

Преломление электромагнитных волн решеткой из нанорулонов и листов на основе бислоев графен/нитрид бора

Н. А. Поклонский, С. А. Вырко, А. И. Сягло, С. В. Раткевич

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,
e-mail: poklonski@bsu.by

Предложен дизайн трехмерного метаматериала, состоящего из регулярно чередующихся нанорулонов и листов на основе бислоев графен/нитрид бора. Даны оценки показателя преломления такого метаматериала в видимом диапазоне длин волн электромагнитного излучения.

Ключевые слова: метаматериал; показатель преломления; бислойные BN-C рулоны и листы.

Refraction of electromagnetic waves by a lattice of nanoscrolls and sheets based on graphene/boron nitride bilayers

N. A. Poklonski, S. A. Vyrko, A. I. Siahlo, S. V. Ratkevich

Belarusian State University, Minsk, Belarus, e-mail: poklonski@bsu.by

A three-dimensional metamaterial design is proposed, consisting of regularly alternating nanoscrolls and sheets based on graphene/boron nitride bilayers. Estimates of the refractive index of such a metamaterial are provided in the visible range of electromagnetic radiation wavelengths.

Keywords: metamaterial; refractive index; bilayer BN-C nanoscrolls and sheets.

Введение

Искусственные периодические структуры (метаматериалы) с отрицательными диэлектрической ($\epsilon_r < 0$) и магнитной ($\mu_r < 0$) проницаемостями, называют левосторонними материалами [1]. Метаматериал характеризуется отрицательным коэффициентом преломления $n = -(\epsilon_r \mu_r)^{1/2} < 0$. При падении плоской электромагнитной волны на границу раздела обычного материала и метаматериала прошедшая волна находится на той же стороне от нормали к поверхности границы раздела, что и падающая. Такой метаматериал усиливает эванесцентные волны (несущие информацию о деталях меньше $\lambda/2$), что позволяет преодолеть дифракционный предел при формировании изображений [2].

Цель работы – моделирование нового типа метаматериала, состоящего из чередующихся нанорулонов из графена и нитрида бора и плоских листов легированного азотом графена n -типа на нитриде бора. Слои графена в нанорулоне являются электропроводящими, а слои нитрида бора – изолирующими. Как двухслойные нанорулоны (с внешним радиусом R_{out}), так и плоские бислои графена на нитриде бора расположены с периодом $a = 2R_{out} + \Delta + 2h$, где $\Delta = h = 0.335$ нм – минимальное расстояние между слоями углерода и нитрида бора. Рассчитывается величина $n < 0$ метаматериала для плоской линейно поляризованной электромагнитной волны. Магнитная компонента \mathbf{H} волны направлена вдоль оси нанорулона, а электрическая \mathbf{E} — вдоль плоскости бислоя графен/нитрид бора (рис. 1).

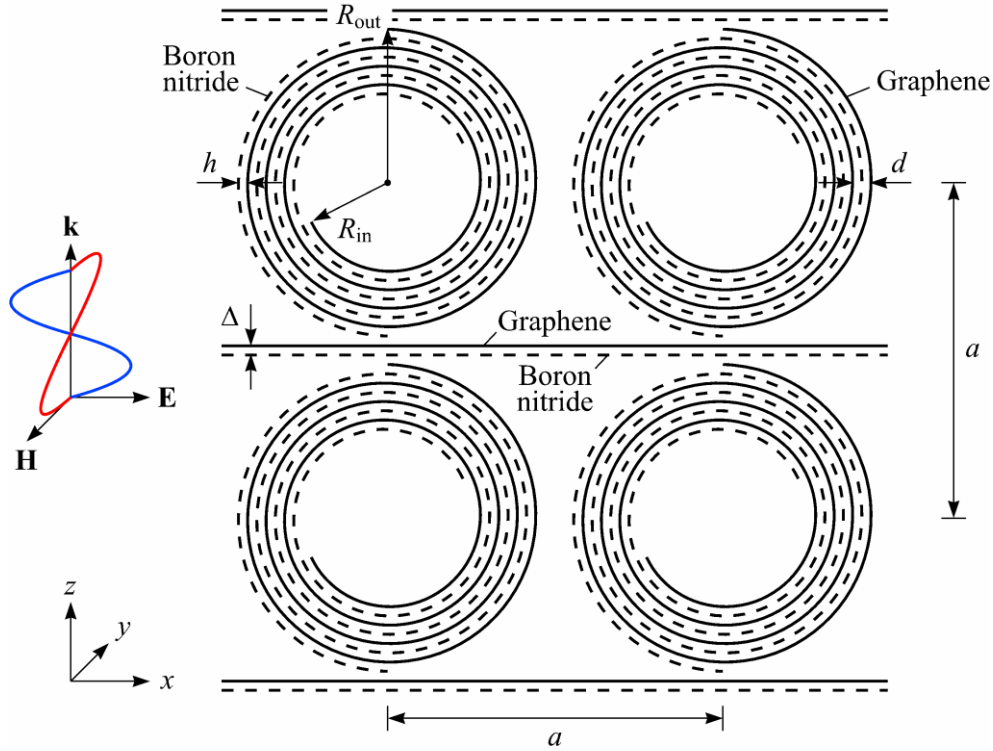


Рис. 1. Структура метаматериала из нанорулонов, свернутых из полосок графена и нитрида бора, направленных вдоль оси y , и бислоев графен/нитрид бора, параллельных плоскости xz , и направления векторов \mathbf{E} , \mathbf{H} и волнового вектора \mathbf{k} плоской линейно поляризованной электромагнитной волны при ее распространении в таком метаматериале

1. Основные соотношения

Метаматериалы с отрицательной магнитной проницаемостью $\mu_r < 0$ в электромагнитном поле рассмотрены в работах [1, 3] и могут представлять собой систему периодически расположенных рулонов из проводящего материала (SRCs – “Swiss roll” capacitors). Эффективная магнитная проницаемость системы из SRCs дается выражением [3]:

$$\mu_r = 1 - \frac{\pi R_{\text{out}}^2}{a^2} \left(1 - \frac{c^2 d}{2(N-1)\pi^2 \omega^2 R_{\text{out}}^3} \right)^{-1}, \quad (1)$$

где a – расстояние между центрами соседних рулонов, R_{out} – внешний радиус рулона, $c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-1/2}$ – скорость света в вакууме, d – зазор между витками в рулоне, N – число витков в рулоне.

В легированном азотом графене (атомы N являются донорами, замещающими атомы C в графене [4], и при комнатной температуре полностью ионизованы) электронный газ может быть охарактеризован друдеподобной частотной зависимостью комплексной относительной диэлектрической проницаемости [5]:

$$\epsilon_D(\omega) = 1 + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega\epsilon_0\Delta}, \quad (2)$$

где ω – угловая частота, i – мнимая единица, $\sigma(\omega)$ – двумерная электрическая проводимость графена (единицы измерения: $\text{Ом}^{-1} = \text{См}$), ϵ_0 – электрическая

постоянная, $\Delta = 0.335$ нм – толщина графенового листа.

При достаточно сильном легировании электрическая проводимость графена определяется внутризонной электрической проводимостью [6]:

$$\sigma(\omega) \approx \sigma_{\text{intra}}(\omega) \approx \frac{ie^2 E_F}{\pi \hbar^2 (\omega + i\tau^{-1})}, \quad (3)$$

где e – элементарный заряд, v_F – скорость Ферми электрона ($\approx 10^6$ м/с), τ – время релаксации, E_F – уровень Ферми, \hbar – приведенная постоянная Планка.

Подставляя электропроводность (3) в формулу (2), получаем

$$\varepsilon_D(\omega) = 1 - \frac{e^2 E_F}{\pi \varepsilon_0 \hbar^2 \Delta \cdot \omega(\omega + i\tau^{-1})} = 1 - \frac{e^2 E_F}{\pi \varepsilon_0 \hbar^2 \Delta} \left(\frac{1}{\omega^2 + \tau^{-2}} - \frac{i\tau^{-1}}{\omega(\omega^2 + \tau^{-2})} \right), \quad (4)$$

где учтено, что $i^2 = -1$.

Из выражения (4) следует, что действительная часть комплексной диэлектрической проницаемости графена равна

$$\varepsilon_r(\omega) = \text{Re}[\varepsilon_D(\omega)] = 1 - \frac{e^2 E_F}{\pi \varepsilon_0 \hbar^2 \Delta \cdot (\omega^2 + \tau^{-2})}. \quad (5)$$

Время релаксации электронов проводимости в графене можно оценить по формуле [7]:

$$\tau = \mu E_F / e v_F^2, \quad (6)$$

где $\mu \approx 10^4$ см²/(В·с) – экспериментальное значение дрейфовой подвижности электронов в графене, ограниченной рассеянием на ионах азота [8].

Из (5) следует условие на частотный диапазон излучения, для которого относительная диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_r(\omega)$ графена n -типа отрицательна:

$$\omega^2 < \omega_p^2 - \tau^{-2}, \quad (7)$$

где величина $\omega_p = (e^2 E_F / \pi \varepsilon_0 \hbar^2 \Delta)^{1/2}$ является аналогом плазменной частоты.

Оценки по формуле (7) для уровня Ферми в диапазоне от 140 до 600 мэВ дают значения плазменной частоты $\omega_p/2\pi$ от 380 ТГц до 780 ТГц. То есть, задавая определенный уровень легирования n -типа, можно получить отрицательные значения высокочастотной относительной диэлектрической проницаемости графена ε_r во всем видимом диапазоне излучения.

Для формирования материала с отрицательной магнитной проницаемостью в желаемом диапазоне частот мы предлагаем использовать нанорулоны, свернутые из полосок графена и нитрида бора длиной 100 нм, расположенных с периодом a .

Согласно модели [9], двухслойный нанорулон с зазором между витками $d = 2h = 0.335 \cdot 2$ нм = 0.67 нм, свернутый из нанополосок графена и нитрида бора длиной $L = 100$ нм, в устойчивом состоянии имеет внутренний и внешний радиусы $R_{\text{in}} = 3.1$ нм и $R_{\text{out}} = 5.6$ нм; число витков $N = (\varphi_{\text{out}} - \varphi_{\text{in}})/2\pi = 3.7$ (рис. 1).

Значение отрицательной магнитной проницаемости системы из нанорулонов дается формулой (1). При расчете по формуле (1) сопротивлением материала нанорулона пренебрегаем. В соответствии с формулой (1) угловая частота ω , при которой $|\mu_r| \rightarrow \infty$, равна $\omega_\mu^\infty = (c/\pi R_{\text{out}}^{3/2}) [d/2(N-1)]^{1/2}$, а угловая частота ω , при которой $\mu_r \rightarrow 0$, равна

$$\omega_{\mu}^0 = \frac{c}{\pi R_{\text{out}}^{3/2}} \sqrt{\frac{d}{2(N-1)(1 - \pi R_{\text{out}}^2/a^2)}}.$$

Для рассматриваемой структуры из нанорулонов с $R_{\text{out}} = 5.6$ нм, $d = 0.67$ нм, $N = 3.7$ и $a = 12.2$ нм получаем $f_{\mu\infty} = \omega_{\mu}^{\infty}/2\pi = 404$ ТГц и $f_{\mu 0} = \omega_{\mu}^0/2\pi = 694$ ТГц, т. е. $\mu_r < 0$ практически во всем диапазоне видимого света (от красного до фиолетового).

2. Результаты и обсуждение

Рассмотрим метаматериал, состоящий из чередующихся двухслойных нанорулонов, свернутых из полосок графена и нитрида бора, и плоских бислоев «легированный графен/нитрид бора» (рис. 1). Выбор исходных компонентов продиктован большей технологичностью их использования по сравнению с метаматериалом из рулонов и нанотрубок, предложенным в работе [10], поскольку рулоны, в принципе, можно сворачивать из плоского бислоя [11]. Плоские бислои «графен n -типа/нитрид бора» обеспечивает друдеподобную зависимость ϵ_r метаматериала от частоты $\omega/2\pi$ для электрической компоненты \mathbf{E} волны, направленной вдоль плоскости бислоя, а двухслойные рулоны из полосок графена и нитрида бора позволяют получать отрицательные значения магнитной проницаемости.

Уровень Ферми в сильно легированном атомами азота (как донорами) графене $E_F = \hbar v_F (\pi n_{2D})^{1/2}$, где n_{2D} — двумерная концентрация электронов; для $n_{2D} = 7.3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ имеем $E_F = 1$ эВ. В соответствии с рис. 3 рассчитанные по (5) действительные значения диэлектрической проницаемости $\epsilon_r = \text{Re}(\epsilon_D)$ для легированного азотом графена ($E_F = 1$ эВ) в диапазоне частот от 100 до 1000 ТГц, включающем частоты $\omega/2\pi$ видимого излучения, отрицательны и изменяются в пределах $-100 < \epsilon_r < -0.005$, что согласуется с результатами [12].

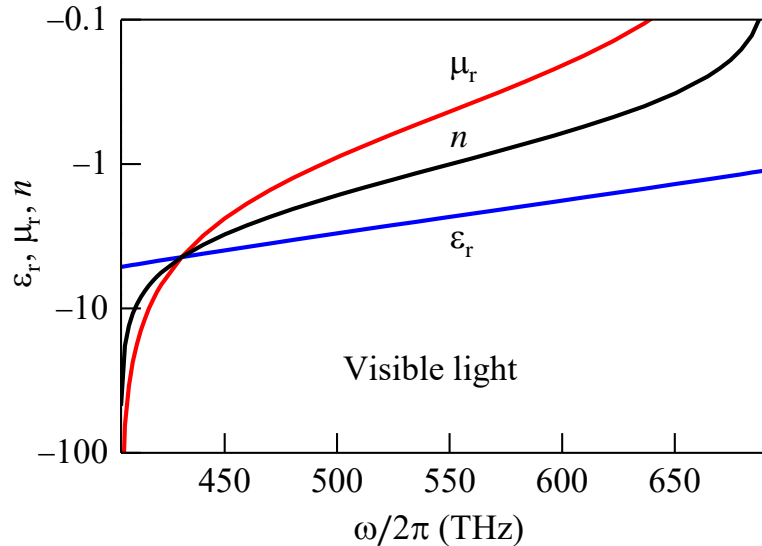


Рис. 3. Рассчитанные относительная диэлектрическая проницаемость ϵ_r , относительная магнитная проницаемость μ_r и коэффициент преломления n метаматериала из рулонов графен/нитрид бора и плоских бислоев «графен n -типа/нитрид бора» в интервале частот электромагнитного излучения $\omega/2\pi$ от 404 ТГц до 694 ТГц

Расчет μ_r выполнен по (1) для метаматериала, состоящего из плоских бислоев «графен n -типа/нитрид бора» с периодом между слоями $a = 2R_{\text{out}} + \Delta + 2h = 12.2$ нм и двухслойных нанорулонов, свернутых из полосок графена и нитрида бора с внешним радиусом $R_{\text{out}} = 5.6$ нм, расположенных в квадратной решетке с тем же периодом a . Такой метаматериал обеспечивает изменения значений ϵ_r , μ_r и $n = -(\epsilon_r \mu_r)^{1/2}$ в пределах $-5.2 < \epsilon_r < -1.1$, $-432 < \mu_r < 0$ и $-47 < n < 0$ на частотах электромагнитного излучения $\omega/2\pi$ от 404 до 694 ТГц (рис. 3). На частоте 550 ТГц (середина рассмотренного диапазона частот) $\epsilon_r = -2.3$, $\mu_r = -0.4$ и $n = -1.0$.

Заключение

Предложен новый метаматериал с отрицательными диэлектрической (ϵ_r) и магнитной (μ_r) проницаемостями, состоящий из периодически расположенных нанорулонов и листов из бислоев графен/нитрид бора. Рассчитаны параметры структуры метаматериала с отрицательным показателем преломления $n < 0$ для видимого света (от красного до фиолетового). В середине рассмотренного частотного диапазона (550 ТГц; зеленый свет) $\epsilon_r = -2.3$, $\mu_r = -0.4$ и $n = -1.0$.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (грант № Ф23РНФ-049) и ГПНИ «Конвергенция-2025».

Библиографические ссылки

1. Вендик И. Б., Вендик О. Г. Метаматериалы и их применение в технике сверхвысоких частот // ЖТФ. 2013. Т. 83, № 1. С. 3–28.
2. Sun J., Zhou J. Metamaterials: the art in materials science // Engineering. 2025. Vol. 44. P. 145–161.
3. Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena / J. B. Pendry [et al.] // IEEE Trans. Microw. Theory Techn. 1999. Vol. 47, № 11. P. 2075–2084.
4. Functionalized graphene and targeted applications – Highlighting the road from chemistry to applications / A. Stergiou [et al.] // Prog. Mater. Sci. 2020. Vol. 114. P. 100683 (1–71).
5. Wang W. Edge magnetoplasmons and the optical excitations in graphene disks / W. Wang, S. P. Apell, J. M. Kinaret // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 86, № 12. P. 125450 (1–5).
6. Взаимообратимое плазмонное переключение в графеновом нанорезонаторе, нагруженном оболочечной квантовой точкой / М. Ю. Губин [и др.] // Квантовая электроника. 2020. Т. 50, № 10. С. 976–983.
7. Koppens F. H. L. Graphene plasmonics: a platform for strong light–matter interactions / F. H. L. Koppens, D. E. Chang, F. J. García de Abajo // Nano Lett. 2011. Vol. 11, № 8. P. 3370–3377.
8. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K. S. Novoselov [et al.] // Nature. 2005. Vol. 438, № 7065. P. 197–200.
9. Structure and energetics of carbon, hexagonal boron nitride, and carbon/hexagonal boron nitride single-layer and bilayer nanoscrolls / A. I. Siahlo [et al.] // Phys. Rev. Materials. 2018. Vol. 2, № 3. P. 036001 (1–9).
10. Model of metamaterial based on graphene scrolls and carbon nanotubes with negative refractive index / A. I. Siahlo [et al.] // Semiconductors. 2018. Vol. 52, № 14. P. 1886–1889.
11. A new technique for fabricating three-dimensional micro- and nanostructures of various shapes / V. Ya. Prinz [et al.] // Nanotechnology. 2001. Vol. 12, № 4. P. 399–402.
12. Голованов О. А. Проводимость графена в терагерцовом и инфракрасном диапазонах частот / О. А. Голованов, Г. С. Макеева, В. В. Вареница // Надежность и качество сложных систем. 2014. № 4 (8). С. 26–33.