its evanescent field touches graphene, expelling the conduction electrons from the vicinity of the swift electron's trajectory. Because of electromagnetic induction, the induced surface current in turn blocks the penetration of the evanescent electron field by accumulating fields on the upper side of graphene (Fig. 2, A and B). Immediately after the electron crosses the

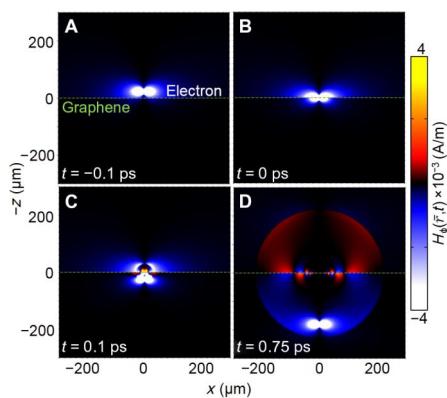
Downloaded from https://www.science.org on May 22, 2022

graphene (Fig. 2, B and C), the fields previously accumulated on the upper side have lost direct contact with the electron and thus are “shaken off” into the upper space. Meanwhile, the insufficient fields on the lower side of graphene need to recover their strength in the presence of the electron and thus “shake off” radiation into the lower space (Fig. 2, C and D). It can be seen that, at the central frequency (10 THz) of the calculation bandwidth, the formation time of 0.06 ps for the backward radiation is consistent with Fig. 2 (A and B) and that of 0.5 ps for the forward radiation is consistent with Fig. 2 (C and D).

#### Transients of 2D plasmon launching

Of greater interest is the charge motion on graphene itself. We plot the dynamics of the deviation of electron density from its average value  $\delta n(\vec{r}, t)$  on graphene during the penetration of the swift electron in Fig. 3. Similarities to the hydrodynamic splashing scenario caused by a little droplet falling on a 2D liquid surface are evident, as described below.

First, in hydrodynamics (17, 18), when a small droplet affects a calm, deep-water surface, a crater is formed first and water splashes to the side.



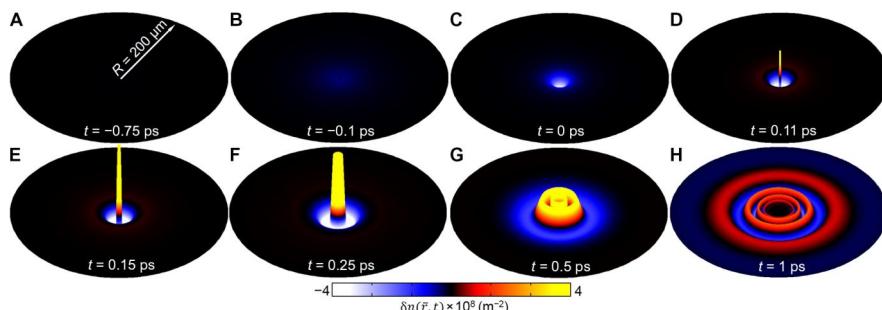
**Fig. 2. Time evolution of magnetic field  $H_o(\vec{r}, t)$  when a swift electron perpendicularly penetrates through a graphene monolayer.** The green dashed line represents graphene. The electron is located (A) above graphene, (B) at graphene, and (C) below graphene.

As the water rushes back to fill the crater, a central jet column called the Rayleigh jet due to its instability (17), or the Worthington jet because Worthington performed extensive observations back in 1908 (17, 18), will rise above the initial water surface along the collapse axis. When it comes to charge motion on graphene, a “crater” of the density of conduction electron in graphene is first formed when the incident electron approaches the graphene layer (Fig. 3, A to C). Immediately after the penetration of the electron through the graphene layer, a rebound of the density of conduction electrons is formed with a central jet-like rise (Fig. 3, D and E), analogous to the hallmark of Rayleigh jet or Worthington jet in hydrodynamics. We observe, as in Fig. 3E, that the jet-like rise reaches its peak at about  $t = 0.15$  ps. Other analogs of this hydrodynamic splashing jet have also been widely discussed, including those occurring during the meteor impact (17, 18) and during the interaction between the highly focused femtosecond laser pulses and a metal film surface (35).

Second, after the central jet-like rise falls down, ripples of 2D plasmons propagate outward as concentric circles, as shown in Fig. 3, F to H. The excited 2D plasmons, which cover a broad spectrum of frequencies, gradually spread into a sequence of plasmonic ripples where longer-wavelength plasmons stay at the outer periphery and shorter-wavelength plasmons stay closer to the inner boundary (Fig. 3H). This is because the dispersion of 2D plasmons (including graphene plasmons) is typically  $\omega \propto \sqrt{\kappa_{\perp}}$  (24, 25), which is formally analogous to the dispersion of deep-water waves; this is reflected in the fact that longer wavelengths go out faster (see section S4), although they are formed later (for their longer formation times) than the shorter wavelengths.

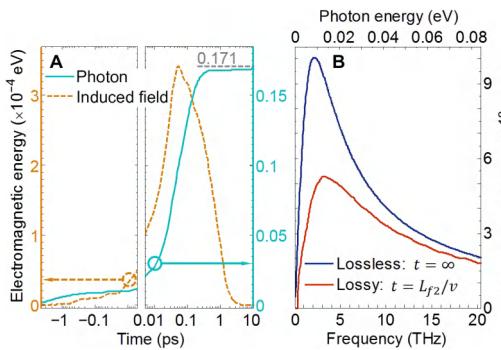
#### Energy of generated photons and 2D plasmons

We plot in Fig. 4A the time evolution of total radiated photon energy by numerically monitoring the Poynting power going through an imaginary sphere with a large radius  $R$  centered at the origin and then shifting the time axis backward by  $R/c$ , where the photon radiation is analogous to the sound emitted from a hydrodynamic splash. The total radiated photon energy eventually saturates and approaches a value of  $0.171 \times 10^{-4}$  eV that we calculate analytically by letting  $t = \infty$  (see the Supplementary Materials). It can be seen that most photon energy has been radiated out before  $t = 0.15$  ps, which is the moment when the jet-like rise of charge reaches its maximum (Fig. 3E) because most photon energy is shaken off by the charge jet. We also plot the time evolution of “energy” of the induced fields without considering the interference



**Fig. 3. Time evolution of the deviation of the electron density from its average value on graphene plane  $\delta n(\vec{r}, t)$  when a swift electron penetrates through a graphene monolayer.** The electron is located (A and B) above graphene, (C) at graphene, and (D to H) below graphene.

Downloaded from https://www.science.org on May 22, 2022



**Fig. 4. Energy dissipation during the plasmonic formation time.** (A) Time evolution of emitted photon energy and the induced field energy [related to the induced field strength  $(E_{k_{\perp},\omega}^{1,2})^2$ ]. (B) Energy spectra of graphene plasmons by taking  $t = \infty$  in the lossless case and by taking  $t = L_f2/v$  in the lossy case.

fields of the swift electron. Note that the 2D plasmons have not been fully generated before their formation times, so this energy should be treated as a parameter related to the field strength  $(E_{k_{\perp},\omega}^{1,2})^2$  of induced charges but not as the real energy. It can be seen that even before most photon energy is radiated out, the field strength of  $(E_{k_{\perp},\omega}^{1,2})^2$  has already started to drop.

We calculate the real energy of generated graphene plasmons by checking the electromagnetic energy for each frequency component immediately after the time  $t = L_f2/v$ . For the calculation spectrum of 2D plasmons from 0 to 20 THz, the corresponding formation time  $(L_f1 + L_f2)/v$  varies from  $\infty$  to 0.1 ps, whose duration is comparable to the propagation time ( $\sim 0.5$  ps) for graphene plasmons (see section S4). The energy loss during the formation time cannot be taken into account by simply resorting to the propagation time or propagation length of 2D plasmons that are widely used to characterize the propagation of graphene plasmons because this energy loss happens before the generation of 2D plasmons themselves.

Only in the ideal lossless situation can one equate the EEL spectrum to the energy spectrum of generated 2D plasmons (the energy of emitted photons generally occupies only <5% of the energy loss of the swift electron, and considerably less for lower electron velocities, and thus is negligible). We plot in Fig. 4B the spectrum of 2D plasmons in the ideal lossless situation by taking  $t = \infty$ , which exactly agrees with the EEL spectrum calculation (see sections S5 and S6 and fig. S4). We also plot in Fig. 4B the spectrum of 2D plasmons for the realistic lossy graphene (the relaxation time is finite) after formation time is taken into account by taking  $t = L_f2/v$ . The comparison between the lossless and lossy cases shows that a significant portion of energy (more than 25% total energy from 0 to 20 THz) has already been dissipated before 2D plasmons are generated. In addition, the losses in graphene, including those caused by defects, can be theoretically characterized by the relaxation time, where a smaller relaxation time indicates a larger loss. If more defects exist in the graphene sample, this will unavoidably degrade the relaxation time used in this work (0.5 ps), resulting in a larger loss in graphene, and it is thus expected that a larger portion of energy will be dissipated before 2D plasmons are generated.

## DISCUSSION

Recent advances in electron microscopy now suggest a new way to observe the temporal dynamics of the plasmons, including its ultrafast and subwavelength features, by using photon-induced near-field electron microscopy (7, 36). This exciting possibility will allow one to visualize the plasmonic splashing-like effects, instead of inferring them indirectly through EELS or transition radiation measurements.

Because graphene is just one typical example of many different 2D electron gas systems (19–23, 37, 38) that support 2D plasmons, our analysis could be applicable to any 2D electron system. Therefore, other 2D electron gas systems (19–23), and particularly other 2D materials (37, 38), will likely further enrich the potential implementations of plasmonic splashing-like transients. However, we argue that graphene is particularly suitable for this purpose because of the flexible tunability of the chemical potential and the recent advances in the fabrication of graphene samples with large area, high quality, and the precise control of the layer number. In addition, it is reported that van der Waals materials can support different kinds of polaritons (38), such as phonon polaritons in a boron nitride slab (37, 38). We thus expect more polaritonic splashing-like transient to be revealed in van der Waals materials.

The above results demonstrate the transients of 2D plasmon generation in EELS experiment. An intermediate process between the impact of the swift electron and the formation of 2D plasmons is revealed as a result of the space-time limitation on plasmon generation. This process is found to be analogous to the hydrodynamic splashing phenomenon. Explicit calculation that takes into account the energy dissipation before 2D plasmons are generated has shown that previous estimates on the yields of graphene plasmons in EELS under the assumption of negligible loss need to be reevaluated.

## MATERIALS AND METHODS

Our rigorous analytical calculations are based on an extension of Ginzburg and Frank's theory on transition radiation within the framework of macroscopic electrodynamics. This can give us an analytical expression of the radiated fields induced by swift electrons. From this, we can further analytically derive the spectrum of emitted photons; with the assumption of trivial losses in the calculated system, we can also analytically derive the EEL spectrum. Because the EEL spectrum is derived without the assumption of the electrostatic approximation, our analytical formula of the EEL spectrum is applicable to the cases with high electron kinetic energies. Furthermore, by choosing the appropriate Sommerfeld branch cut and using the Sommerfeld integration path, numerical calculation of the radiated fields at different times can be carried out. Therefore, the emitted photon energy, the induced field energy, and the energy spectrum of induced charges on lossy graphene at different times can be numerically obtained by applying these numerically calculated radiated fields.

Downloaded from https://www.science.org on May 22, 2022

## SUPPLEMENTARY MATERIALS

Supplementary material for this article is available at <http://advances.sciencemag.org/cgi/content/full/3/1/e1601192/DC1>

- section S1. Figure caption of movie S1.
- section S2. Photon emission from graphene affected by swift electrons.
- section S3. Energy spectrum of induced charges on graphene.
- section S4. Dispersion relation and propagation length/time of graphene plasmons.
- section S5. Analytical EEL spectrum.
- section S6. Comparison of EEL spectra between previous work and our result.
- section S7. Total energy of emitted photons.

- section S8. Numerical implementation with Sommerfeld integration.  
 fig. S1. Dispersion curve of TM graphene plasmons.  
 fig. S2. Propagation time of TM graphene plasmons as a function of frequency.  
 fig. S3. EEL spectrum when an electron normally incident on an ideal lossless graphene layer.  
 fig. S4. EEL spectra for an electron normally incident on graphene.  
 movie S1. Time evolution of 2D plasmons launched by swift electrons.  
 References (39–52)

## REFERENCES AND NOTES

- F. J. García de Abajo, Optical excitations in electron microscopy. *Rev. Mod. Phys.* **82**, 209–275 (2010).
- R. H. Ritchie, Plasma losses by fast electrons in thin films. *Phys. Rev.* **106**, 874 (1957).
- F. J. García de Abajo, Multiple excitation of confined graphene plasmons by single free electrons. *ACS Nano* **7**, 11409–11419 (2013).
- Y. Liu, R. F. Willis, K. V. Emstov, T. Seyller, Plasmon dispersion and damping in electrically isolated two-dimensional charge sheets. *Phys. Rev. B* **78**, 201403 (2008).
- R. J. Koch, T. Seyller, J. A. Schaefer, Strong phonon-plasmon coupled modes in the graphene/silicon carbide heterosystem. *Phys. Rev. B* **82**, 201413 (2010).
- S. Y. Shin, N. D. Kim, J. G. Kim, K. S. Kim, D. Y. Noh, K. S. Kim, J. W. Chung, Control of the  $\pi$  plasmon in a single layer graphene by charge doping. *Appl. Phys. Lett.* **99**, 082110 (2011).
- L. Piazza, T. T. A. Lummen, E. Quiñonez, Y. Murooka, B. W. Reed, B. Barwick, F. Carbone, Simultaneous observation of the quantization and the interference pattern of a plasmonic near-field. *Nat. Commun.* **6**, 6407 (2015).
- W. Zhou, J. Lee, J. Nanda, S. T. Pantelides, S. J. Pennycook, J. C. Idrobo, Atomically localized plasmon enhancement in monolayer graphene. *Nat. Nanotechnol.* **7**, 161–165 (2012).
- J. Song, L. Zhang, Y. Xue, Q. Y. S. Wu, F. Xia, C. Zhang, Y.-L. Zhong, Y. Zhang, J. Teng, M. Premaarthi, C.-W. Qiu, Q. Bao, Efficient excitation of multiple plasmonic modes on three-dimensional graphene: An unexplored dimension. *ACS Photon.* **3**, 1986–1992 (2016).
- Y. Lu, J. Song, J. Yuan, L. Zhang, S. Q. Y. Wu, W. Yu, M. Zhao, C.-W. Qiu, J. Teng, K. P. Loh, C. Zhang, Q. Bao, Highly efficient plasmon excitation in graphene-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> heterostructure. *J. Opt. Soc. Am. B* **33**, 1842–1846 (2016).
- M. Zhao, M. Bosman, M. Danesh, M. Zeng, P. Song, Y. Darma, A. Rusydi, H. Lin, C.-W. Qiu, K. P. Loh, Visible surface plasmon modes in single Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> nanoplate. *Nano Lett.* **15**, 8331–8335 (2015).
- V. L. Ginzburg, Transition radiation and transition scattering. *Phys. Scripta* **T2**, 182–191 (1982).
- V. L. Ginzburg, V. N. Tsytovich, *Transition Radiation and Transition Scattering* (CRC Press, 1990).
- U. I. Uggerhøj, The interaction of relativistic particles with strong crystalline field. *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1131–1171 (2005).
- I. M. Khalatnikov, J. B. Sykes, *Landau, the Physicist and the Man: Recollections of L.D. Landau* (Pergamon Press, 1989).
- N. Bohr, The quantum postulate and the recent development of atomic theory. *Nature* **121**, 580–590 (1928).
- M. Rein, Phenomena of liquid drop impact on solid and liquid surface. *Fluid Dyn. Res.* **12**, 61–93 (1993).
- A. M. Worthington, *A Study of Splashes* (Longmans, Green and Co, 1908).
- F. Stern, Polarizability of a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.* **18**, 546 (1967).
- A. Eguiluz, T. K. Lee, J. J. Quinn, K. W. Chiu, Interface excitations in metal-insulator-semiconductor structures. *Phys. Rev. B* **11**, 4989 (1975).
- A. V. Chaplik, Possible crystallization of charge carriers in low-density inversion layers. *J. Exp. Theor. Phys.* **62**, 746–753 (1972).
- T. N. Theis, J. P. Kotthaus, P. J. Stiles, Wavevector dependence of the two-dimensional plasmon dispersion relationship in the (100) silicon inversion layer. *Solid State Commun.* **26**, 603–606 (1978).
- S. D. Sarma, A. Madhukar, Collective modes of spatially separated, two-component, two-dimensional plasma in solids. *Phys. Rev. B* **23**, 805–815 (1981).
- A. N. Grigorenko, M. Polini, K. S. Novoselov, Graphene plasmonics. *Nat. Photonics* **6**, 749–758 (2012).
- M. Jablan, H. Buljan, M. Soljačić, Plasmonics in graphene at infrared frequencies. *Phys. Rev. B* **80**, 245435 (2009).
- M. Dyakonov, M. Shur, Shallow water analogy for a ballistic field effect transistor: New mechanism of plasma wave generation by dc current. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2465 (1993).
- D. Svintsov, V. Vyurkov, V. Ryzhii, T. Otsuji, Hydrodynamic electron transport and nonlinear waves in graphene. *Phys. Rev. B* **88**, 245444 (2013).
- A. O. Govorov, J. J. Heremans, Hydrodynamic effects in interacting Fermi electron jets. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 026803 (2004).
- A. P. Dmitriev, A. S. Furman, V. Yu. Kachorovskii, G. G. Samsonidze, Numerical study of the current instability in a two-dimensional electron fluid. *Phys. Rev. B* **55**, 10319 (1997).
- V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, J. P. Carbotte, Unusual microwave response of Dirac quasiparticles in graphene. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 256802 (2006).
- L. A. Falkovsky, A. A. Varlamov, Space-time dispersion of graphene conductivity. *Eur. Phys. J. B* **56**, 281–284 (2007).
- U. N. Maiti, W. J. Lee, J. M. Lee, Y. Oh, J. Y. Kim, J. E. Kim, J. Shim, T. H. Han, S. O. Kim, 25th anniversary article: Chemically modified/doped carbon nanotubes & graphene for optimized nanostructures & nanodevices. *Adv. Mater.* **26**, 40–67 (2014).
- A. Woessner, M. B. Lundeberg, Y. Gao, A. Principi, P. Alonso-González, M. Carrega, K. Watanabe, T. Taniguchi, G. Vignale, M. Polini, J. Hone, R. Hillenbrand, F. H. L. Koppens, Highly confined low-loss plasmons in graphene-boron nitride heterostructures. *Nat. Mater.* **14**, 421–425 (2015).
- N. Yamamoto, K. Araya, A. Toda, H. Sugiyama, Light emission from surfaces, thin films and particles induced by high-energy electron beam. *Surf. Interface Anal.* **31**, 79–86 (2001).
- V. K. Valev, D. Denkova, X. Zheng, A. I. Kuznetsov, C. Reinhardt, B. N. Chichkov, G. Tsutsumanova, E. J. Osley, V. Petkov, B. D. Clercq, A. V. Silhanek, Y. Jayaram, V. Vol'skiy, P. A. Warburton, G. A. E. Vandembosch, S. Russev, O. A. Aktipetrov, M. Ameloot, V. V. Moshchalkov, T. Verbiest, Plasmon-enhanced sub-wavelength laser ablation: plasmonic nanojets. *Adv. Mater.* **24**, OP29–OP35 (2012).
- B. Barwick, D. J. Flannigan, A. H. Zewail, Photon-induced near-field electron microscopy. *Nature* **462**, 902–906 (2009).
- F. Xia, H. Wang, D. Xiao, M. Dubey, A. Ramasubramanian, Two-dimensional material nanophotonics. *Nat. Photon.* **8**, 899–907 (2014).
- D. N. Basov, M. M. Fogler, F. J. García de Abajo, Polaritons in van der Waals materials. *Science* **354**, aag1992 (1992).
- V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, J. P. Carbotte, Magneto-optical conductivity in graphene. *J. Phys. Condens. Mat.* **19**, 026222 (2007).
- S. A. Mikhailov, K. Ziegler, New electromagnetic mode in graphene. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 016803 (2007).
- G. W. Hanson, Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene. *J. Appl. Phys.* **103**, 064302 (2008).
- Z. Fei, A. S. Rodin, G. O. Andreev, W. Bao, A. S. McLeod, M. Wagner, L. M. Zhang, Z. Zhao, M. Thiemens, G. Dominguez, M. M. Fogler, A. H. Castro Neto, C. N. Lau, F. Keilmann, D. N. Basov, Gate-tuning of graphene plasmons revealed by infrared nano-imaging. *Nature* **487**, 82–85 (2012).
- V. L. Ginzburg, V. N. Tsytovich, Several problems of the theory of transition radiation and transition scattering. *Phys. Rep.* **49**, 1–89 (1979).
- J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wiley & Sons, 1999).
- L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media* (Pergamon Press, 1984).
- E. H. Hwang, S. Das Sarma, Dielectric function, screening, and plasmons in two-dimensional graphene. *Phys. Rev. B* **75**, 205418 (2007).
- G. B. Whitham, *Linear and Nonlinear Waves* (John Wiley & Sons, 1974).
- W. C. Chew, *Waves and Fields in Inhomogeneous Media* (IEEE Press, 1995).
- X. Lin, R. Li, F. Gao, E. Li, X. Zhang, B. Zhang, H. Chen, Loss induced amplification of graphene plasmons. *Opt. Lett.* **41**, 681–684 (2016).
- J. V. Jelley, *Cerenkov Radiation and Its Applications* (Pergamon Press, 1958).
- B. Zhang, B.-I. Wu, Electromagnetic detection of a perfect invisibility cloak. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 243901 (2009).
- H. Chen, M. Chen, Flipping photons backward: Reversed Cherenkov radiation. *Mater. Today* **14**, 34–41 (2011).

**Acknowledgments:** We thank L. Lu for helpful discussions. **Funding:** This work was sponsored by the National Natural Science Foundation of China (grant nos. 61625502, 61574127, 61601408, and 61550110245), the Zhejiang Natural Science Foundation (grant no. LY17F010008), the Postdoctoral Science Foundation of China (grant no. 2015M581930), the Top-Notch Young Talents Program of China, the Innovation Joint Research Center for Cyber-Physical-Society System, the Nanyang Technological University for Nanyang Assistant Professorship Start-Up Grant, the Singapore Ministry of Education (grant nos. MOE2015-T2-1-070 and MOE2011-T3-1-005), the U.S. Army Research Laboratory and the U.S. Army Research Office through the Institute for Soldier Nanotechnologies (contract no. W911NF-13-D-0001), the Massachusetts Institute of Technology 53TEC Energy Frontier Research Center of the Department of Energy (grant no. de-sc0001299), the QuantiXLie Center of Excellence, and the Chinese Scholarship Council (CSC 201506320075). **Author contributions:** All authors contributed extensively to this work. B.Z. conceived the idea.

XL performed the main calculations. XS, ZY, FG, and ZG contributed to the numerical Sommerfeld integration and the analytical calculations on photon radiation. IK contributed to the EEL spectrum calculation. XL, IK, HB, JDJ, MS, HC, and BZ analyzed the data and discussed and interpreted the detailed results. IK, HC, and BZ supervised the project. All authors discussed, revised, and approved the manuscript. **Competing interests:** The authors declare that they have no competing interests. **Data and materials availability:** All data needed to evaluate the conclusions in the paper are present in the paper and/or the Supplementary Materials. Additional data related to this paper may be requested from the authors.

Submitted 26 May 2016  
Accepted 19 December 2016  
Published 27 January 2017  
10.1126/sciadv.1601192

**Citation:** X. Lin, I. Kaminer, X. Shi, F. Gao, Z. Yang, Z. Gao, H. Buljan, J. D. Joannopoulos, M. Soljačić, H. Chen, B. Zhang, Splashing transients of 2D plasmons launched by swift electrons. *Sci. Adv.* **3**, e1601192 (2017).

Downloaded from https://www.science.org on May 22, 2022

## 1.2 文章简介

浙江大学信电学院林晓博士（导师：陈红胜教授）关于高速带电粒子轰击二维材料时的瞬态电磁响应研究论文“Splashing transient of 2D plasmons by swift electrons”刊登在2017年1月27日出版的科学杂志子刊 *Science Advances* 上。该项工作由浙江大学陈红胜教授课题组与新加坡南洋理工大学张柏乐教授课题组、美国麻省理工学院 Soljacic 教授课题组等合作共同完成。

该工作源于好奇，是对自然现象在电磁辐射领域的重要推广。在流体力学中经常可见小雨滴滴落在二维水面时产生的 *splashing*（水花飞溅）情景，那么一个高速电子穿过超薄二维材料或者二维电子气系统，又会是怎样的瞬态电磁响应？自从利用高速电子探测到金属薄膜支持的表面等离子体激元，高速电子一直是研究表面等离子体激元的有效工具，如随之而发展的电子能量损失谱。虽然表面等离子体激元有超过半个世纪的研究历史，但高速电子激发表面等离子体激元的瞬态过程却一直没被清楚的揭示。这是因为电子撞击界面，不仅会产生表面等离子体激元，也会产生光子（所谓的“渡越辐射”）；光子的形成不是在某个时空点，而是需要有限的时空范围；尽管对光子形成所需时空的讨论已经持续多年，但对表面等离子体激元如何在时空中产生的类似讨论却还没有。

该研究工作，以石墨烯为研究平台，在经典电磁框架下，揭示了高速电子轰击单层石墨烯时产生二维表面等离子体激元的瞬态过程跟深水波 *splashing* 现象类似；石墨烯层上会形成一个皮秒级诱导电子浓度峰，这和 *splashing* 现象中标志性的 Rayleigh jet 类似。基于此新被揭示的瞬态电磁响应，该工作还发现，在二维表面等离子体激元完全形成前已有很大一部分电磁能量被损耗掉；该结果将对表面等离子体激元能谱的计算至关重要。

### 1.3 外文译文

#### 由快速电子发射的二维等离子体的飞溅瞬变

作者

Xiao Lin, Ido Kaminer, Xihang Shi, Fei Gao, Zhaoju Yang, Zhen Gao, Hrvoje Buljan,  
John D. Joannopoulos, Marin Soljačić, Hongsheng Chen, Baile Zhang

#### 摘要

由快电子发射的等离激元长期以来一直用于电子能量损失光谱 (EELS) 以研究超薄或二维 (2D) 电子系统的等离激元特性。然而，快速电子如何在空间和时间中产生等离子体的问题从未得到解答。我们通过计算和演示石墨烯中二维等离子体产生的时空演变来解决这个问题。我们预测过度电荷浓度的喷射状上升会延迟 EELS 中 2D 等离子体的产生，在涟漪发射之前表现出类似于流体动力学 Rayleigh 喷射的飞溅现象。光子辐射，类似于飞溅的声音，伴随着等离子体发射，可以理解为被 Rayleigh 射流般的电荷浓度所震荡。考虑到这一新发现的过程，我们认为需要重新评估之前对 EELS 中石墨烯等离子体激元的估计。

#### 介绍

自从在金属薄膜平台上首次成功确认表面等离激元 (1, 2)以来，快速电子长期以来一直被用于研究超薄或二维 (2D) 电子系统的等离激元特性，包括最近的石墨烯等离激元(3-10)。电子能量损失谱 (EELS) (1, 3, 11) 使用快电子作为探针，已成为研究二维等离子体不可缺少的工具。另一方面，尽管二维等离子体的研究历史悠久 (1, 2)，但快速电子如何发射二维等离子体的动力学机制从未被清楚地揭示。

这是因为电子的撞击不仅会产生等离子体，还会产生光子[所谓的“渡越辐射”(12, 13)]，其发射不能在单个时空点实现，而是需要有限的时空地区。从历史上看，“形成时

间”和“形成区”的概念 [即, “高能电子产生光子需要相对较长的时间, 因此需要较长的距离”, 由 Uggerhøj (14) 如是说] 由 Ter-Mikaelian 于 1952 年在 Landau 的组会上首次提出 (15)。

朗道起初强烈反对这些概念 (15), 但很快意识到它们的正确性和重要性, 并在 40 年后被实验证实的 Landau-Pomeranchuk-Migdal 效应中进一步发展了它们。形成时间和形成区域的存在反映了我们对光子产生的确切时刻和位置的无知。在量子不确定性原理的早期, 玻尔已经评论过“不考虑有限时空区域”是不可能描述电子光子相互作用的 (16)。后来, 是 Ginzburg 和他的同事 (12、13) 将形成时间和形成区以数学形式纳入了经典的过渡越辐射框架 (由 Ginzburg 和 Frank 于 1945 年建立), 同时仍然承认“相对而言知之甚少”。

尽管上述在光子发射背景下的时空讨论已经持续了数十年, 但 EELS 实验中等离子体激元的产生从未进行过类似的讨论。这解释了为什么在漫长的研究历史之后, 快速电子发射二维等离子体的时空过程仍然难以捉摸。

在本文中, 我们将形成时间和形成区域的概念引入到 EELS 中的等离子体生成中。在石墨烯单层的平台上, 我们在经典电动力学的框架内展示了由影响石墨烯单层的快速电子发射的二维等离子体的动力学过程 (该过程参见影片 S1)。我们将石墨烯等离激元形成期间的这一动力学过程与深水流体动力学飞溅现象联系起来, 其中在石墨烯上形成皮秒喷射状的过度电荷浓度上升, 类似于“Rayleigh 喷射”(也称为“Worthington jet”) 在流体动力飞溅中 (17, 18)。在这个新揭示的物理过程中, 很大一部分电磁能在石墨烯等离子体产生之前就已经消散了。鉴于这种考虑, 我们表明需要重新评估先前从电子能量损失 (EEL) 光谱中估计的石墨烯等离子体激元产率 (3-6)。请注意, 虽然我们采用石墨烯作为平台, 但我们的分析在任何二维电子系统中都是通用的。此外, 尽管有研究已经阐述了流体动力水波和二维电子系统 (19-23) [包括石墨烯等离子体 (24, 25)] 之间色散的形式相似性, 并预测了一些类似流体动力波的现象 (26-29)。但类似于飞溅的现象从未讨论过。

## 结果

### 快速电子发射二维等离子体的建模

计算模型如图 1 所示。我们考虑一个带电荷的快速电子, 以速度  $\bar{v} = \hat{z}v = \hat{z}\beta v$  运动, 其中  $c$  是真空中的光速。因为电子的能量损失 (耦合到等离子体和渡越辐射) 远低于电子的动能, 所以电子的速度被视为常数 (13)。由电子引起的电流密度的时空依赖性经典地描述为  $\bar{J}^q(\bar{r}, t) = \hat{z}J^q = \hat{z}qv\delta(x)\delta(y)\delta(z - vt)$ , 当电子经过原点时,  $t = 0$ 。石墨烯层位于介电常数分别为  $\epsilon_{1r}\epsilon_0$  的介质 1 ( $z < 0$ ) 和  $\epsilon_{2r}\epsilon_0$  的介质 2 ( $z > 0$ ) 之间的界面处, 其中  $\epsilon_0$  为真空介电常数。

为了简化分析, 我们将介质 1 和 2 设置为真空。作为典型的二维电子系统, 石墨烯可以通过两个宏观变量来表征 (24): 与电子密度平均值的偏移量  $\delta n(\bar{r}, t)$  和相关的电流密度  $\delta\bar{J}(\bar{r}, t)$ , 这取决于石墨烯的表面电导率  $\sigma_s$ 。在这里, 我们基于 Kubo 公式 (参见 S2 部分) (30、31) 计算石墨烯的表面电导率, 并将弛豫时间设置为  $t = 0.5 \text{ ps}$ , 石墨烯

中的化学势设置为 $\mu_c=0.4$  eV[在实验能力范围内 (32, 33)]。由于系统的旋转对称性，所有场都必须是横向磁场，因此可以通过在 z 方向上的电场分量 $E_z$ 来表征。通过将所有量在时间和坐标上分解为傅里叶分量 $\bar{r}_\perp = \hat{x}x + \hat{y}y$ 以及相应的波矢 $\bar{k}_\perp = \hat{x}k_x + \hat{y}k_y$ ，我们有：

$$J_z^q(\bar{r}, t) = \int j_{\bar{k}_\perp, \omega}^q(z) e^{i(\bar{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp - \omega t)} d\bar{k}_\perp d\omega \quad (1)$$

$$E_z(\bar{r}, t) = \int E_{\bar{k}_\perp, \omega}(z) e^{i(\bar{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp - \omega t)} d\bar{k}_\perp d\omega \quad (2)$$

通过写出由于电子产生的电场 $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^q$ 和介质 1 ( $z < 0$ ) 和介质 2 ( $z > 0$ ) 内的辐射场 $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^1$ ,  $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^2$ ，我们可以得到在介质 1 ( $z < 0$ ) 和介质 2 ( $z > 0$ ) 内的总电场分别为 $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^q + E_{\bar{k}_\perp, \omega}^1$ ,  $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^q + E_{\bar{k}_\perp, \omega}^2$ 。从石墨烯平面边界条件可以推导得出 $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^q \sim \exp(i\omega z/v)$  且 $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^{1,2} \sim \exp(\mp i\omega z/c\sqrt{1 - k_\perp^2 c^2/\omega^2})$ ，其中指数中 $\mp$ 对应 $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^{1,2}$ 上标中 1, 2，并且 $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$ (见补充材料 S2)。

### 形成区及形成时间

Ginzburg 基于以下考虑估计了渡越辐射中光子发射的形成区长度(表示为“形成长度” $L_f$ ) (13)。在形成区域内，场 $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^q + E_{\bar{k}_\perp, \omega}^{1,2}$ 的总能量正比于 $(E_{\bar{k}_\perp, \omega}^q + E_{\bar{k}_\perp, \omega}^{1,2})^2$ 。长度 $L_f$ 描述了总能量实际上等于电子场能量 $(E_{\bar{k}_\perp, \omega}^q)^2$ 与辐射场能量 $(E_{\bar{k}_\perp, \omega}^{1,2})^2$ 总和的边界。意味着电子场和辐射场实际上是分离的。也就是说干涉项 $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^q \cdot E_{\bar{k}_\perp, \omega}^{1,2}$ 可以被忽略。Ginzburg 因此利用 $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^q$ 与 $E_{\bar{k}_\perp, \omega}^{1,2}$ 有 $2\pi$ 相位差的条件来定义形成长度 $L_f$ ，即： $\frac{\omega L_f}{v} \pm \frac{\omega L_f}{c} \sqrt{1 - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} = 2\pi$ ，从而有：

$$L_{f1} = \frac{2\pi}{\left| \frac{\omega}{v} + \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \right|}, L_{f2} = \frac{2\pi}{\left| \frac{\omega}{v} - \frac{\omega}{c} \sqrt{1 - \frac{k_\perp^2 c^2}{\omega^2}} \right|} \quad (3)$$

其中， $L_{f1}$ 和 $L_{f2}$ 对应介质 1 ( $z < 0$ ) 和介质 2 ( $z > 0$ ) 中形成区(如图 1)。显然，形成长度不仅取决于发射光子的频率和快电子的速度，还取决于光子的发射角度。举一数值例子，在电子速度 $v = 0.8 c$ 的情况下，要在后向( $-\hat{z}$ )发射频率为 10 THz 的光子，电子需要大约 $L_{f1}/v = 0.06$  ps 才能完成。对于正向( $+\hat{z}$ )方向 $k_\perp^2 = 0$ 在相同频率下的光子发射，大约需要 $L_{f2}/v = 0.5$  ps。这些 0.06 ps 和 0.5 ps 的时间间隔被认为是 10 THz 的后向和前向光子发射的形成时间。

Ginzburg 的估计仅适用于光子发射，条件 $k_\perp^2 < \omega^2/c^2$ 以满足方程 3 中的平方根。然而，众所周知，表面等离子体具有 $k_\perp^2 > \omega^2/c^2$ 。与 Ginzburg 分析的电子-光子相互作用相比，在电子与表面等离子体的相互作用中，只有电子场沿 z 轴有相位变化，而表面等

离子体的相位变化为零。因此，延续 Ginzburg 的思路， $E_{\vec{k}_{\perp}, \omega}^q$  与  $E_{\vec{k}_{\perp}, \omega}^{1,2}$   $2\pi$  的相位差应该只来自  $E_{\vec{k}_{\perp}, \omega}^q$ ，即  $\omega L_f/v = 2\pi$ 。从而：

$$L_{f1} = L_{f2} = \frac{2\pi v}{\omega} \quad (4)$$

从数值上讲，这意味着电子大约需要  $(L_{f1} + L_{f2})/v = 0.2$  ps 才能以 10 THz 频率发射二维等离子体。值 0.2 ps 被认为是 10 THz 的 2D 等离子体的形成时间。

### 光子发射的瞬态

有趣的是，当电子穿过形成区时，在 2D 等离子体激元的形成过程中会发生什么，如图 1 所示。光子发射和 2D 等离子体激元发射的动力学过程是由  $v = 0.8c$ （或动能 340 keV），可以在现代电子显微镜系统 (1, 34) 中方便地实现，如影片 S1 所示。（该仿真中考虑的相对较大的速度表明我们的理论分析不限于低电子速度。）计算带宽为 0 到 20THz，如图 S3 所示。图 2 显示了光子发射的时间演化。当入射电子靠近石墨烯界面移动时（图 2A），其倏逝场接触石墨烯，将传导电子从快速电子的轨迹附近排出。由于电磁感应，感应的表面电流反过来通过在石墨烯的上侧积累场来阻止倏逝电子场的穿透（图 2, A 和 B）。在电子穿过石墨烯之后（图 2, B 和 C），先前积累在上侧的场失去了与电子的直接接触，因此被“震散”到上层空间。同时，石墨烯下侧的“不充足场”需要在电子存在的情况下恢复其强度，从而将辐射“抖掉”进入下层空间（图 2, C 和 D）。可以看出，在计算带宽的中心频率 (10 THz) 处，后向辐射的形成时间为 0.06 ps，与图 2 (A 和 B) 一致，前向辐射的形成时间为 0.5 ps，与图 2 (C 和 D) 一致。

### 2D 等离子体发射的瞬态

更有趣的是石墨烯本身的电荷运动。我们绘制在快速电子穿透石墨烯的过程中电子密度与其平均值偏差的动力学如图 3，与小液滴落在 2D 液体表面引起的流体动力飞溅场景相似，如下所述。首先，在流体动力学中 (17, 18)，当一个小水滴影响平静的深水表面时，首先会形成一个“弹坑”，然后水会溅到一边。当水冲回填满“弹坑”时将上升到初始水面之上。由于其不稳定性而被称为 Rayleigh 射流 (17) 的中央射流柱，或因为 Washington 在 1908 年进行了广泛的观测而被称为 Washington 射流 (17, 18)。当涉及到石墨烯上的电荷运动时，当入射电子接近石墨烯层时，首先形成石墨烯中传导电子密度的“弹坑”(图 3, A 到 C)。在电子穿透石墨烯层后，立即形成所激发的电子密度的反弹，中心呈喷射状上升(图 3, D 和 E)，类似于流体动力学中 Rayleigh 射流或 Washington 射流的标志。我们观察到，如图 3E 所示，喷射状上升在大约  $t = 0.15$  ps 时达到峰值。其他类似这种流体动力飞溅射流也被广泛讨论，包括流星撞击 (17, 18) 和高度聚焦的飞秒激光脉冲与金属膜表面之间的相互作用 (35)。

其次，在中心喷射状上升下降后，二维等离子体的波纹呈同心圆向外传播，如图 3, F 到 H 所示。激发的二维等离子体，覆盖广泛的频率，逐渐扩散成一个等离激元涟漪序列，其中较长波长的等离激元停留在外围，而较短波长的等离激元更靠近内边界(图 3H)。

这是因为二维等离子体（包括石墨烯等离子体）的色散通常为 $\omega \propto k_{\perp}$  (24, 25)，这在形式上类似于深水波的色散；这反映在较长的波长消失得更快的事实（见 S4 部分），尽管它们比较短的波长形成得更晚（因为它们的形成时间更长）。

### 产生的光子和二维等离子体的能量

我们在图 4A 中绘制了总辐射光子能量的时间演变，通过数值监测穿过以原点为中心的大半径  $R$  的假想球体的坡印亭功率，然后将时间轴向后移动  $R/c$ ，其中光子辐射类似于流体动力飞溅发出的声音。总辐射光子能量最终饱和并接近  $0.171 \times 10^{-4} \text{ eV}$  的值，我们通过让  $t=\infty$  进行分析计算（参见补充材料）。可以看出，在  $t = 0.15 \text{ ps}$  之前，大部分光子能量已经辐射出去，这是电荷喷射状上升达到最大值的时刻（图 3E），因为大部分光子能量被电荷射流抖掉。我们还绘制了感应场“能量”的时间演化图，而不考虑快速电子的电荷场的干涉。请注意，二维等离子体在其形成时间之前尚未完全生成，因此该能量应视为与感应电荷的场强 $(E_{\vec{k}_{\perp},\omega}^{1,2})^2$  相关的参数，而不是真实能量。可以看出，即使在大部分光子能量辐射出去之前，场 $(E_{\vec{k}_{\perp},\omega}^{1,2})^2$  的强度已经开始下降。我们计算生成的石墨烯等离子体的真实能量。在时间  $t = L_{f2}/v$  之后立即检查每个频率分量的电磁能量。对于 0 到 20 THz 的二维等离子体的计算光谱，相应的形成时间  $(L_{f1} + L_{f2})/v$  从  $\infty$  到 0.1 ps 变化，其持续时间与石墨烯等离子体的传播时间 (~0.5 ps)（见 S4 部分）可比拟。在 2D 等离子体形成时间期间的能量损失不能通过简单地利用被广泛用于表征石墨烯等离子体的传播的传播时间或传播长度来考虑，因为这种能量损失发生在二维等离子体本身产生之前。

只有在理想的无损情况下，才能将 EEL 光谱等同于生成的 2D 等离子体的能谱（发射光子的能量通常仅占快速电子能量损失的 <5%，对于较低的电子速度而言则要少得多，并且因此可以忽略不计）。我们在图 4B 中通过取  $t=\infty$  并在理想无损情况下绘制二维等离子体的光谱，这与 EEL 光谱计算完全一致（参见 S5 和 S6 部分以及图 S4）。我们还在图 4B 中绘制了在考虑到  $t = L_{f2}/v$  的形成时间之后实际有损石墨烯（弛豫时间是有限的）的二维等离子体的光谱。无损和有损情况之间的比较表明，在生成二维等离子体之前，很大一部分能量（从 0 到 20 THz 的总能量超过 25%）已经消散。此外，石墨烯中的损失，包括由缺陷引起的损失，理论上可以用弛豫时间来表征，弛豫时间越小，损失越大。如果石墨烯样品中存在更多缺陷，这将不可避免地降低本工作中使用的弛豫时间 (0.5 ps)，从而导致石墨烯的损失更大，因此预计在二维等离子体生成之前会消耗更多的能量。

### 讨论

电子显微镜的最新进展现在提出了通过使用光子诱导的近场电子显微镜观察等离子体的时间动态的全新方法，包括其超快和亚波长特征 (7, 36)。这种令人兴奋的可能性将使人们能够可视化等离子体飞溅效应，而不是通过 EELS 或渡越辐射测量间接推断它们。

因为石墨烯只是支持二维等离子体的许多不同二维电子气系统 (19-23、37、38) 的一个典型例子，我们的分析可以适用于任何二维电子系统。因此，其他 2D 电子气系统 (19-23)，特别是其他 2D 材料 (37, 38)，可能会进一步丰富等离子飞溅类瞬变的潜在实现。然而，我们认为石墨烯特别适合这一目的，因为其灵活的化学势可调性，以及在制备大面积、高质量和精确控制层数的石墨烯样品方面的最新进展。此外，据报道，范德华材料可以支持不同种类的极化子 (38)，例如氮化硼板中的声子极化子 (37, 38)。因此，我们期望在范德华材料中揭示更多的极化子飞溅样瞬态。

上述结果证明了 EELS 实验中二维等离激元产生的瞬态。由于时空限制对等离激元产生的影响，揭示了快电子的影响与二维等离激元形成之间的中间过程。发现该过程类似于流体动力学飞溅现象。在生成二维等离子体之前考虑能量耗散的解析计算表明，在假设损失可忽略不计的情况下，之前对 EELS 中石墨烯等离子体产率的估计需要重新评估。

### 材料及研究方法

我们严格的解析计算是基于 Ginzburg 和 Frank 在宏观电动力学框架内的渡越辐射理论的扩展。这可以给我们一个由快电子引起的辐射场的解析表达式。由此，我们可以进一步解析推导出发射光子的光谱；假设计算系统中的损失很小，我们还可以分析推导出 EEL 谱。因为 EEL 谱是在没有假设静电近似的情况下推导出来的，所以我们的 EEL 谱的解析公式适用于具有高电子动能的情况。此外，通过选择适当的 Sommerfeld 分支叶并使用 Sommerfeld 积分路径，可以对不同时间的辐射场进行数值计算。因此，通过应用这些数值计算的辐射场，可以数值地获得有损石墨烯上不同时间的发射光子能量、感应场能量和感应电荷的能谱。

# 北京邮电大学

## 本科毕业设计（论文）开题报告

学院	电子工程学院	专业	电子科学与技术	班级	2018210861
学生姓名	龚政	学号	2018210861	班内序号	6
指导教师姓名	张洪欣	所在单位	北京邮电大学电子工程学院	职称	教授
设计（论文）题目		(中文) 基于双层石墨烯的自由电子渡越辐射调控机理研究			
		(英文) Photonic and plasmonic transition radiation from bilayer graphene			

毕业设计（论文）开题报告内容：（主要包含选题的背景和意义；研究的基本内容和拟解决的主要问题；研究方法及措施；研究工作的步骤与进度；主要参考文献等项目）

### 一. 背景与意义

#### 1.1. 背景

##### 1.1.1. 渡越辐射 (Transition Radiation)

作为一种典型的辐射过程，渡越辐射 (TR)<sup>[1,2]</sup>在 1945 年被 V. L. Ginzburg 和 I. Frank 理论提出，1959 年得到实验验证。当带电粒子在空间非均一介质中运动（例如穿过单层界面）时会产生渡越辐射，包含近场表面等离子体激元辐射以及远场以光子形式的辐射。

不同于切伦科夫辐射<sup>[3-5]</sup> (Cherenkov Radiation) 对粒子速度  $v$  的阈值限制<sup>1</sup>，渡越辐射对粒子速度没有要求，并且结合周期性微纳结构<sup>[6]</sup>或周期性电子流<sup>[7-9]</sup>，可以激发强度更强，方向性更高的共振（相干）渡越辐射<sup>[10]</sup>。因此，TR 可被用作微波段，太赫兹<sup>[11]</sup>到 X 射线波段<sup>[12,13]</sup>的辐射源。

另一方面，对于实物带电粒子激发的渡越辐射，单位面积远场（光子）辐射能量正比于洛伦兹因数  $\gamma$  ( $\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$ )，于是基于 TR 的高能粒子探测仪<sup>[14]</sup>应运而生。对于超出切伦科夫探测仪<sup>[15]</sup>有效探测范围的极高能粒子，TR 探测仪能实现有效探测。由于没有速度阈值，TR 探测仪对介质材料的选取更为灵活，为实现更高的集成度提供了更多材料选择。

##### 1.1.2. 双层石墨烯

单层或少层的二维材料<sup>[16]</sup>较其三维体材料可以获得许多新的特性。如单层石墨烯<sup>[17]</sup>作为碳原子的二维结晶聚合物，激发光谱具有线性特点和手性对称性，以及极强的电子迁移率等独特的电学和晶体特性，使之成为纳米电子学和光子学等众多领域实验、理论研究的热点。

双层石墨烯<sup>[18]</sup>是一种典型的二维材料，由两层单层石墨烯堆叠而成，聚合方式分为 A-

<sup>1</sup>  $v > \frac{c}{n}$ ，即：粒子速度大于介质中光的相速度， $c$  为真空光速， $n$  为介质折射率

A 和 A-B (Bernal Stacking) 两种，其中 A-B 堆叠双层石墨烯更为稳定，被更为广泛的用于实验当中。在兼有单层石墨烯良好光学特性的基础上，研究<sup>[19-21]</sup>表明，通过双层石墨烯表面层间压降可以使得带隙差在 0.1eV~0.3eV 范围内线性可调，进而在光谱上出现可调的吸收峰<sup>[22-24]</sup>，为新型太赫兹器件和碳基量子点<sup>[25]</sup>与晶体管<sup>[26,27]</sup>提供了应用前景。Edward McCann<sup>[28]</sup>在 2006 年提出了有效的紧束缚模型确定了双层石墨烯的能带结构，另外，后续研究基于此以及 Kubo 机理得出 AB 双层石墨烯的表面电导率<sup>[29]</sup>，与实验得到很好的相互印证。

双层石墨烯的表面等离子体激元特性有许多新奇的发现，如中红外区由于层间光子耦合引发的新的等离子体激元模式<sup>[30]</sup>以及可调的光学透明性窗口<sup>[31,32]</sup>。另外，基于光泵激发的非稳态双层石墨烯<sup>[33]</sup>，对在带隙差附近可能被激发的具有谐振增益的超光速等离子激元进行了理论预测，为基于表面等离子体激元的放大器和激光<sup>[34]</sup>提供了应用前景。

### 1.1.3. 基于二维材料的渡越辐射

电子束能实现在纳米级的精确的空间控制，这为研究高速电子与二维材料<sup>[35]</sup>（或其异质结<sup>[36]</sup>）的相互作用提供了高效的研究手段，如电子被广泛用于对二维材料表面等离子体激元特性<sup>[37]</sup>的研究当中，例如电子能量损失谱法(EELS)<sup>[38-40]</sup>中将高速电子作为探测源；反之，由于二维材料灵活可调<sup>[41]</sup>的光学特性，为实现更为灵活可控的渡越辐射的控制提供了平台。

## 1.2. 研究意义

在麦克斯韦电磁学框架下，单个快电子激发单层石墨烯的表面等离子激元和远场光子的机理<sup>[42]</sup>已经得到研究，但是如何对渡越辐射实现有效的强度、方向控制值得更进一步的研究，通过改变二维材料本身的光学特性对渡越辐射实现调控的理论引起了笔者的兴趣。

双层石墨烯和单层石墨烯都具有典型二维材料的独特光学特性，但是前者独有的场效应<sup>[43]</sup>，层间光子耦合产生的光谱吸收峰以及光掺杂引发的共增增益等，使得对电子与双层石墨烯相互作用的研究变得很有必要。同时基于这些特性，双层石墨烯材料给从材料本身实现对于渡越辐射调控提供了一个有前景的平台。另外，基于受光激发的准平衡态双层石墨烯<sup>[33]</sup>来实现强束缚的 TE 模<sup>[44]</sup>的表面等离子体激元也成为可能。

## 二. 基本内容

基于麦克斯韦电磁理论，基于高速电子在非均匀介质中的运动，结合二维平面材料双层石墨烯展开研究，探究电磁场与电子的耦合，研究自由电子穿过双层石墨烯时所激发出的渡越辐射（包括远场电磁辐射和近场表面等离激元）的分布特性，并系统研究电子运动速度、石墨烯化学势等变量与自由电子渡越辐射强度、能谱、方向性等性质之间的关系。实现的主要内容有：

- (1). 抽象双层石墨烯的电磁模型，能够量化计算或通过模型近似求解双层石墨烯的电导率；
- (2). 构建电子运动模型，用平面波展开/柱面波展开等数学物理手段解析求解电磁场

分布，并数值计算索末菲积分，软件仿真得到电磁场分布；

(3).对渡越辐射进行远场/近场分析，重点关注远场 photon 的角谱图以及近场的等离子体激元分布，调研基于电子能量损失的高能粒子探测仪 EEL，为其提供理论依据。调研分析基于渡越辐射的微波、红外、太赫兹光源，结合理论探究可行性。

### 三. 拟解决主要问题

#### 3.1. 建立基于二维材料的渡越辐射模型

基于运动情景，建立适当的空间坐标系引入数学模型对运动模型进行描述。针对简单的各向同性介质利用电磁材料属性介电常数、磁导率进行描述。(不考虑各向异性，也不考虑双各向同性以及双各向异性，即介质中电场、磁场的相互耦合)。对于二维材料利用介质面表面电导率进行描述。

#### 3.2. 双层石墨烯表面电导率建模及计算

#### 3.3. 求解渡越辐射模型

##### 3.3.1. 在频域求解空间各处的磁场强度和电场强度

##### 3.3.2. 求解空间各处的能量分布

包括近场等离子体激元和远场光子能量角谱图

##### 3.3.3. (视进度) 时域求解空间各处的磁场强度和电场强度

求解激发渡越辐射的时域瞬变响应

#### 3.4. 探究材料可控特性对辐射能量分布的影响

探究双层石墨烯可控光学属性如带隙差 $\Delta$ , 化学势 $\mu$ , 光掺杂费米势 $\mu_e, \mu_h$ 对辐射强度方向的影响。

### 四. 研究方法及措施

#### 4.1. 双层石墨烯电导率

基于紧束缚模型，选取 A-B 双层石墨烯中四个碳原子基本单元确定哈密顿量，并且基于哈密顿矩阵，对其进行对角化确定能带结构。进而引入 Kubo 机理对表面电导率进行求解，其中，利用格林函数法以及希尔伯特变换(谱展开)得到便于编程求解的积分式。并且值得注意的是，对 Kubo 公式取长波极限得到电导率实部，进而通过 K-K 关系得到虚部。

#### 4.2. 模型建立和求解

沿用 V. L. Ginzburg 的基本模型，电子轨迹与二维平面正交，建立空间直角坐标系。利用傅立叶变换，对电流密度以及激发的非单频电磁场进行平面波展开，进而严格匹配界面处边界条件，得到频域，波矢空间的电场、磁场量，进一步通过傅立叶反变换求解空间分布，再叠加频域得到时域分布。值得注意的是，在反变换积分式中，被积函数可能出现

极点，这一超出数学定义的典型电磁现象可以选取适当的索末菲积分路径进行计算。最后基于坡印亭定理对电磁场进行能量分析。改变参数带隙差 $\Delta$ ，化学势 $\mu$ ，光掺杂费米势 $\mu_e, \mu_h$ 等参数，进行灵敏性、稳定性分析。

## 五. 研究工作的步骤与进度

第1~2周：调研双层石墨烯的电磁学特性，电磁模型，关注表面电导率 $\sigma_s$ 、化学势 $\mu$ ，光掺杂费米势 $\mu_e, \mu_h$ ，带隙差 $\Delta$ 等参数；

第3~6周：构建电磁模型，给出自由电子穿过双层石墨烯时所激发电磁场量的解析表达，并基于数值积分（Sommerfeld Integration）方法，仿真绘制电磁场分布图；

第7周：解析渡越前向、后向远场辐射的分布特性；

第8周：分析近场表面等离激元的分布特性；

第9~11周：稳定性、灵敏性分析，系统研究电子运动速度、石墨烯化学势等变量与自由电子渡越辐射强度、能谱、方向性等性质之间的关系，结合结论为高能粒子探测仪和高频辐射源提供理论基础。

第12周：汇总理论模型结果、图标、数据仿真，撰写论文，答辩。

## 六. 主要参考文献

- [1] GINZBURG V L, TSYTOVICH V N. Several problems of the theory of transition radiation and transition scattering[J/OL]. Physics Reports, 1979, 49(1): 1-89.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157379900528>.  
DOI:[https://doi.org/10.1016/0370-1573\(79\)90052-8](https://doi.org/10.1016/0370-1573(79)90052-8).
- [2] GINZBURG V L (Vitali\u0107i L. Transition radiation and transition scattering[M]//Transition radiation and transition scattering. Bristol, Eng. ; A. Hilger, 1990.
- [3] CHERENKOV P A. Visible emission of clean liquids by action of gamma radiation[J]. Dokl. Akad. Nauk SSSR, 1934, 2(451–454).
- [4] FRANK I, TAMM Ig. Coherent Visible Radiation of Fast Electrons Passing Through Matter[M/OL]//TAMM I E, BOLOTOVSKII B M, FRENKEL V Ya, et al. Selected Papers. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1991: 29-35. [https://doi.org/10.1007/978-3-642-74626-0\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-642-74626-0_2).  
DOI:[10.1007/978-3-642-74626-0\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-642-74626-0_2).
- [5] GONG S, HU M, WU Z, et al. Direction controllable inverse transition radiation from the spatial dispersion in a graphene-dielectric stack[J]. Photonics Research, 2019, 7(10): 1154-1160.
- [6] LIN X, EASO S, SHEN Y, et al. Controlling Cherenkov angles with resonance transition radiation[J]. Nature Physics, 2018, 14(8): 816-821.
- [7] OCHIAI T. Efficiency and angular distribution of graphene-plasmon excitation by electron beam[J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2014, 83(5): 54705.
- [8] ZHANG K C, CHEN X X, SHENG C J, et al. Transition radiation from graphene plasmons by a bunch beam in the terahertz regime[J]. Optics Express, 2017, 25(17): 20477-20485.
- [9] LIAO G Q, LI Y T, ZHANG Y H, et al. Demonstration of coherent terahertz transition radiation from relativistic laser-solid interactions[J]. Physical review letters, 2016, 116(20): 205003.
- [10] DE VRIES K D, PROHIRA S. Coherent transition radiation from the geomagnetically induced current in cosmic-ray air showers: Implications for the anomalous events observed by ANITA[J]. Physical review letters, 2019, 123(9): 91102.

- [11] CASALBUONI S, SCHMIDT B, SCHMÜSER P, et al. Ultrabroadband terahertz source and beamline based on coherent transition radiation[J]. Physical Review Special Topics-Accelerators and Beams, 2009, 12(3): 30705.
- [12] CHU A N, PIESTRUP M A, BARBEE JR T W, et al. Transition radiation as a source of x rays[J]. Journal of Applied Physics, 1980, 51(3): 1290-1293.
- [13] PIESTRUP M A, BOYERS D G, PINCUS C I, et al. Observation of soft-x-ray spatial coherence from resonance transition radiation[J]. Physical Review A, 1992, 45(2): 1183.
- [14] DOLGOSHEIN B. Transition radiation detectors[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 1993, 326(3): 434-469.
- [15] LIN X, HU H, EASO S, et al. A Brewster route to Cherenkov detectors[J]. Nature communications, 2021, 12(1): 1-7.
- [16] AVOURIS P, HEINZ T F, LOW T. 2D Materials[M]. Cambridge University Press, 2017.
- [17] CASTRO NETO A H, GUINEA F, PERES N M R, et al. The electronic properties of graphene[J/OL]. Rev. Mod. Phys., 2009, 81(1): 109-162. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.109>. DOI:10.1103/RevModPhys.81.109.
- [18] MCCANN E, KOSHINO M. The electronic properties of bilayer graphene[J]. Reports on Progress in physics, 2013, 76(5): 56503.
- [19] MIN H, SAHU B, BANERJEE S K, et al. Ab initio theory of gate induced gaps in graphene bilayers[J/OL]. Phys. Rev. B, 2007, 75(15): 155115. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.155115>. DOI:10.1103/PhysRevB.75.155115.
- [20] CASTRO E v, NOVOSELOV K S, MOROZOV S v, et al. Electronic properties of a biased graphene bilayer[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2010, 22(17): 175503.
- [21] CASTRO E v, NOVOSELOV K S, MOROZOV S v, et al. Biased Bilayer Graphene: Semiconductor with a Gap Tunable by the Electric Field Effect[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2007, 99(21): 216802. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.216802>. DOI:10.1103/PhysRevLett.99.216802.
- [22] KUZMENKO A B, BENFATTO L, CAPPELLUTI E, et al. Gate Tunable Infrared Phonon Anomalies in Bilayer Graphene[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2009, 103(11): 116804. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.116804>. DOI:10.1103/PhysRevLett.103.116804.
- [23] CAPPELLUTI E, BENFATTO L, KUZMENKO A B. Phonon switching and combined Fano-Rice effect in optical spectra of bilayer graphene[J/OL]. Physical Review B, 2010, 82(4). <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.82.041402>. DOI:10.1103/physrevb.82.041402.
- [24] TANG T T, ZHANG Y, PARK C H, et al. A tunable phonon-exciton Fano system in bilayer graphene[J/OL]. Nature Nanotechnology, 2010, 5(1): 32-36. <https://doi.org/10.1038/nnano.2009.334>. DOI:10.1038/nnano.2009.334.
- [25] GE Z, JOUCKEN F, QUEZADA E, et al. Visualization and Manipulation of Bilayer Graphene Quantum Dots with Broken Rotational Symmetry and Nontrivial Topology[J/OL]. Nano Letters, 2020, 20(12): 8682-8688. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c03453>. DOI:10.1021/acs.nanolett.0c03453.
- [26] LOW T. Graphene pn Junction: Electronic Transport and Devices[M]//Graphene Nanoelectronics. Springer, 2011: 467-508.
- [27] SUI Y, LOW T, LUNDSTROM M, et al. Signatures of disorder in the minimum conductivity of graphene[J]. Nano letters, 2011, 11(3): 1319-1322.
- [28] MCCANN E. Asymmetry gap in the electronic band structure of bilayer graphene[J]. Physical Review B, 2006, 74(16): 161403.

- [29] NICOL E J, CARBOTTE J P. Optical conductivity of bilayer graphene with and without an asymmetry gap[J/OL]. *Phys. Rev. B*, 2008, 77(15): 155409. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.155409>. DOI:10.1103/PhysRevB.77.155409.
- [30] LOW T, GUINEA F, YAN H, et al. Novel Midinfrared Plasmonic Properties of Bilayer Graphene[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 112(11): 116801. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.116801>. DOI:10.1103/PhysRevLett.112.116801.
- [31] YAN H, LOW T, GUINEA F, et al. Tunable Phonon-Induced Transparency in Bilayer Graphene Nanoribbons[J/OL]. *Nano Letters*, 2014, 14(8): 4581-4586. <https://doi.org/10.1021/nl501628x>. DOI:10.1021/nl501628x.
- [32] FEI Z, RODIN A S, ANDREEV G O, et al. Gate-tuning of graphene plasmons revealed by infrared nano-imaging[J/OL]. *Nature*, 2012, 487(7405): 82-85. <https://doi.org/10.1038/nature11253>. DOI:10.1038/nature11253.
- [33] LOW T, CHEN P Y, BASOV D N. Superluminal plasmons with resonant gain in population inverted bilayer graphene[J/OL]. *Physical Review B*, 2018, 98(4): 41403. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.041403>. DOI:10.1103/PhysRevB.98.041403.
- [34] BERINI P, DE LEON I. Surface plasmon-polariton amplifiers and lasers[J]. *Nature photonics*, 2012, 6(1): 16-24.
- [35] RIVERA N, KAMINER I. Light-matter interactions with photonic quasiparticles[J]. *Nature Reviews Physics*, 2020, 2(10): 538-561.
- [36] SHENTCIS M, BUDNIAK A K, SHI X, et al. Tunable free-electron X-ray radiation from van der Waals materials[J]. *Nature Photonics*, 2020, 14(11): 686-692.
- [37] LOW T, CHAVES A, CALDWELL J D, et al. Polaritons in layered two-dimensional materials[J]. *Nature materials*, 2017, 16(2): 182-194.
- [38] DE ABAJO F J G. Optical excitations in electron microscopy[J]. *Reviews of modern physics*, 2010, 82(1): 209.
- [39] DE ABAJO F J. Multiple excitation of confined graphene plasmons by single free electrons[J]. *ACS nano*, 2013, 7(12): 11409-11419.
- [40] MIŠKOVIĆ Z L, SEGUI S, GERVASONI J L, et al. Energy losses and transition radiation produced by the interaction of charged particles with a graphene sheet[J]. *Physical Review B*, 2016, 94(12): 125414.
- [41] OHTA T, BOSTWICK A, SEYLLER T, et al. Controlling the electronic structure of bilayer graphene[J]. *Science*, 2006, 313(5789): 951-954.
- [42] LIN X, KAMINER I, SHI X, et al. Splashing transients of 2D plasmons launched by swift electrons[J/OL]. *Science Advances*, 2017, 3(1): e1601192. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/sciadv.1601192>. DOI:10.1126/sciadv.1601192.
- [43] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S v, et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films[J/OL]. *Science*, 2004, 306(5696): 666-669. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1102896>. DOI:10.1126/science.1102896.
- [44] ZHANG X, HU H, LIN X, et al. Confined transverse-electric graphene plasmons in negative refractive-index systems[J/OL]. *npj 2D Materials and Applications*, 2020, 4(1): 25. <https://doi.org/10.1038/s41699-020-00159-z>. DOI:10.1038/s41699-020-00159-z.

指导教师签字		日期	2022年3月2日
--------	--	----	-----------

北京邮电大学  
本科毕业设计（论文）中期进展情况检查表

学院	电子工程学院	专业	电子科学与技术	班级	20182112 05
学生姓名	龚政	学号	2018210861	班内序号	6
指导教师姓名	张洪欣	所在单位	北京邮电大学电子工程学院	职称	教授
设计(论文)题目	(中文) 基于双层石墨烯的自由电子渡越辐射调控机理研究				
	(英文) Photonic and plasmonic transition radiation from bilayer graphene				
目前 已 完 成 任 务	主要内容: (毕业设计(论文)进展情况, 字数一般不少于 1000 字) 1. 调研双层石墨烯的电磁学特性, 得到光导模型如下: 电场作用下双层石墨烯打开带隙 $\Delta$ , 基于紧束缚近似, 单自旋哈密顿量为: $H = -t \sum_{n,\delta} (a_{1n+\delta}^\dagger b_{1n} + H.c.) - t \sum_{n,\delta'} (a_{2n}^\dagger b_{2n+\delta'} + H.c.) + \gamma_1 \sum_n (a_{2n}^\dagger b_{1n} + H.c.) - \frac{\Delta}{2} \sum_n (a_{1n+\delta_1}^\dagger a_{1n+\delta_1} + b_{1n}^\dagger b_{1n}) + \frac{\Delta}{2} \sum_n (a_{2n}^\dagger a_{2n} + b_{2n+\delta'_1}^\dagger b_{2n+\delta'_1}) \quad (1-1)$ 其中, 前两项表示层内电子最近邻跃迁项, $t$ 约为 2.8eV, 下标 2、1 表示上、下层, 第三项表示层间跃迁, 第四项表示层间耦合 $\gamma_2$ (约 0.39eV), 忽略 $\gamma_3$ (约 0.315eV), $\gamma_4$ (约 0.04eV), 最后两项表示, 层 1 能量降低 $\frac{\Delta}{2}$ , 层 2 提高 $\frac{\Delta}{2}$ 。 式中算符: $a_{mn}^\dagger$ ( $b_{mn}^\dagger$ ) 表示在 m 层双层石墨烯基元 $A_m, B_m$ 的 n 处产生一个电子, $a_{mn}$ ( $b_{mn}$ ) 表示在 m 层双层石墨烯基元 $A_m, B_m$ 的 n 处湮灭一个电子。H.c. 表示另一项的厄米共轭, 如 $a_{1n+\delta}^\dagger b_{1n} + H.c. = a_{1n+\delta}^\dagger b_{1n} + a_{1n+\delta} b_{1n}^\dagger$ 。位矢 $\delta$ 表示在位矢 n 处指向最近邻原子的矢量如下图示, 且 $\delta'_i = -\delta_i$ 。				

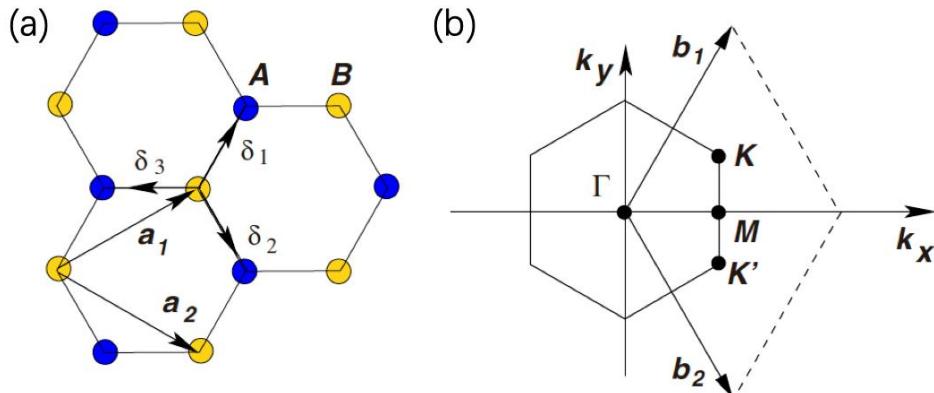


图 1(a). 石墨烯六角晶格及(b)布里渊区, 狄拉克锥位于  $K$  和  $K'$   
 哈密顿变换  $\hat{H} = \sum_k \Psi^\dagger(k) H \Psi(k)$  到  $k$  空间, 本征向量  $\Psi(k) = (a_{1k}, b_{2k}, a_{2k}, b_{1k})$ , 得到  $k$  空间哈密顿量为:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2} & 0 & 0 & \phi^*(k) \\ 0 & \frac{\Delta}{2} & \phi(k) & 0 \\ 0 & \phi^*(k) & \frac{\Delta}{2} & \gamma_1 \\ \phi(k) & 0 & \gamma_1 & -\frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} \quad (1-2)$$

其中  $\phi(k) = -t \sum_{\delta} e^{ik\delta} = -t \sum_{\delta'} e^{-ik\delta'}$ 。双层石墨烯的能带结构由  $\hat{H}$  的本征值定义如下：

$$\epsilon_{\alpha}^2(k) = \frac{\gamma^2}{2} + \frac{\Delta^2}{4} + |\phi(k)|^2 + (-1)^{\alpha} \sqrt{\left( \frac{\gamma^4}{4} + |\phi(k)|^2(\gamma^2 + \Delta^2) \right)} \quad (1-3)$$

其中  $\alpha$  可取 1,2，在这四个能带中， $\pm \epsilon_1(k)$  表征低能修正下的原始石墨烯低能带， $\pm \epsilon_2(k)$  反映了基元  $A_2$  和  $B_1$  之间的二聚键（跃迁能  $\gamma_1$ ），由于主要的低能物理发生在石墨烯布里渊区两个不等价的  $K$  和  $K'$  点， $\phi(k)$  可以在连续介质近似中围绕  $K$  点展开为  $\phi(k) = \hbar v_F k$ ，其中  $v_F = \sqrt{3}tb/(2\hbar)$ 。值得注意的是，可由场效应线性控制的带隙  $\Delta$  为频率独立的光导特性带来了独特的丰富的结构和可控性。

### Kubo 机理

进一步，基于 Kubo 公式，我们对石墨烯电导率实部进行求解。定义格林函数  $\hat{G}$  如下

$$\hat{G}^{-1} = z\hat{I} - \hat{H} = \begin{pmatrix} z + \frac{\Delta}{2} & 0 & 0 & \phi^*(k) \\ 0 & z - \frac{\Delta}{2} & \phi(k) & 0 \\ 0 & \phi^*(k) & z - \frac{\Delta}{2} & \gamma_1 \\ \phi(k) & 0 & \gamma_1 & z + \frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} \quad (1-4)$$

其中  $z = i\omega_n$ ， $\omega_n = \pi T(2n + 1)$  为费米子松原频率  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ，T 为开尔文温度。遵循标准 Kubo 公式流程计算电导  $\sigma_{\alpha\beta}$ ：

$$\sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{\text{Im}[\Pi_{\alpha\beta}(\Omega + i0^+)]}{\Omega} \quad (1-5)$$

其中  $\alpha, \beta$  为空间方向，可取  $x, y, z$ ，我们关心平行于石墨烯平面 ( $z = 0$ ) 的纵电导即  $\sigma_{zz}$ ， $\Pi_{\alpha\beta}(\Omega + i0^+)$  为迟滞电流-电流作用方程（极化方程）可由松原公式得出。进而：

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{e^2}{2\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} [f(E) - f(E + \hbar\omega)] \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \text{Tr} [\hat{v}_{\alpha} \hat{A}(E + \hbar\omega, \mathbf{k}) \hat{v}_{\beta} \hat{A}(E, \mathbf{k})] \quad (1-6)$$

其中  $f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}$  为费米-狄拉克函数， $k_B$  玻尔兹曼常数， $\mu$  为化学势（费米能级）。当在非稳态，如光泵激发下，电子-空穴对处于载流子倒置态，各占一费米能级  $\mu_e$  和  $\mu_h$ （电中性系统有  $\mu_e = -\mu_h$ ），准平衡分布  $n_F(\dots)$  替换  $f(\dots)$ ：

$$n_F(E) = \theta(E)f(E - \mu_e) + \theta(-E)f(E - \mu_h) \quad (1-7)$$

其中  $\theta(E)$  为单位阶跃函数（Heaviside step function）。进一步化简得到 A-B 堆叠双层石墨烯表面电导率实部：

$$\text{Re}[\sigma_s] = \frac{e^2}{2\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} [f(E) - f(E + \hbar\omega)] \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} |\nu_k|^2 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1-8)$$

$$\begin{pmatrix} A_{11}(E, \Delta)A_{44}(E + \hbar\omega, \Delta) + A_{44}(E, \Delta)A_{11}(E + \hbar\omega, \Delta) \\ A_{11}(E, -\Delta)A_{44}(E + \hbar\omega, -\Delta) + A_{44}(E, -\Delta)A_{11}(E + \hbar\omega, -\Delta) \\ 2A_{13}(E, \Delta)A_{13}^*(E + \hbar\omega, -\Delta) + 2A_{13}^*(E, -\Delta)A_{13}(E + \hbar\omega, \Delta) \end{pmatrix}$$

其中  $A_{ij}(\omega, \Delta)$  由式(2-11)定义。值得说明的是，此模型利用狄拉克函数的洛伦兹展开刻画石墨烯中电子散射率：

$$\delta(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{\omega^2 + \eta^2}, \quad \frac{1}{\tau_{\text{imp}}} = 2\eta \quad (1-9)$$

$\tau_{\text{imp}}$  为强度调制光电流光谱 (Intensity-Modulated Photocurrent spectroscopy) 反映的电子平均运输时间。

### K-K 关系

表面电导率满足 Kramers-Krönig relations:

$$\sigma_{sI}(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty d\alpha \frac{\sigma_{sR}(\alpha) - \sigma_{s\infty}}{\alpha^2 - \omega^2} \quad (1-10)$$

其中  $\mathcal{P}$  为柯西主值积分。综上，A-B 堆叠结构双层石墨烯表面电导率由式(1-8),(1-10)解析表出，笔者在 Matlab 中进行数值计算得出结果如下：

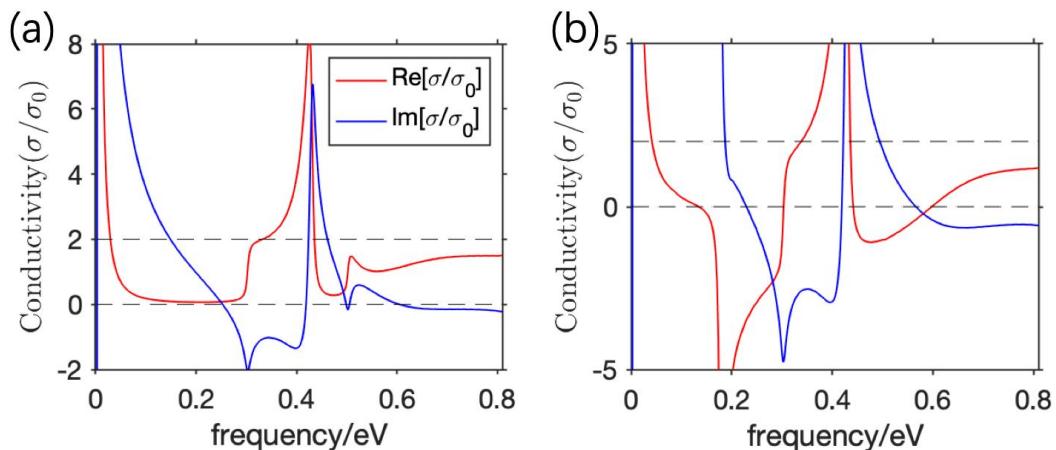


图 2.  $\sigma_0 = e^2/(4\hbar)$ . (a) A-B 型双层石墨烯光导,  $T = 300K$ , 电子色散率  $\eta = 10/(2\pi)mV$ , 非对称带隙  $\Delta = 0.2eV$ , 载流子平衡, 电子空穴费米能级  $\mu_e = \mu_h = 0.3eV$ ; (b) 与图(a)相似, 但处于载流子倒置态  $\mu_e = -\mu_h = 0.3eV$

### 2. 构建电磁模型

如图 3, 电子 (电荷量为  $q = -e$ ) 以恒定速度  $v$  穿过位于  $z = 0$  表面电导为  $\sigma_s(\omega)$  的 A-B 双层石墨烯, 介质 1 ( $z < 0$ ) 和介质 2 ( $z > 0$ ) 的相对磁导率, 相对介电常数分别为  $\mu_{r1}, \epsilon_{r1}$  和  $\mu_{r2}, \epsilon_{r2}$ , 真空磁导率, 介电常数  $\mu_0, \epsilon_0$  分别为由电荷  $q$  产生的电流密度为:

$$\bar{J}_z^q(\bar{r}, t) = \hat{z} q v \delta(x) \delta(y) \delta(z - vt) \quad (1-11)$$

在此运动情景中, 电磁场对时间是调谐的, 在垂直电子轨迹运动方向 xoy 平面也是调谐的, 所以将  $t, \bar{r}_\perp$  作傅立叶变换到  $\omega, \bar{k}_\perp$ :

$$\begin{aligned} \bar{J}_z^q(\bar{r}, t) &= \int d\omega d\bar{k}_\perp \bar{J}_{\bar{k}_\perp, \omega}^q(z) e^{i\bar{k}_\perp \bar{r}_\perp - i\omega t} \\ \bar{E}(\bar{r}, t) &= \int d\omega d\bar{k}_\perp \bar{E}_{\bar{k}_\perp, \omega}(z) e^{i\bar{k}_\perp \bar{r}_\perp - i\omega t} \\ \bar{H}(\bar{r}, t) &= \int d\omega d\bar{k}_\perp \bar{H}_{\bar{k}_\perp, \omega}(z) e^{i\bar{k}_\perp \bar{r}_\perp - i\omega t} \end{aligned} \quad (1-12)$$

其中,  $\bar{k}_\perp = (k_x, k_y)$ ,  $\bar{r}_\perp = (r_x, r_y)$ , 反变换解得:

$$\bar{J}_{\bar{k}_\perp, \omega}^q(z) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dtd\bar{r}_\perp \hat{z} q v \delta(x) \delta(y) \delta(z - vt) e^{-i\bar{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp + i\omega t} = \hat{z} \frac{q}{(2\pi)^3} e^{i\frac{\omega z}{v}}$$

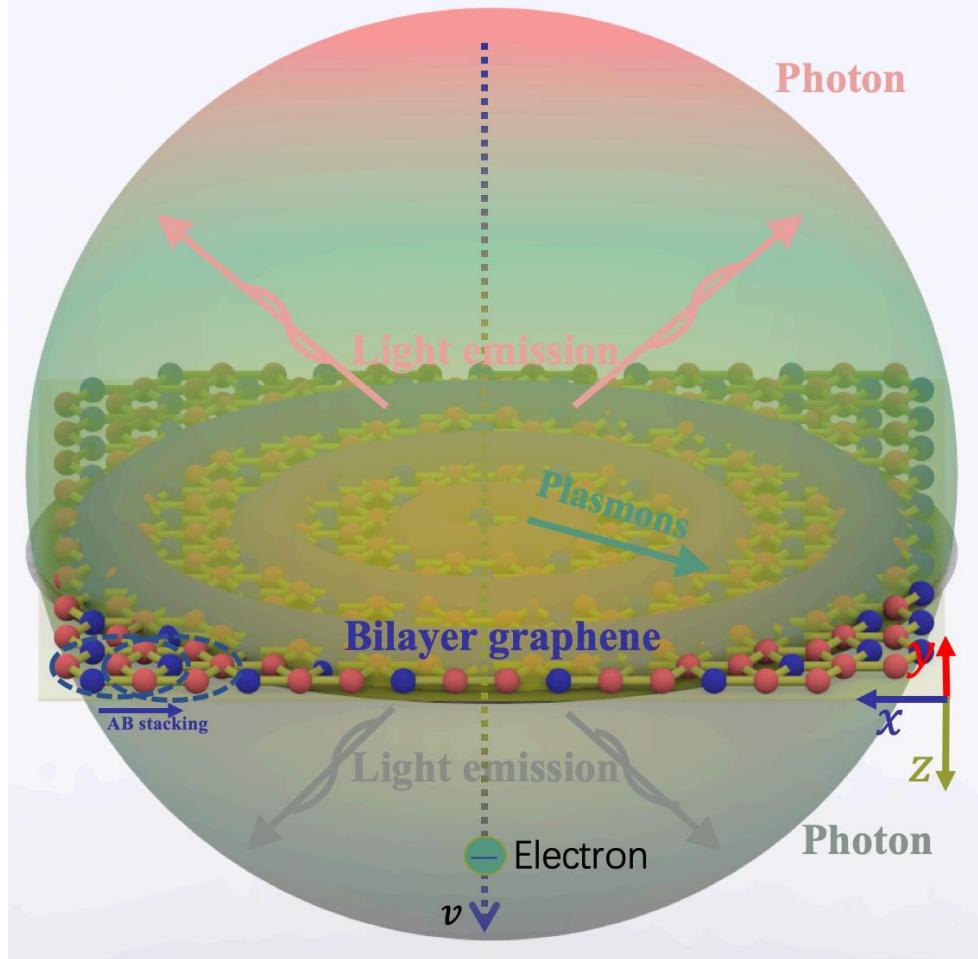


图 3 模型示意图: 电子以速度  $v$  垂直入射 2D 材料 AB 型双层石墨烯 ( $z = 0$  平面) 激发原场光子和近场表面等离激元。

### 3.求解电磁模型

Maxwell 方程联立  $z = 0$  处边界条件, 得到电磁场量如下, 求解过程繁杂不在此表出, 见论文附录, 这里直接给出结果(1-13)-(1-17)式:

$$\begin{aligned} \bar{E}_m^R(\bar{r}, t) &= \hat{z} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^{\infty} dk_\perp \frac{iq}{\omega \epsilon_0 (2\pi)^3} a_m(2\pi k_\perp J_0(k_\perp \rho)) e^{i(-1)^m \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} z - i\omega t} + \\ &\quad \hat{p} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^{\infty} dk_\perp \frac{iq}{\omega \epsilon_0 (2\pi)^3} a_m \left( (-1)^{m+1} \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} \right) (i2\pi J_1(k_\perp \rho)) e^{i(-1)^m \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} z - i\omega t} \end{aligned} \quad (1-13)$$

$$\begin{aligned} \bar{H}_m^R(\bar{r}, t) &= \hat{\phi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^{\infty} dk_\perp \frac{iq}{\omega \epsilon_0 (2\pi)^3} a_m(-\omega \epsilon_0 \epsilon_{r,m}) (i2\pi J_1(k_\perp \rho)) \\ &\quad e^{i(-1)^m \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \mu_{r,m} \epsilon_{r,m} - k_\perp^2} z - i\omega t} \end{aligned} \quad (1-14)$$

$$\bar{E}_m^q(\bar{r}, t) = \hat{z} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{-q}{8\pi\omega\epsilon_0\epsilon_{r,m}} \left( \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{r,m} \mu_{r,m} - \frac{\omega^2}{v^2} \right) H_0^{(1)} \left( \rho \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{r,m} \mu_{r,m} - \frac{\omega^2}{v^2}} \right) e^{i\frac{\omega}{v}z - \omega t} \quad (1-15)$$

$$+ \hat{p} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{q}{8\pi\omega\epsilon_0\epsilon_{r,m}} \left( i \frac{\omega}{v} \right) \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{r,m} \mu_{r,m} - \frac{\omega^2}{v^2}} H_1^{(1)} \left( \rho \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{r,m} \mu_{r,m} - \frac{\omega^2}{v^2}} \right) e^{i\frac{\omega}{v}z - \omega t} \quad (1-16)$$

$$\bar{E}_m(\bar{r}, t) = \bar{E}_m^q(\bar{r}, t) + \bar{E}_m^R(\bar{r}, t), \quad \bar{H}_m(\bar{r}, t) = \bar{H}_m^q(\bar{r}, t) + \bar{H}_m^R(\bar{r}, t) \quad (1-17)$$

matlab 求解场图如下：

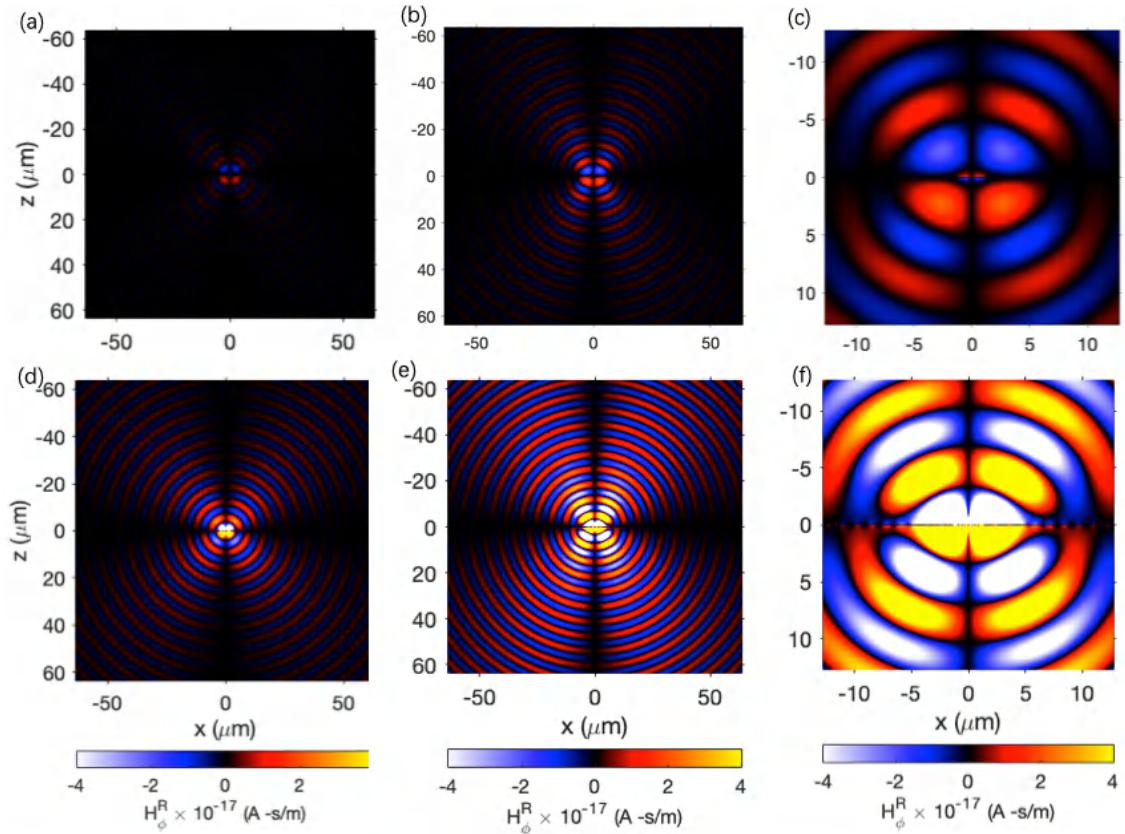
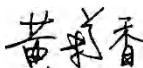


图 4 场分布：双层石墨烯参数与图 2 一致，(a-c) 处于平衡态，(d-f) 处于非平衡态。工作频率为 0.195eV，(a)和(d)中，电子速度为 0.5，(b)-(c)和(e)-(f)中，电子速度为 0.9c。

是否符合任务书要求进度：符合

尚需完成的任务	1. 解析渡越前向、后向远场辐射的分布特性； 2. 分析近场表面等离激元的分布特性； 3. 稳定性、灵敏性分析，系统研究电子运动速度、石墨烯化学势等变量与自由电子渡越辐射强度、能谱、方向性等性质之间的关系，结合结论为高能粒子分析仪提供理论基础。 4. 构建系统级仿真，观察、记录数据，并基于理论模型对结果进行解释，验证理论正确性。
	能否按期完成设计（论文）：能

存在问题和解决办法	存在问题	1.光导电磁模型存在多重积分数值积分运算，超出一般 CPU 算力； 2.对于超出纯数学定义的索末菲积分，需要结合合适的索末菲积分路径才能得到契合物理情景的数值解； 3.凝聚态、多体物理领域中对双层石墨烯光导模型的描述形式存在不同，需要探讨统一性，尤其需要确定模型的有效性。 4.解析解答电磁场量计算量巨大，需要大量演算过程； 5.通过光导参数对辐射方向性、强度进行调控探讨这个问题过于庞大，繁琐。
	拟采取的办法	<p>下述序号与“存在问题”栏一一对应。</p> <p>1.优化算法，基于 matlab 实现向量化编程，改写所有 for 循环为矩阵运算，基于 GPU 编程，指令 “GpuArray”调用并行运算单元，减小 CPU 负担；      2.深刻理解“索末菲辐射条件”，理解“在系统中引入损耗”，确定积分路径所在象限，通过人为判敛实际数值积分下，索末菲路径得到在 <math>k_p</math> 平面的上下限，步长以及如何规避极点；      3.与指导老师深入探讨并邮件联系提出电磁模型的科学家，组织线上会议，交流得到解答。      4.别无他法，错了就推倒重来，耐着性子攒劲算，撸起袖子加油干，同时保持沉着冷静，利用本科数理基础解决它！      5.在对不同参数建模过程中，需要考虑具体的呈现形式以及研究着眼点，不失科学性的前提下，简化研究步骤与过程。</p>
指导教师签字		日期 2022 年 4 月 10 日
检查小组意见	通过！	负责人签字：  2022 年 4 月 12 日

注：可根据长度加页。

北京邮电大学  
教师指导本科毕业设计（论文）记录表

学院	电子工程学院	专业	电子科学与技术	班级	2018211205
学生姓名	龚政	学号	2018210861	班内序号	6
指导教师姓名	张洪欣	职称	教授		
<p><b>(1) 第1—2周记录:</b></p> <p>1. 修改开题报告：开题报告需要按照指标点要求一一对应。          2. 对基于二维材料的渡越辐射进行充分调研。</p>					
指导教师签字			日期	2022 年 3 月 7 日	
<p><b>(2) 第3—4周记录:</b></p> <p>1. 要创新，挖掘双层石墨烯较单层石墨烯不同的点。          2. 双层石墨烯的光导曲线有没有与权威期刊验证，是否有效？</p>					
指导教师签字			日期	2022 年 3 月 18 日	
<p><b>(3) 第5—6周记录:</b></p> <p>1. 多挖掘双层石墨烯特殊光导特性带来的新的辐射机理，做一些创新；          2. 注意到光导曲线的阻尼程度与权威期刊并不一致，原因是什么？是错误么？</p>					
指导教师签字			日期	2022 年 3 月 31 日	
<p><b>(4) 第7—8周记录:</b></p> <p>1. 要强调辐射机理与切伦科夫辐射的区别，防止引起混淆；          2. 要突出双层石墨烯是一个二维材料，用电磁界面的形式建模。</p>					
指导教师签字			日期	2022 年 4 月 12 日	

**(5) 第 9—10 周记录:**

1. 数值计算不要局限于表面，要深入探究底层机理，并从物理角度解释。
2. 为什么近场辐射只做近似计算？

指导教师签字



日期

2022 年 4 月 29 日

**(6) 第 11 周记录:**

1. 修改毕业设计论文摘要：

摘要里面，不要第一章第二章的介绍，分 2 段写出主要工作，同时突出创新性。第一章，第二章等的介绍可放在第一章绪论最后，即增加一节本文的结构

2. 论文存在一些错别字需要复查；

3. 论文行文格式存在问题：两端对齐，孤行独立，所有图表题注的格式有没有空格，句号要做到统一，数值和单位之间要有空格。

指导教师签字



日期

2022 年 5 月 12 日

**(7) 第 12 周记录:**

1. 修改毕业设计论文正文：

正文里面太多的“我们”，显得口语化，改成“本文”或者去掉；第一章补充本文的主要研究内容，突出创新性；第二章-第六章，补充小结对每章进行总结；第七章补充对整个论文的总结，并放在展望前面；

2. 论文展望部分可以略讲一下自己的方案。

指导教师签字



日期

2022 年 5 月 21 日

**(8) 第 13 周记录:**

1. 注意答辩时长，讲 ppt 时间不要超过 10 分钟，注意详略得当，背景意义一句话带过；
2. 应用方面，详细阐述辐射调控理论对特殊波段，太赫兹波段辐射的调控；
3. 理论方面，如果在某部分做了近似，要突出理论的有效性。

指导教师签字



日期

2022 年 5 月 25 日