

二次元原子膜 h-BCN の光吸収特性における原子配置依存性

Atomic arrangement dependence in optical absorption characteristics of two dimensional atomic layer structure h-BCN

神戸大院工 ○岡本 一希, 土井 信行, 栗原 健汰, 小川 真人, 相馬 聡文

○Kazuki Okamoto, Nobuyuki Doi, Kenta Kurihara, Matsuto Ogawa, Satofumi Souma

Department of Electrical and Electronic Engineering Kobe University

IoT (Internet of Things) 社会の到来により、ビッグデータを高速に検知し、処理する技術、すなわち各種センシング素子の高性能化への需要が高まっている。例えば光デバイス (光センサ等) においては、アプリケーションごとに要求される種々の波長帯での光検出の高感度化が重要であるが、その需要に応えるためには、用途ごとに適切なマテリアルデザインが求められる。それに応える新材料の候補として、近年、グラフェン状物質である h-BCN が新材料として注目されている。h-BCN はグラフェンと h-BN を一つの結晶に混在させた物質で、六方晶系の二次元原子膜の構造となっており [1]、バンドギャップを持たないグラフェンと絶縁体の h-BN の中間的な特性 (比較的高い光吸収係数、バンドギャップの制御が可能等) を持つ。本研究では、h-BCN の光デバイスに用いる新材料としての可能性を比較検討する事を目的に、原子論的タイトバインディング法に基づく数値シミュレーションを行った。具体的には、h-BCN の二次元原子膜一層に対し光を照射した状況を想定し、光吸収係数等を計算する事による検討を行った。実際に h-BCN を実験的に作製した報告例も出されているが [2]、h-BCN は C 原子の割合や配置等で様々な構造が考えられるため、優れた特性を有する構造の発見も目的の一つである。図 1 は h-BCN の構造の一つである h-BC₂N の原子配置を表しており、図 2 は、この h-BC₂N、及びグラフェンにおける光吸収係数の光子エネルギー依存性を示したものである。この図から、h-BC₂N は 2.3 eV 付近に吸収端を持ち、この付近においてグラフェンと比較しても高い光吸収係数を持つことが分かる。更に、吸収係数の大きさが偏光方向に強く依存している事もわかる。これは、原子配置の非対称性に起因していると考えられる。講演では、これらの物理的解釈の詳細に加え、h-BC₂N 以外の様々な h-BCN の構造の場合についても報告する。更に、h-BCN の光センサとしての感度を定量的に評価するため、光誘起電気伝導度の比較検討についても報告する。

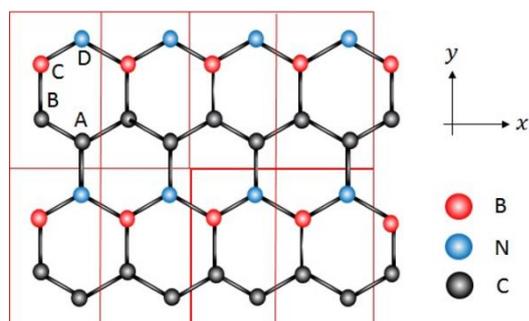


Fig. 1. Atomic arrangement of h-BC₂N structure. Red rectangle means a unit cell.

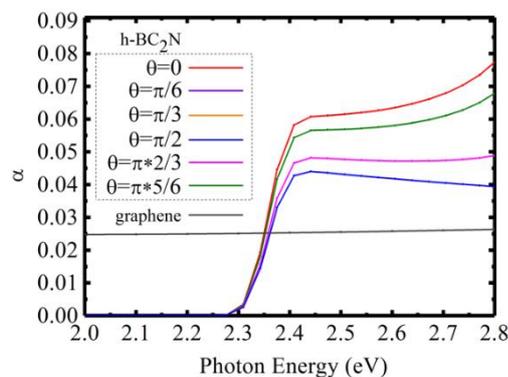


Fig. 2. Photon energy dependence of absorption coefficients for graphene and h-BC₂N. Results for different polarization angles are compared.

[1] G. Fiori et al., ACS NANO **6**, 2642 (2012).

[2] S. Beniwal et al., ACS NANO **6**, 8136 (2017).