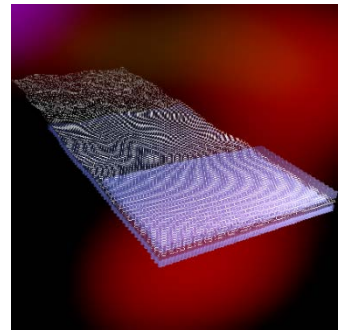


Center for Nanostruktureret Grafen - Highlights i 2017

Undertrykkelse af iboende ujævnhed i indkapslet grafen

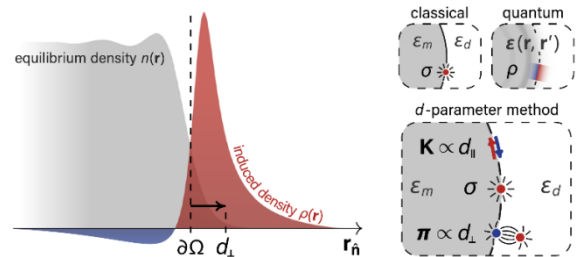
Når to-dimensionelle materialer som grafen er frithængende, er de aldrig fuldstændig flade. Overfladen krummer som bølger i en dam. Denne uundgåelige ujævnhed skyldes materialets termiske gittersvingninger, og fører til spredning af ladningsbærere, hvilket kan begrænse de elektriske egenskaber af komponenter lavet af grafen. Thomsen et al. påviser, at når grafen er indkapslet mellem to bornitrid lag, bliver ujævnheden markant formindsket. Dette er ganske intuitivt, dog viser CNG studiet også, at grafenen bliver fladere end man umiddelbart kunne forvente. Ved at bruge elektron-diffraktion i et transmissionselektronmikroskop, vises det, at grafen indkapslet i bornitrid har en ujævnhed på omkring 20 pm (1 picometer = 10^{-12} m), det laveste nogensinde målt, og meget tæt på hvad man har målt for tilsvarende lag inde i naturligt forekommende grafit. Simuleringer viser, at de termiske vibrationer bliver lokaliseret i bornitrid-lagene, hvilket fører til fladere grafen end hvis grafenen ikke var fuldt indkapslet. Dette betyder, at man kan samle forskellige to-dimensionelle materialer til såkaldte van der Waals heterostrukturer med tæt på perfekte grænseflader.



Thomsen, J. D., Gunst, T., Gregersen, S. S., Gammelgaard, L., Jessen, B. S., Mackenzie, D. M. A., Watanabe, K., Taniguchi, T., Bøggild, P. and Booth, T. J. (2017) Suppression of intrinsic roughness in encapsulated graphene, *Physical Review B* 96 (1), 014101, DOI: 10.1103/PhysRevB.96.014101 (Editor's recommendation)

Kvantekorrektioner i nanoplasmonik: Form, størrelse og materiale

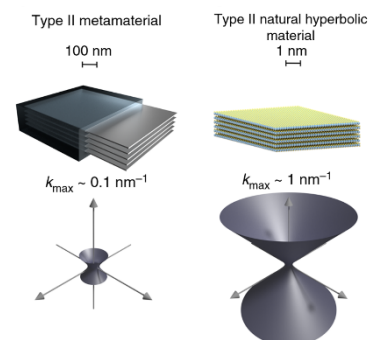
Siden 1980'erne har det været eksperimentelt veletableret, at plasmoniske effekter afviger signifikant fra klassiske forudsigelser når plasmonbølgelængden eller geometriske længdeskalaer reduceres under 5–10 nm. Eksperimentelt er det observeret, at ædelmetalnanopartiklers (f.eks. Ag) resonansfrekvens blåskifter relativt til den klassiske teori, når nanopartiklens størrelse reduceres, mens de simple metaller (f.eks. Na) rødskifter. Teorimæssigt er disse observationer hidtil forsøgt forklaret fra ét af to komplementære perspektiver: ab initio beregninger eller semiklassiske modeller. Ab initio beregninger, sædvanligvis TDDFT, har givet indblik særligt i simple metaller plasmonfrekvenser, men er af beregningsmæssige årsager begrænset til partikler bestående af få tusinde atomer. Semiklassiske modeller, særligt den hydrodynamiske model, er i eksperimentel overensstemmelse for ædelmetalpartikler og kan benyttes i makroskopiske geometrier – men giver det forkerte skift i simple metaller. I denne artikel har vi formuleret en mellemvej, der kombinerer ab initio beregningers præcision med den semiklassiske tilgængelige beregningsmæssige fordele og intuitive tiltrækning. Dette er opnået ved indførelsen af overflade-specifikke responsparametre, historisk kaldet Feibelman d parametre, og formulering af disses generelle fortolkning og anvendelse i geometrier af arbitrær form og materiale. Disse overflade-parametre komplementerer den konventionelle makroskopiske permittivitet i nanoskala geometrier, og giver anledning til kvanteskift og kvanteforbredning af plasmoniske resonanser.



Christensen, T., Yan, W., Jauho, A.-P., Soljačić, M. and Mortensen, N. A. (2017) Quantum corrections in nanoplasmonics: Shape, scale, and material, *Physical Review Letters* 118 (15), 157402, DOI: 10.1103/PhysRevLett.118.157402 (WoS highly-cited article)

Lagdelte van der Waals krystaller med hyperbolsk lysdispersion

Elektromagnetiske metamaterialer er kunstigt fremstillede strukturerede materialer med unikke optiske egenskaber. De hyperbolske metamaterialer (HMM) er isolerende i én retning ($\epsilon > 0$) og metalliske i to ortogonale retninger ($\epsilon < 0$). Dette medfører at isofrekvens overfladerne for lys i et HMM ikke har den sædvanlige elliptiske form, men derimod danner hyperbler. Den hyperbolske dispersion betyder i princippet at den fotoniske tilstandstæthed divergerer hvilket leder til høje Purcell faktorer og giver yderligere kontrol over den spontane emission af fotoner fra enkelt-foton kilder. I praksis, derimod, strækker de hyperbolske isofrekvensoverflader sig kun ud til bølgevektorer af størrelsesordenen $1/a$, hvor a er periodiciteten af strukturen. For et konventionelt HMM, hvor a er cirka 100nm, er denne periodicitet for stor til at give et tilstrækkeligt antal hyperbolske tilstande. Ved brug af atomar skala kvantemekaniske beregninger demonstrerer CNG forskere i denne artikel at klassen af lagdelte "transition metal dichalcogenides" (TMDs) naturligt har hyperbolske egenskaber. I disse materialer er a ca. 1nm (bestemt ved materialets gitterkonstant) hvilket, sammenlignet med konventionelle HMMer, giver anledning til langt flere hyperbolske tilstande og derfor også bedre fotoniske egenskaber. Forfatterne viser yderligere at de hyperbolske egenskaber også kan kontrolleres ved at kombinere TMDerne i van der Waals heterostrukturer hvilket kan lede til radikalt nye muligheder for at kontrollere og designe vekselvirkningen mellem lys og stof.



Gjerding, M. N., Petersen, R., Pedersen, T. G., Mortensen, N. A. and Thygesen, K. S. (2017) Layered van der Waals crystals with hyperbolic light dispersion, *Nature Communications* 8 (1), 320, DOI: 10.1038/s41467-017-00412-y