有限温度でのグラフェン内電子間相互作用による エネルギー分散補正の計算モデル構築

Development of a calculation model of energy dispersion correction by the electron-electron interaction in graphene at finite temperature

○ 小松 竜大 [1]、尾辻 泰一 [1]、Victor Ryzhii[1]、Dmitry Svintsov[2]、Vladimir Vyurkov[2]、佐藤 昭 [1]
(1. 東北大,　2. ロシア物理工科研究所)
○Tatsuhiro Komatsu[1], Taiichi Otsuji[1], Victor Ryzhii[1], Dmitry Svintsov[2], Vladimir Vyurkov[2], Akira Satou[1] (1. Tohoku Univ. 2. Ins. of Physics and Technology, Russia)
E-mail: komatsut@riec.tohoku.ac.jp

グラフェンは価電子帯と伝導帯がギャップレスな対称線形エネルギー分散を有しており、それに起因する特異性を利用したデバイス開発に関心が高まっている。グラフェンを光学励起するとバンド間の反転分布が形成され、テラヘルツ帯の誘導放出が可能である。我々は、これを利用したグラフェンテラヘルツレーザーの研究を行ってきた [1]。グラフェンからのフォトン放出を実現するためには非発光再結合過程、特に Auger 再結合過程を理解する必要がある。電子間相互作用によって一定の準粒子寿命が生じる計算モデル [2] では、Auger 再結合が非常に強く起こることが報告されている。しかし、準粒子寿命は本来電子間相互作用による線形分散の補正と同時に考慮されるべきであり、グラフェン内の Auger 再結合への完全な理解には至っていない。また、光学励起によって電子温度が数千 K まで上昇するため、有限温度でのエネルギー分散補正を考慮することが不可欠である。本研究では零温度での既存の計算モデル [3] を拡張し、有限温度でのグラフェン内電子間相互作用によるエネルギー分散補正の計算モデルを構築する。電子間相互作用によってグラフェンの線形分散は、自己エネルギーと呼ばれる複素量による補正を受ける。自己エネルギーの実部は線形分散のエネルギーからのずれを表し、虚部は準粒子寿命幅を与える。自己エネルギー虚部は次式

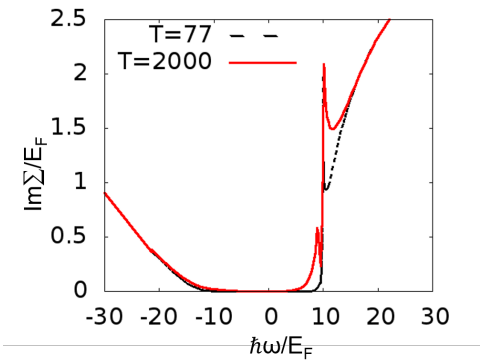

図 1: 2000K および 77K の自己エネルギー虚部。

$$\mathrm{Im}\Sigma_s^R(q,\omega) = \sum_{s'}\int \frac{d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^2}\frac{1+ss'\cos\theta_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}}}{2}V_{\kappa=1}(\boldsymbol{p})\mathrm{Im}\left[\frac{1}{\epsilon(\boldsymbol{p},\xi_{s',\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}}-\hbar\omega-i0)}\right] \times\left[n_B(\xi_{s',\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}}-\hbar\omega-i0)+n_F(\xi_{s',\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}})\right] \quad (1)$$

によって表現される [3]。ここで、s, s' はそれぞれ価電子帯 (-1)、伝導帯 (+1) を示す。ϵ は誘電関数で p, q はフォトン、電子の運動量、ξ は、元の線形分散のエネルギー状態である。有限温度の場合、式 (1) を精度よく数値積分するためには並列計算を要する。図 1 に 2000K および 77K における自己エネルギー虚部を示す。電子のエネルギー $\hbar\omega$ が E_F に近い値のときは両者に顕著な違いがみられる (図 1)。自己エネルギーの虚部に加えて実部の計算に関しては当日報告する。

謝辞本研究は，九州大学情報基盤研究開発センターの研究用計算機システムを用いて行われた。また JSPS 科研費若手研究（B）23760300、JSPS 科研費特別推進研究 23000008 の援助を受けた。

参考文献

[1] T. Otsuji, *et al.*, J. Sel. Top. Quantum Electron. **19**, 8400209 (2013).
[2] T. Winzer, *et al.*, Phys. Rev. B, **85**, 241404 (2012).
[3] S. D. Sarma, *et al.*, Phys. Rev.B, **87**, 045425 (2013).

© 2016年 応用物理学会