

グラフェン誘電関数の第一原理計算

First Principles Study of Dielectric Function of Graphene

物材機構 [○]濱田 智之¹, 大野 隆央¹, 奈良 純¹

NIMS.¹, [○]Tomoyuki Hamada¹, Takahisa Ohno¹, Jun Nara¹

E-mail: HAMADA.Tomoyuki@nims.go.jp

【緒言】グラフェンは、その Dirac cone に由来する特異な赤外・テラヘルツ(THz)学特性を示すことが期待される。今回、我々は、グラフェンの電子状態を第一原理法により求め、遠赤外・テラヘルツ (THz) 域におけるグラフェン誘電関数ならびに吸光度スペクトルを理論的に算出したので報告する。

【計算方法】実測構造のグラフェンの電子バンド状態を GGA 擬ポテンシャル法により計算した。炭素原子の擬ポテンシャルには、ウルトラソフト型擬ポテンシャルを用いた。ユニットセルの c 軸長を長くとり (約 1.05nm)、単層グラフェンを模擬した。計算により得られたバンド構造よりリニア・テトラヘドロン(LT)で誘電関数の虚部(ϵ^2)を求め、 ϵ^2 をクラマース・クロニッヒ変換して誘電関数の実部(ϵ^1)を算出した。大規模 k 点セットでの LT 計算を可能とするため、バンド間遷移モーメント計算を LT 計算と同時に進行ダイレクト LT 法を考案し、計算プログラムを開発した。計算には第一原理計算プログラム PHASE/0 および誘電応答解析プログラム UVSOR を用いた[1]。誘電関数計算に用いた k 点セットは(1081x1081x1)、 k 点総数は約 117 万点である。

【計算結果】Fig.1 に計算により得られたグラフェンの ϵ^1 および ϵ^2 を示す。入射光エネルギー ω 下限値は約 17meV (約 4.2THz) である。THz 域における ϵ^2 は ω に反比例し、 $\omega=0$ に近づくにつれて無限大に発散する挙動を示す。同時に ϵ^1 も無限大に発散する挙動を示す、 ϵ^2 よりグラフェンの吸光度を計算したところ、 ω によらず約 0.02 程度で一定であることがわかった。この結果は、グラフェンが遠赤外・テラヘルツ波長域の広帯域センサー材料として有望であることを示している。

【謝辞】本研究は、防衛装備庁が実施する安全保障研究推進制度 JPJ004596 の支援を受けたものである。

【参考文献】 [1] PHASE/0/UVSOR (物質・材料研究機構、つくば、2020) : <https://azuma.nims.go.jp>

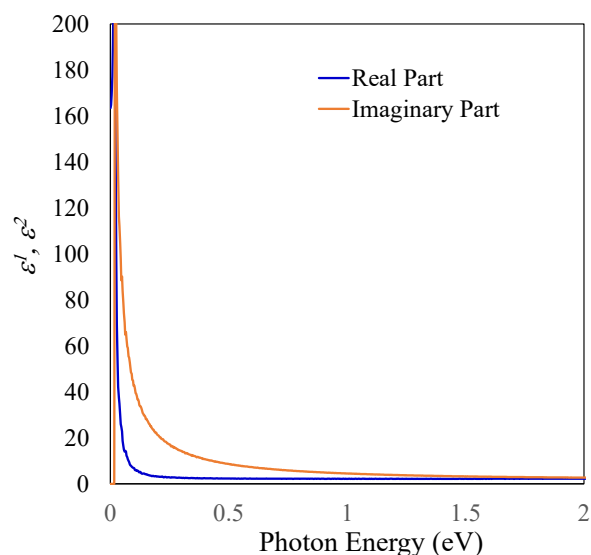


Fig. Dielectric function of graphene