

遠赤外・テラヘルツ域での3層グラフェン吸光度の第一原理計算

First principles study of absorbance of triple layer graphene in a far-infrared and tera-Hz frequency region

物材機構 °濱田 智之, 大野 隆央, 奈良 純

NIMS, °Tomoyuki Hamada, Takahisa Ohno, Jun Nara

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

はじめに: グラフェンはディラック・コーン(DC)を有し、遠赤外・テラヘルツ光をグラフェンに入射すると、コーンの光学励起に伴う光吸収を示す。しかし、単層グラフェンの吸光度は約 0.023 に過ぎない[1]。より高い効率でこれらの光を吸収するためには、グラフェンの積層が必要である。今回、我々は第一原理計算により 3 層グラフェンの遠赤外・テラヘルツ光に対する吸光度を計算し、吸光度の積層構造依存性を解明したので報告する。

計算方法: AAA、ABA、および ABC 積層構造の 3 層グラフェンの電子バンド構造を、ファンデルワールス力を考慮する GGA-D2 第一原理擬ポテンシャル法により求めた。バンド構造より誘電関数の虚部を求め、虚部より吸光度を計算した。光電場の方向はグラフェン層面に平行とした。計算には PHASE/UVSOR 第一原理誘電応答解析システム[2]を用いた。

計算結果: 計算により得られた各種 3 層積層グラフェンの吸光度スペクトルを Fig.1 に示す。Fig.1 には、比較のため、単層グラフェン吸光度を 3 倍した値も示す AAA 積層グラフェンは、3 つの DC を有するが、750meV 以下では、1 つの DC のみが励起され、その吸光度は単層グラフェンの吸光度(0.023)にほぼ等しくなる。400meV 付近に見られる吸光度の不規則な変動は、DC を構成するバンド波動関数の対称性の変化によるものである。ABA 積層グラフェンはパラボリックなバンド構造を有し、DC を持たないが、100meV 以下の吸光度は、単層グラフェン吸光度の 3 倍程度である。ABC 積層グラフェンの 100meV 以下の吸光度は、ABA 積層グラフェンの吸光度よりこれよりやや小さい。ABA 積層グラフェンは、DC を有するランダム積層グラフェンに匹敵する遠赤外・テラヘルツ光吸収材料であると言える。

謝辞: 本研究は、防衛装備庁が実施する安全保障技術研究推進制度 JP004596 の支援を受けたものである。

[1] 濱田、大野、奈良、第 81 回応用物理学会秋季学術講演会 発表番号 10a-Z28—8 (2020).

[2] PHASE/UVSOR (NIMS, Tsukuba, 2020) <https://azuma.nims.go.jp>.

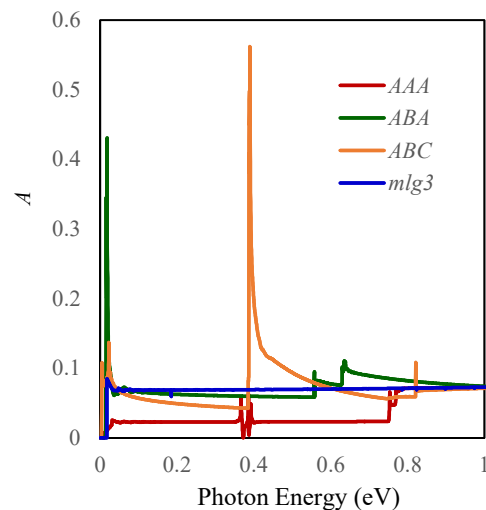


Fig. 1 Absorbances (A_s) of triple layer graphene with several stacking structures. Three times A of mono layer graphene ($mlg3$) is shown for comparison.