引用本文:宋效先,张宇,郭学文,等. 双层石墨烯手性超表面实现圆二色性及其动态调控研究[J]. 光通信技术,2024,48(5):108-112.

双层石墨烯手性超表面实现圆二色性及其动态调控研究

宋效先[1,2],张 宇[2],郭学文[2],张海婷[2*],张晶晶[2],戴子杰[2],梁 莹[2],姚建铨[1,2]
(1.天津大学 精密仪器与光电子工程学院,天津 300072;2.江苏大学 机械工程学院,江苏 镇江 212013)

摘要:针对石墨烯手性超表面的研究主要集中在中红外波段,而在太赫兹波段的器件研究相对较少,以及石墨烯非本征结构产生的圆二色性不足的问题,根据石墨烯的特性设计了一种双层石墨烯手性超表面结构。该结构的上下两层石墨烯图案存在一定的夹角,通过调整这个夹角大小和中间层二氧化硅的厚度,研究了超表面结构的圆二色性。此外,还通过改变石墨烯的费米能级和弛豫时间,分析了超表面结构的动态调谐能力。仿真结果表明:该超表面结构能够在太赫兹频段实现圆二色性,并且具备动态调谐的能力。

关键词:超表面;石墨烯;太赫兹;圆二色性;费米能级;弛豫时间
中图分类号:O436;TN929　**文献标志码**:A　**文章编号**:1002-5561(2024)05-0108-05
DOI:10.13921/j.cnki.issn1002-5561.2024.05.018　**开放科学(资源服务)标识码(OSID)**:

Research on circular dichroism and dynamic control of bilayer graphene chiral metasurfaces

SONG Xiaoxian[1,2], ZHANG Yu[2], GUO Xuewen[2], ZHANG Haiting[2*],
ZHANG Jingjing[2], DAI Zijie[2], LIANG Ying[2], YAO Jianquan[1,2]
(1. College of Precision Instruments and Opto-electronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China;
2. School of Mechanical and Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang Jiangsu 212013, China)

Abstract: This paper focuses on the research of graphene chiral metasurfaces, which is mainly concentrated in the mid-infrared band, while there are relatively few studies on devices in the terahertz band, and the problem of insufficient circular dichroism generated by the non-intrinsic structure of graphene. Based on the properties of graphene, a double-layer graphene chiral metasurface structure is designed. There is a certain angle between the upper and lower graphene patterns of the structure. By adjusting the size of this angle and the thickness of the intermediate silicon dioxide layer, the circular dichroism of the metasurface structure is studied. In addition, the dynamic tuning ability of the metasurface structure is analyzed by changing the Fermi level and relaxation time of graphene. The simulation results show that the metasurface structure can achieve circular dichroism in the terahertz frequency band and has the ability of dynamic tuning.

Key words: metasurface, graphene, terahertz, circular dichroism, fermi level, relaxation time

0 引言

手性在自然界中普遍存在,是指某一物体无法通过自身的旋转和平移与其镜像重合的特性[1-3]。光学手性主要包括圆二色性[4]、旋光性[5]和非对称传输特性[6]。圆二色光谱已广泛应用于生物医药和分子化学领域,可用于检测蛋白质和脱氧核糖核酸(DNA)的结构信息,也可用于研究电荷转移和跃迁过程。近红外圆二色光谱已成为探测过渡金属 d→d 跃迁的有效手段,有助于研究分子的电子分布和几何结构。自然存在的手性物质的手性响应通常较弱,这大大限制了手性研究及其应用。随着超材料的发展及微加工技术的进步,

收稿日期:2024-07-26。
基金项目:江苏省自然科学基金项目(批准号:BK20220519)资助;江苏省高校面上项目(批准号:22KJB140002)资助;光电信息技术教育部重点实验室(天津大学)项目(批准号:2022KFKT010)资助;河北省先进激光技术与装备重点实验室开放课题(批准号:HBKL-ALTE2024006)资助。

作者简介:宋效先(1985—),男,博士后,讲师,目前就读于天津大学精密仪器与光电子工程学院光学工程博士后工作站,主要从事基于二维材料、量子点和钙钛矿等新型材料的太赫兹功能调控器件、微纳光电材料与宽光谱光电探测器件的研究工作。



*** 通信作者**:张海婷(1984—),女,博士,讲师,主要研究方向为太赫兹功能器件和微纳光电材料与器件。

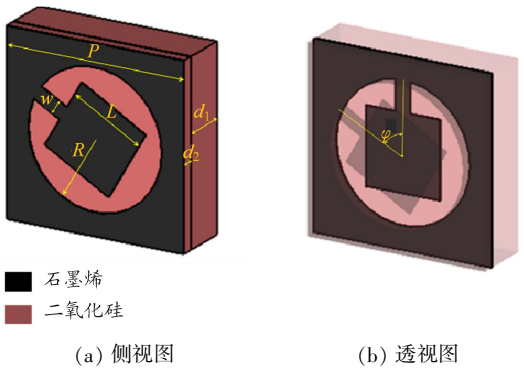
人们在微米乃至纳米尺度上的设计与加工变得更为精确灵活,同时将手性的概念融入其中,从而产生了手性超材料。然而,当前大多数手性超材料的加工工艺复杂且成本高昂。因此,设计一种成本低廉、易于制备且具有显著手性效应的手性超材料具有重要意义。

近年来,除了针对金属手性超表面的研究[7-8],基于石墨烯[9]的手性超表面的圆二色性和旋光性研究也取得了进展。KIM T T 等人[11]设计了一种复合型手性超表面,该结构由一层石墨烯和两层非手性旋转对称的金属结构组成。该结构在太赫兹波段工作,当太赫兹波垂直入射并激发石墨烯表面等离子体激元时,能够产生强烈的圆二色性和旋光性,并可通过调整外加栅极电压的方式实现动态调控。ZHOU S E 等人[12]提出了一种复合型非本征手性结构,由一层石墨烯超表面和镂空的金属分裂环构成。电磁波倾斜入射时,可通过改变入射角来调节圆二色性和旋光性的值,在红外波段产生光学响应。当入射角为 45°时,在50 THz 处,反射的圆二色性峰值达到 70%;而在 51 THz 处,透射的圆二色性峰值则为 40%。ZHOU J X 等人[13]设计了一种 L 形石墨烯非本征手性超表面结构,可在中红外区域实现斜入射下的圆二色性和旋光性。这种结构具有较宽的带宽和 2 条负圆二色性带,并且这 2 种手性光学特性的共振频率对入射角的变化不敏感。当入射角为 60°时,可获得圆二色性最大值为 24.64%。这种圆二色性的产生归因于电偶极子和磁偶极子之间的强相互作用。此外,当石墨烯超表面的费米能级和弛豫时间发生变化时,圆二色谱的频率和振幅也会随之变化。目前,关于石墨烯手性超表面的研究主要集中在中红外波段,而工作在太赫兹波段的器件研究相对较少,关于由石墨烯非本征结构产生圆二色性的研究也相对较小。因此,基于相关研究成果,本文提出一种双层石墨烯手性超表面结构,并对其圆二色性进行研究。

1 太赫兹手性超表面结构设计

本文设计了一种双层石墨烯手性超表面结构,其单元结构如图 1 所示。利用电磁仿真软件 CST 2019 进行建模和仿真。具体步骤如下:

首先,构建表面结构最下层的基底,材料选用二氧化硅,表面铺设一层石墨烯。在此阶段需要设置好石墨烯的费米能级、弛豫时间和中间层二氧化碳的厚度等关键参数。接着,通过布尔运算构建石墨烯的镂空图案。然后,在石墨烯表面构建一个中间基底,材料同样选用二氧化硅。通过平移和旋转等方法将下层石墨烯复制到中间基底表面,并确保它与下层石墨烯的镂空图案形成一定的夹角 φ。最后,设置好边界条件,在合适的频率范围内进行仿真。



(a) 侧视图　　(b) 透视图

图 1 双层石墨烯手性超表面单元结构

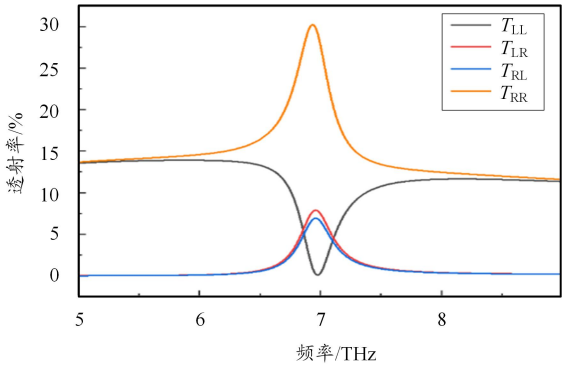
关键参数设置如下:结构单元的周期 P 为 240 nm,2 层石墨烯表面的结构参数一致。镂空图案的外圆半径 R 为 90 nm,内部正方形的边长 L 为 100 nm,开口宽度 w 为 20 nm。不同之处在于,上层石墨烯镂空图案相对于下层石墨烯逆时针旋转了 60°。底层二氧化硅的厚度 d_1 为 60 nm,中间层二氧化硅的厚度 d_2 为 15 nm。石墨烯的费米能级设置为 0.8 eV,弛豫时间设置为 1.2 ps。

在电磁仿真软件中,本文利用基于时域有限差分(FDTD)法的频域求解器对该结构进行仿真。其中,边界条件在 x 和 y 方向上都设置为周期性边界,z 方向设置为开放空间。

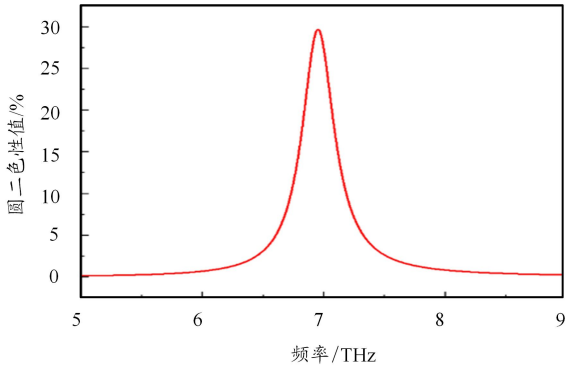
2 太赫兹手性超表面器件仿真结果及分析

为了确保得到的圆二色性值为正值[14],本文定义圆二色性计算式为 $Y_{CD}=T_{RR}-T_{LL}$,其中,T_{RR}、T_{LL} 分别为右旋圆偏振光(RCP)、左旋圆偏振光(LCP)的共偏振透射率。当圆偏振光垂直入射时,仿真结果如图 2 所示。T_{LR}、T_{RL} 分别为 LCP、RCP 透射波的透射率。可以看出,在 5~9 THz 波段内,T_{LR}、T_{RL} 基本相同且数值较低,这意味着该结构中不存在显著的非对称传输特性。然而,对于直接透射率而言,两者之间存在较大的差异,这表明该结构能够实现圆二色性效应。圆二色性最大值在 7 THz 频率处,约为 29%。

本文通过仿真得到了 7 THz 频率处 LCP、RCP 垂直入射时的表面电流情况,如图 3(a)、图 3(b)所示。双层石墨烯产生圆二色性的电磁机制[15]如图 3(c)所示。从图 3(a)、图 3(b)可以看出,LCP、RCP 的电流方向恰好相反,但 LCP 的电流强度明显高于 RCP。电流主要集中在 2 个开口处,形成环状电流,但电流分布并不

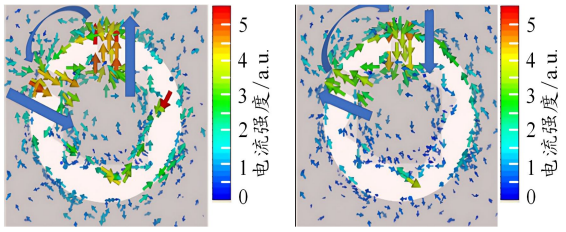


(a) 透射率曲线

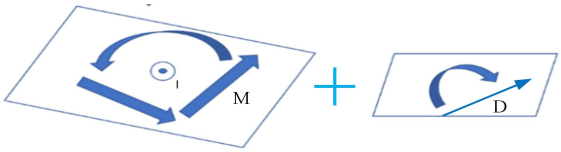


(b) 圆二色性曲线

图 2 圆偏振光垂直入射时的仿真结果



(a) LCP 入射时的表面电流　　(b) RCP 入射时的表面电流



(c) 电磁耦合分析

图 3 双层石墨烯产生圆二色性的电磁机制

均匀,这种不均匀性为磁偶极子和电偶极子的产生及它们之间的耦合创造了条件。以 LCP 入射时的表面电流为例,由于该结构由上下 2 层石墨烯组成,因此环状电流可以分解为两部分:一部分是在一个与水平面成一定角度的平面上强度均匀分布的环状电流(此环状电流激发磁偶极子 M),另一部分是位于水平面的半环电流(此半环电流激发电偶极子 D)。在这种情况下,磁偶极子和电偶极子耦合,促进了对入射光的吸收,从而降低了直接透射率。同理,RCP 倾斜入射下的超表面也会产生类似的电磁耦合现象,但由于耦合强度较弱,RCP 的透射率高于 LCP,进而产生了圆二色性效应。

当圆偏振光倾斜入射时再次进行了仿真研究,本文选择倾斜角为 60°。通过计算得到的不同旋向的圆偏振光的透射曲线如图 4 所示。与垂直入射的情况(图 2)相比,T_{RR} 有所下降,而圆二色性的强度也相应减弱。与此同时,T_{RL}、T_{LR} 均有所上升,并且出现了差异,因此可以实现非对称传输特性。由此可见,当圆偏振光以倾斜角度照射该结构时,会一定程度上抑制直接透射而促进交叉偏振透射。该结构能够同时实现圆二色性和非对称传输性,为手性超表面的研究提供了一种新的思路。

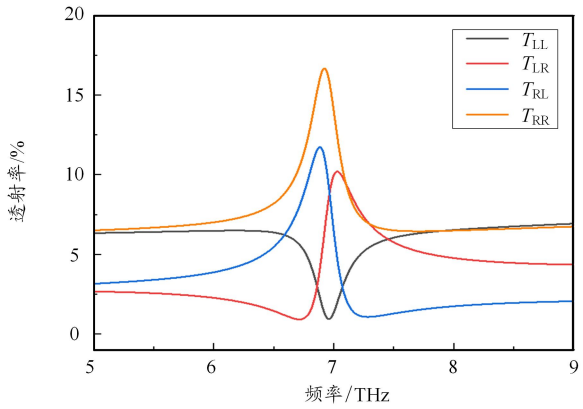
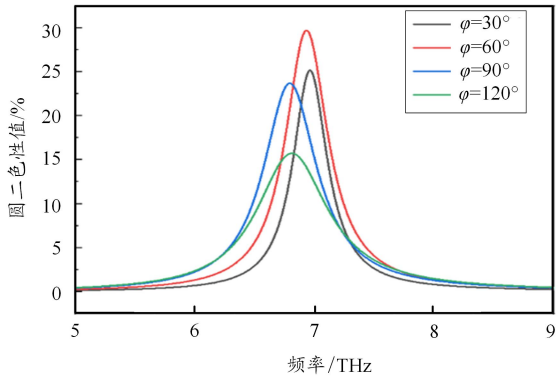


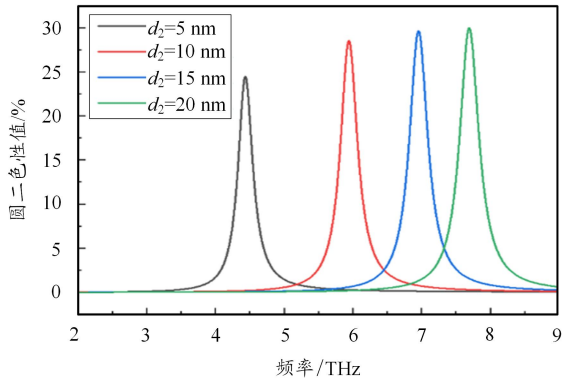
图 4 倾角为 60°时的透射率曲线

改变上层石墨烯表面相对于下层石墨烯表面的夹角 φ[16],得到的仿真结果如图 5(a)所示。可以看出,当 φ 从 30°增大到 120°时,圆二色性峰值的大小呈现先增加后减小的趋势(分别为 25%、30%、23.5%、15%),且峰值对应的频率不尽相同。其中,当 φ=60°、频率为 7 THz 时,圆二色性达到最大值,约为 30%。除此之外,仿真结果还表明,在 φ=0°或 φ=180°时,圆二色性均为 0。这是因为随着夹角的增大,系统的手性从无到有,逐渐增强至峰值后又逐渐减弱,直至消失。

进一步地,将中间层二氧化硅的厚度 d_2 依次改为 5、10、15、20 nm,仿真得到的圆二色性结果如图 5(b)所示。可以看出,随着 d_2 不断增加,圆二色性也随之增大;当 d_2=20 nm 时,圆二色性最大值可达约 30%,但同时也出现了蓝移现象。然而,当 d_2 继续增加到一定值后,出现圆二色性的频率波段将超出太赫兹频段范围。在实际应用中,厚度的增加将会带来更多的损耗。



(a) φ 不同



(b) d_2 不同

图 5 不同旋转角 φ 和二氧化硅厚度 d_2 时的圆二色性曲线

3 圆二色性的动态调谐仿真

结构的特性通常与其结构参数紧密相关。一旦结构设计完成,若想通过改变其参数(例如长度、角度、厚度等)来调整特性是非常困难的,并且通常会带来额外的成本。因此,在大多数情况下,要获得新的性能往往需要更换整个结构。科研人员一直在探索能够实现动态调控的新方法。石墨烯等新型材料的出现为实现结构特性的动态调整提供了可能途径——无需重构整个结构,仅需通过外加电场或掺杂等方式即可实现光学或电学特性的动态调谐。例如,通过改变石墨烯的费米能级和弛豫时间,可以动态调控超表面的圆二色性和旋光性。石墨烯的费米能级可通过调控外加电场或化学掺杂的方式改变。在本文提出的超表面结构中,可以在二氧化硅衬底上涂覆一层导体膜,通过在石墨烯和导体膜之间施加偏置电压来实现石墨烯费米能级的调谐。

本文通过施加电压的方法使石墨烯的费米能级 E_F 分别变为 0.6、0.7、0.8、0.9 eV,得到圆二色性随费米能级 E_F 变化的情况如图 6 所示。可以看出,随着 E_F 的

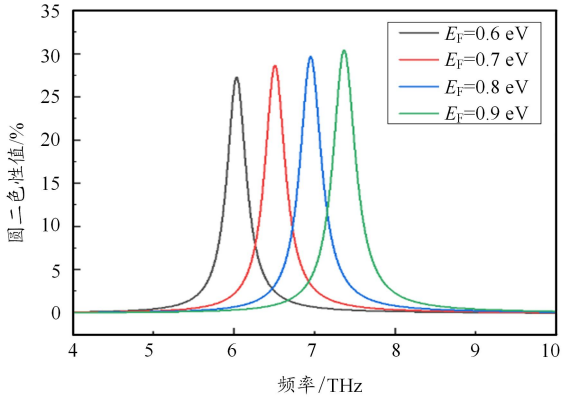


图 6 圆二色性随费米能级 E_F 的变化

增加,圆二色性峰值逐渐增大,从 0.6 eV 时的 27%增长到了 0.9 eV 时的 30%;同时,峰值出现了蓝移,从 6 THz 转移到了 7.5 THz。这一结果表明,通过改变石墨烯的费米能级可以有效调控圆二色性的峰值及其频率,实现了该圆二色性的动态调控,这也意味着石墨烯手性超表面结构可以应用于不同的波长范围。

除了费米能级之外,石墨烯的弛豫时间也可以用来实现超表面的动态调谐。在实际应用中,温度对石墨烯中的电子散射有着显著影响,从而可以用来调控弛豫时间。在较低温度下,声子散射减少,电子的弛豫时间会延长;而在较高温度下,声子散射增加,电子的弛豫时间会缩短。因此,可以通过温度控制设备实现温度调控,进而实现弛豫时间的调控。

将石墨烯的费米能级固定在 0.8 eV, 控制弛豫时间 τ 在 0.8~1.4 ps 内变化[17],得到的圆二色性随弛豫时间的变化结果如图 7 所示。可以看出,随着 τ 的增大,圆二色性峰值也随之增大。当 τ=1.4 ps 时,圆二色性峰值可达 32%;与此同时,圆二色性峰值所对应的频率保持不变。这是因为当石墨烯的弛豫时间增加时,石墨烯自由载流子的损耗降低,表面等离激元效应更加

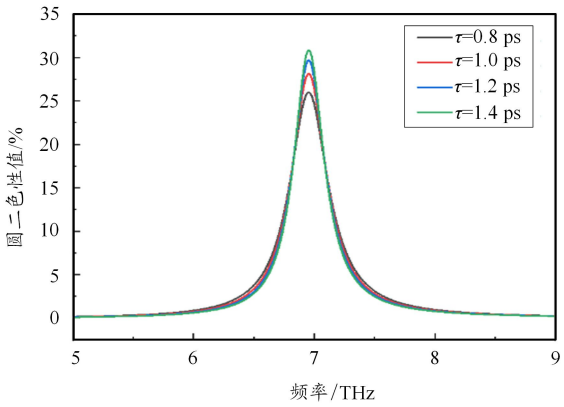


图 7 圆二色性随弛豫时间 τ 的变化

显著，从而使得圆二色性增强。相比于一些金属超材料,石墨烯超表面可以更加便捷高效地实现动态调谐。

表 1 列出了部分研究者设计的不同手性超表面的性能,这些数据用于比较不同材料、不同工作波段的手性器件的最大圆二色性值及其动态调控性能。例如,GUGLIELMELLI A 等人[18]设计的手性超表面虽然最大圆二色性值能够达到 0.45,但不具备动态调控能力;而 SHOKATI E 等人[19]利用石墨烯设计的手性超表面虽然具备动态调控能力，但其最圆二色性值较低。相比之下，本文所设计的结构不仅具有动态调控能力,而且还能保持相对较高的圆二色性值。这一特点为设计多功能器件提供了更多的可能性。

表 1 部分已报道手性超表面性能

手性超表面	工作频率/THz	最大圆二色性值	可调性	参考文献
金超表面	0.4~1.3	0.45	否	[18]
硅超表面	0.5~1.5	0.4	否	[20]
石墨烯超表面	11.5~15	0.2	是	[19]
石墨烯超表面	8~22	0.25	是	[21]
石墨烯超表面	5~9	0.29	是	本文

4 结束语

本文设计了一种基于双层石墨烯的结构,该结构能在圆偏振光垂直、倾斜入射的情况下在太赫兹频段实现圆二色性效应。上下 2 层石墨烯镂空图案之间存在的夹角的大小会影响圆二色性的强度;同时,随着中间介质层厚度的增加,圆二色性的强度也会相应增大。除此之外,通过调整石墨烯的费米能级和弛豫时间,可以实现对该结构圆二色性的动态调控。这种结构的设计对于实现可调谐偏振控制的集成光子器件具有重要的意义。

参考文献:

[1] LI J, ZHENG C, YANG Y, et al. Lossless dielectric metasurface with giant intrinsic chirality for terahertz wave[J]. Optics Express, 2021, 29(18): 28329–28337.

[2] VUKUSIC P, SAMBLES J. Photonic structures in biology[J]. Nature 2003, 424: 852–855.

[3] SHARMA V, CRNE M, PARK J O, et al. Structural origin of circularly polarized iridescence in jeweled beetles[J]. Science, 2009, 325(24): 405–407.

[4] HONG Q L, XU W, ZHANG J F, et al. Optical activity in monolayer black phosphorus due to extrinsic chirality[J]. Optics Letters, 2019, 44(7): 1774–1777.

[5] YE Y Q, HE S. 90 degrees polarization rotator using a bilayered chiral metamaterial with giant optical activity[J]. Applied Physics Letters, 2010, 96(20): 203501-1–203501-16.

[6] ZHOU J X, WANG Y K, LU M J, et al. Giant enhancement of tunable asymmetric transmission for circularly polarized waves in a double-layer graphene chiral metasurface[J]. RSC Advances, 2019, 9: 33775–33780.

[7] FEDOTOV V A, MLADYONOV P L, PROSVIRNIN S L, et al. Asymmetric propagation of electromagnetic waves through a planar chiral structure [J]. Physical Review Letters, 2006, 97(16): 167401-1–167401-4.

[8] FEDOTOV V A, SCHWANECKE A S, ZHELUDEV N I, et al. Asymmetric transmission of light and enantiomerically sensitive plasmon resonance in planar chiral nanostructures[J]. Nano Letters, 2007, 7(7): 1996–1999.

[9] BONACCORSO F, SUN Z, HASAN T, et al. Graphene photonics and optoelectronics[J]. Nature Photonics, 2010, 4(9): 611–622.

[10] HUANG Z, YAO K, SU G X, et al. Graphene-metal hybrid metamaterials for strong and tunable circular dichroism generation[J]. Optics Letters, 2018, 43(11): 2636–2639.

[11] KIM T T, OH S S, KIM H D, et al. Electrical access to critical coupling of circularly polarized waves in graphene chiral metamaterials[J]. Science Advances, 2017, 3(9): e1701377-1– e1701377-7.

[12] ZHOU S E, LAI P T, DONG G H, et al. Tunable chiroptical response of graphene achiral metamaterials in mid-infrared regime[J]. Optics Express, 2019, 27(11): 15359–15367.

[13] ZHOU J X, WANG Y K, SANG T, et al. Tunable circular dichroism in a graphene extrinsically chiral L-shaped metasurface[J]. Laser Physics Letters, 2020, 17(12): 126201-1–126201-5.

[14] PLUM E, LIU X X, FEDOTOV V A, et al. Metamaterials: optical activity without chirality[J]. Physics Review Letters, 2009, 102(11): 113902-1–113902-5.

[15] ZHANG Y Y, WANG L, ZHANG Z Y. Circular dichroism in planar achiral plasmonic L-shaped nanostructure arrays[J]. IEEE Photonics Journal, 2017, 9(2): 1–7.

[16] PLUM E, FEDOTOV V A, ZHELUDEV N I. Optical activity in extrinsically chiral metamaterial [J]. Applied Physics Letters, 2008, 93(19): 191911-1–191911-3.

[17] ANDRYIEUSKI A, LAVRINENKO A V. Graphene metamaterials based tunable terahertz absorber: effective surface conductivity approach[J]. Optics Express, 2013, 21(7): 9144–9155.

[18] GUGLIELMELLI A, NICOLETTA G, VALENTE L, et al. Numerical modeling of 3D chiral metasurfaces for sensing applications[J]. Crystals, 2022, 12(12): 1804–1815.

[19] SHOKATI E, ASGARI S, GRANPAYEH N. Dual-band polarization-sensitive graphene chiral metasurface and its application as a refractive index sensor[J]. IEEE Sensors Journal, 2019, 19(21): 9991–9996.

[20] LI J, ZHENG C, YUE Z, et al. Active controllable spin-selective terahertz asymmetric transmission based on all-silicon metasurfaces[J]. Applied Physics Letters, 2021, 118(22): 221110-1–221110-8.

[21] ZHOU J, WANG Y, TIAN S, et al. Tunable circular dichroism in a graphene extrinsically chiral L-shaped metasurface[J]. Laser Physics Letters, 2020, 17(12): 126201-1–126201-5.