

单层与双层石墨烯的光学吸收性质研究*

陈英良 冯小波[†] 侯德东

(云南师范大学物理与电子信息学院, 昆明 650500)

(2013年5月5日收到; 2013年6月16日收到修改稿)

采用紧束缚模型分别描述单层、双层石墨烯的能带结构, 利用光子-电子相互作用的二阶微扰理论分别计算单光子和双光子吸收系数. 计算结果表明: 单层石墨烯单光子吸收系数为常数, 约为 $6.8 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$, 即单层石墨烯对入射光的吸收率约为 2.3%; 双层石墨烯的单光子吸收比单层石墨烯的单光子吸收强, 且随入射光波长呈分段性变化. 单层石墨烯的双光子吸收系数与波长 λ^4 成正比; 双层石墨烯双光子吸收系数在红外波段 ($\sim 3100 \text{ nm}$ 处) 有一个很强的共振吸收峰. 研究结果可为石墨烯材料在光电子器件的研究和制作方面提供指导.

关键词: 石墨烯, 光学吸收, 紧束缚模型

PACS: 73.22.Pr, 78.20.Ci, 73.20.At

DOI: 10.7498/aps.62.187301

1 引言

单层石墨烯是由单层碳原子紧密堆积成的二维蜂窝状结构材料, 以其高的电子迁移率、量子霍尔效应等奇特的物理、化学特性, 成为当今凝聚态物理研究中的热点之一^[1-9]. 双层石墨烯是由两层耦合的似蜂巢状结构的碳原子层组成, 由于层间的耦合作用, 能带结构出现了带隙, 使其在光电子领域有广泛的应用前景^[10-14].

目前对石墨烯在光学性质方面的研究已经有很多报道. Nair 小组^[15] 用石墨烯薄片遮住光学显微镜的孔径, 在白光的照射下, 采集透射光的图像, 并用高质量灰度等级相机分析透射光的相对强度, 得到单层石墨烯的透光率约为 97.7%. Bao 等^[16] 和 Xing 等^[17] 先后发现了石墨烯是一个很好的饱和吸收体, 可用来做超快脉冲激光器. Fan 等^[18] 开展了 800 nm 波长 50 fs 脉冲的 Z 扫描实验, 发现明显的反饱和和吸收现象. Hendry 小组^[19] 通过可见光到近红外光波段的四波混频实验, 得到单层石墨烯三阶非线性极化率在近红外区域为 $1.5 \times 10^{-7} \text{ esu}$. Zhang 等^[20] 用 Z 扫描实验测量了石墨烯的非线性折射率.

上述对石墨烯光学性质的研究主要集中于实验方面, 理论方面则多见于石墨烯材料电子结构方面的研究^[21,22]. 相对而言, 有关石墨烯材料光学吸收方面的理论研究则比较少见, 实验研究也较缺乏理论验证. 因此本文采用紧束缚模型和二阶微扰理论分别计算单、双层石墨烯的单、双光子吸收系数, 得到相应的吸收谱, 讨论入射光波长对吸收的影响, 对比不同层数石墨烯的光吸收强弱以及分析其中存在差异的原因, 从而为石墨烯在光子学和光电子学的应用提供理论指导^[23-25].

2 理论计算

在电子-光子相互作用的微扰理论下, 入射光子频率为 ω 的单光子跃迁速率为^[26]

$$W_1 = \frac{2\pi}{\hbar} \int |\langle \varphi_f(\mathbf{k}) | H_{\text{int}} | \varphi_i(\mathbf{k}) \rangle|^2 \times \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \frac{d\mathbf{k}^3}{(2\pi)^3}, \quad (1)$$

其中, $\varphi_i(\varphi_f)$ 分别是电子跃迁初(末)态波函数, $E_i(E_f)$ 为相应的能量, H_{int} 为电子-光子相互作用哈密顿量. 相应地, 在二阶微扰理论下, 入射光子

* 国家自然科学基金(批准号: 11064017)和云南省应用基础研究面上项目(批准号: 2010ZC078, 2010CD047)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: fengxiaobo1220@gmail.com

频率为 ω 的双光子跃迁速率为^[26]

$$W_2 = \frac{2\pi}{\hbar} \int \left| \sum_m \frac{\langle \varphi_f(\mathbf{k}) | H_{\text{int}} | \varphi_m(\mathbf{k}') \rangle \langle \varphi_m(\mathbf{k}') | H_{\text{int}} | \varphi_i(\mathbf{k}) \rangle}{E_m - E_i - \hbar\omega} \right|^2 \times \delta(E_f - E_i - 2\hbar\omega) \frac{d\mathbf{k}^3}{(2\pi)^3}. \quad (2)$$

所谓双光子吸收, 是电子吸收两个光子从初态经过一个中间态跃迁到末态的过程. 上式中, φ_m 是电子跃迁中间态波函数, E_m 为相应的能量. 双层石墨烯材料中的电子-光子相互作用哈密顿量 H_{int} 与单层材料中有所不同. 对于一维受限的石墨烯材料, 单光子吸收系数和双光子吸收系数与跃迁速率的关系如下^[26]:

$$\alpha = 2\hbar\omega N W_1 / I, \quad (3)$$

$$\beta = 4\hbar\omega N W_2 / I^2, \quad (4)$$

其中, N 为石墨烯材料的层密度 $N = 1/d$, 即材料厚度的倒数; I 为入射光强, $I = \varepsilon^{1/2} \omega^2 A^2 (2\pi c)^{-1}$, ε 为相对介电常数, $\mathbf{A} = \mathbf{A}e$ 为光场矢量. 由上述可知, 计算石墨烯材料单光子吸收系数和双光子吸收系数的关键是石墨烯材料的能带结构. 下面我们通过紧束缚的方法分别求得单层和双层石墨烯材料的能带结构, 进而求得相应的吸收系数.

2.1 单层石墨烯的光学吸收系数

单层石墨烯是由碳原子组成的六角结构构成, 如图 1(a) 所示. 在只考虑最近邻以及次近邻碳原子间相互作用的情况下, 用紧束缚的方法可以得到在狄拉克点 (即布里渊区 K 和 K' 点如图 1(a) 所示) 附近呈现线性能带结构, 即 $E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{k}|$, $v_F \approx 10^6$ m/s 为费米速度^[27]. 其能带结构分为 E_+ 和 E_- 两个能带, 在狄拉克点处两能带相交, 如图 1(b) 所示. 单层石墨烯中电子在狄拉克点附近有效质量为 0, 电子运动不再遵从薛定谔方程, 而是如下的二维狄拉克方程^[27]:

$$-i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}), \quad (5)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ 为泡利矩阵. 由狄拉克方程可得动量空间狄拉克点附近的波函数^[27]:

$$\varphi_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\mathbf{k}}/2} \\ \pm e^{i\theta_{\mathbf{k}}/2} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

“ \pm ”号分别对应两个能带 E_+ 和 E_- , $\theta_{\mathbf{k}} = \arg(k_x + ik_y)$. 单层石墨烯中的电子是狄拉克费米子, 其与光子相互作用哈密顿量为

$$H_{\text{int}} = -v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{e}{c} \mathbf{A} = -\frac{ev_F A}{c} \begin{pmatrix} 0 & e_x - ie_y \\ e_x + ie_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

对于单层石墨烯, 只存在从 E_- 能级到 E_+ 能级一种跃迁, 其跃迁矩阵元

$$\langle \varphi_f(\mathbf{k}) | H_{\text{int}} | \varphi_i(\mathbf{k}) \rangle = -i \frac{ev_F A}{c} (e_x \sin \theta_{\mathbf{k}} + e_y \cos \theta_{\mathbf{k}}). \quad (8)$$

由 (1) 和 (3) 式可计算出单层石墨烯的单光子吸收系数

$$\alpha_{\text{SLG}} = \pi e^2 / \hbar c \varepsilon^{1/2} d. \quad (9)$$

由此可见, 单层石墨烯单光子吸收系数为常数. 真空中, 入射光穿过石墨烯材料后, 其出射光强与入射光强之比 $I/I_0 = \exp(-\alpha d) = \exp[-\pi e^2 / (4\pi \varepsilon_0 \hbar c)] \approx 97.7\%$, 即入射光强被吸收了约 2.3%. 该计算结果与之前报道的实验结果完全符合, 也与 Nair 等^[15] 采用费米黄金定则理论计算结果完全一致, 证实了本文理论的正确性, 也为后面的计算提供了理论依据.

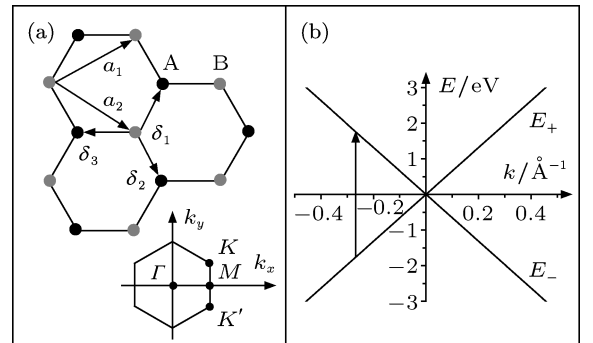


图 1 (a) 单层石墨烯的晶格结构和布里渊区; (b) 单层石墨烯的能带结构

同理, 由 (2) 式和 (4) 式可以计算单层石墨烯双光子吸收系数. 双光子吸收跃迁过程中的中间态既可以是 φ_+ 态也可以是 φ_- 态,

$$\beta_{\text{SLG}} = \frac{32\pi^2 e^4 v_F^2}{\varepsilon \omega^4 \hbar^3 c^2 d}, \quad (10)$$

可见单层石墨烯双光子吸收系数与入射光子频率 ω^4 成反比.

2.2 双层石墨烯的光学吸收系数

双层石墨烯由两层单层石墨烯堆积而成, 每层中的不全同碳原子 A, B 分别记为 A1, B1, A2, B2; 两层碳原子的堆积方式有两种, 本文仅考虑 A2-B1 堆积 (即 A2 碳原子位于 B1 碳原子的正上方, 而 B2 碳原子却不在 A1 的正上方), 结构如图 2(a) 所示^[27,28]. 紧束缚哈密顿量为^[27]

$$\begin{aligned}
 H = & -\gamma_0 \sum_{\substack{(i,j) \\ m,\sigma}} (a_{m,i,\sigma}^+ b_{m,j,\sigma} + \text{H.c.}) \\
 & -\gamma_1 \sum_{j,\sigma} (a_{1,j,\sigma}^+ + a_{2,j,\sigma} + \text{H.c.}) \\
 & -\gamma_4 \sum_{j,\sigma} (a_{1,j,\sigma}^+ b_{2,j,\sigma} + a_{2,j,\sigma}^+ b_{1,j,\sigma} + \text{H.c.}) \\
 & -\gamma_3 \sum_{j,\sigma} (b_{1,j,\sigma}^+ b_{2,j,\sigma} + \text{H.c.}), \quad (11)
 \end{aligned}$$

其中, $a_{m,i,\sigma}$ ($b_{m,i,\sigma}$) 表示第 $m = 1, 2$ 层位矢为 \mathbf{R}_i 自旋为 σ 的电子湮灭算符; γ_0 为层内最近邻碳原子间相互作用能, γ_1 为 A1 和 A2 间相互作用能, γ_4 为 A1(A2) 和 B2(B1) 间相互作用能, γ_3 为 B1 和 B2 间相互作用能. 取系统波函数 $\varphi = (\varphi_{B1}, \varphi_{A1}, \varphi_{A2}, \varphi_{B2})$, 将上述哈密顿量在布里渊区 K 点附近展开,

$$H = \sum_K \varphi_K^+ \cdot H_K \cdot \varphi_K. \quad (12)$$

在不考虑两层碳原子本身的化学势, 且忽略 γ_3, γ_4 (≈ 0.04 eV) 的情况下^[27]

$$H_K = \begin{pmatrix} 0 & v_F \hbar \mathbf{k} & 0 & 0 \\ v_F \hbar \mathbf{k}^* & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 & v_F \hbar \mathbf{k} \\ 0 & 0 & v_F \hbar \mathbf{k}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (13)$$

考虑到 $v_F \hbar \mathbf{k} \ll \gamma_1$, 通过求解薛定谔方程可以得到四条抛物线形能带 $E_{\pm 1} = \pm v_F^2 \hbar^2 k^2 / \gamma_1$, $E_{\pm 2} = \pm \gamma_1 \pm v_F^2 \hbar^2 k^2 / \gamma_1$, 其近似能带结构如图 2(b) 所示. 在相同的近似条件下, 波函数

$$\begin{aligned}
 \varphi_{\pm 1}(\mathbf{k}) & \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \\ \pm e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \\
 \varphi_{\pm 2}(\mathbf{k}) & \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \\ \pm e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (14)
 \end{aligned}$$

与单层石墨烯不同的是, 双层石墨烯中电子有效质量在 K 点附近不为 0, 而是 $m = \gamma_1 / 2v_F^2 \approx 0.054m_e$, 故其电子光子相互作用哈密顿量 $H =$

$e\hbar \mathbf{A} \cdot \mathbf{k} / (mc)$, 此时, 对于单光子吸收和双光子吸收都存在四种跃迁可能: $E_{-1} \rightarrow E_{+1}$, $E_{-1} \rightarrow E_{+2}$, $E_{-2} \rightarrow E_{+1}$, $E_{-2} \rightarrow E_{+2}$. 考虑到四种跃迁可能, 由 (1) 式和 (3) 式计算单光子吸收系数可得:

$$\begin{aligned}
 \alpha_{\text{BLG}} = & \frac{2e^2 \pi^2}{\varepsilon^{1/2} \hbar^2 \omega c d} [\hbar\omega + (\hbar\omega - \gamma_1) + (\hbar\omega - \gamma_1) \\
 & + (\hbar\omega - 2\gamma_1)], \quad (15)
 \end{aligned}$$

上式中括号内的四项分别代表上述四种跃迁. 若入射光子能量 $\hbar\omega < \gamma_1$, 此时只能发生跃迁 $E_{-1} \rightarrow E_{+1}$, 单光子吸收系数为常数, 与入射光子频率无关; 若入射光子能量 $\gamma_1 < \hbar\omega < 2\gamma_1$, 跃迁 $E_{-1} \rightarrow E_{+1}$, $E_{-1} \rightarrow E_{+2}$, $E_{-2} \rightarrow E_{+1}$ 都能发生; 若入射光子能量 $\hbar\omega > 2\gamma_1$, 则四种跃迁都能发生.

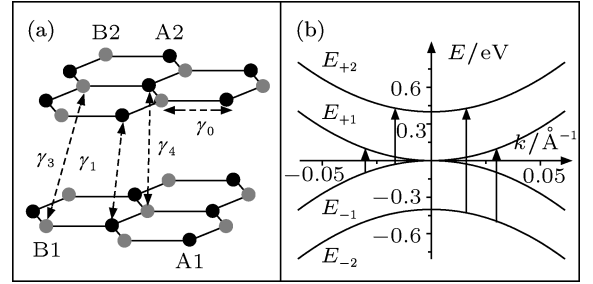


图 2 (a) 双层石墨烯的晶格结构; (b) 双层石墨烯的能带结构 ($\gamma_3 \approx 0, \gamma_4 \approx 0$)

双光子吸收中, 四个能带既可以作为初末态, 也可以作为中间态. 同单光子吸收一样, 也存在上述四种跃迁方式. 由 (2) 式和 (4) 式计算可得双光子吸收系数:

$$\begin{aligned}
 \beta_{\text{BLG}} = & \frac{64\pi^2 v_F^2 e^4}{\varepsilon \omega^3 c^2 \gamma_1 \hbar^2 d} \left[\hbar^2 \omega^2 \left(\frac{1}{\hbar\omega} + \frac{1}{\hbar\omega + \gamma_1} \right)^2 \right. \\
 & + \frac{1}{16} (2\hbar\omega - \gamma_1)^2 \left(\frac{2}{\hbar\omega} + \frac{1}{\hbar\omega - \gamma_1} + \frac{1}{\hbar\omega + \gamma_1} \right)^2 \\
 & + \frac{1}{16} (2\hbar\omega - \gamma_1)^2 \left(\frac{2}{\hbar\omega} + \frac{1}{\hbar\omega - \gamma_1} + \frac{1}{\hbar\omega + \gamma_1} \right)^2 \\
 & \left. + (\hbar\omega - \gamma_1)^2 \left(\frac{1}{\hbar\omega} + \frac{1}{\hbar\omega - \gamma_1} \right)^2 \right], \quad (16)
 \end{aligned}$$

同样地, 上式中括号内的四项也分别代表上述四种跃迁. 若入射光子能量 $\hbar\omega < \gamma_1/2$, 此时只能发生跃迁 $E_{-1} \rightarrow E_{+1}$; 若入射光子能量 $\gamma_1/2 < \hbar\omega < \gamma_1$, 跃迁 $E_{-1} \rightarrow E_{+1}$, $E_{-1} \rightarrow E_{+2}$, $E_{-2} \rightarrow E_{+1}$ 都能发生; 若入射光子能量 $\hbar\omega > \gamma_1$, 则四种跃迁都能发生. (16) 式表明双层石墨烯中的双光子吸收存在以下特点: 1) 当入射光子能量 $\hbar\omega = \gamma_1$ 时, 跃迁发生共

振,会出现吸收峰值;2)在 $\hbar\omega \gg \gamma_1$ 或者 $\hbar\omega \ll \gamma_1/2$ 的非共振区,双光子吸收系数近似与 ω^{-3} 成正比,而单层石墨烯中双光子吸收却在整个光频范围与 ω^{-4} 成正比;3)为避免(16)式计算中出现的奇点 $\hbar\omega = \gamma_1$,我们考虑电子的弛豫,即谱线展宽因子 Γ ,它与电子弛豫时间成反比,则(2)式中分母变为 $E_m - E_i - \hbar\omega - i\Gamma$,此时双光子吸收系数改写为

$$\beta_{\text{BLG}} = \frac{64\pi^2 v_F^2 e^4}{\varepsilon \omega^3 c^2 \gamma_1 \hbar^2 d} \cdot \left[\frac{1}{4} \hbar^2 \omega^2 \left| \frac{1}{\hbar\omega - i\Gamma} + \frac{1}{\hbar\omega + i\Gamma} \right|^2 + \frac{1}{\hbar\omega + \gamma_1 - i\Gamma} + \frac{1}{\hbar\omega + \gamma_1 + i\Gamma} \right]^2 + \frac{1}{16} (2\hbar\omega - \gamma_1)^2 \left| \frac{1}{\hbar\omega - i\Gamma} + \frac{1}{\hbar\omega + i\Gamma} \right|^2 + \frac{1}{\hbar\omega - \gamma_1 - i\Gamma} + \frac{1}{\hbar\omega - \gamma_1 + i\Gamma} \right]^2 + \frac{1}{16} (2\hbar\omega - \gamma_1)^2 \left| \frac{1}{\hbar\omega - i\Gamma} + \frac{1}{\hbar\omega + i\Gamma} \right|^2 + \frac{1}{\hbar\omega + \gamma_1 - i\Gamma} + \frac{1}{\hbar\omega - \gamma_1 + i\Gamma} \right]^2 + \frac{1}{4} (\hbar\omega - \gamma_1)^2 \left| \frac{1}{\hbar\omega - i\Gamma} + \frac{1}{\hbar\omega + i\Gamma} \right|^2 + \frac{1}{\hbar\omega - \gamma_1 - i\Gamma} + \frac{1}{\hbar\omega - \gamma_1 + i\Gamma} \right]^2 \right]. \quad (17)$$

3 结果分析

本文计算采用的参数如下^[27,29]: $\varepsilon = 1$, $v_F = 10^6$ m/s, $\gamma_1 = 0.4$ eV, 单层石墨烯厚度 $d = 0.335$ nm, 双层石墨烯厚度 $d = 2 \times 0.335$ nm.

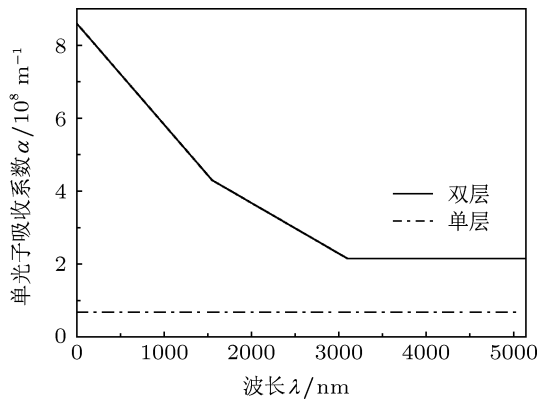


图3 单层石墨烯和双层石墨烯的单光子吸收谱

图3中展示了单层石墨烯和双层石墨烯的单光子吸收谱.可见,单层石墨烯的单光子吸收系数与入射波长无关,为常数,大约为 6.8×10^7 m^{-1} ,可

计算 $I/I_0 = \exp(-\alpha d) \approx 97.7\%$,即入射光穿过单层石墨烯后,约有2.3%的光强被吸收.双层石墨烯的单光子吸收系数随波长呈现出分段性变化,且比单层石墨烯的单光子吸收系数强,这同McCann的研究结果基本一致^[30].当入射光子能量 $\hbar\omega < \gamma_1$ (即波长 $\lambda > 3100$ nm)时,由于只发生跃迁 $E_{-1} \rightarrow E_{+1}$,单光子吸收系数 $\alpha = 2e^2\pi^2/(\varepsilon^{1/2}\hbar cd)$ 为常数,约为 2.1×10^8 m^{-1} ,与入射波长无关;当入射光子能量 $\gamma_1 < \hbar\omega < 2\gamma_1$ (即波长 1550 nm $< \lambda < 3100$ nm)时,发生三种跃迁 $E_{-1} \rightarrow E_{+1}$, $E_{-1} \rightarrow E_{+2}$, $E_{-2} \rightarrow E_{+1}$,此时, $\alpha = 2e^2\pi^2(3\hbar\omega - 4\gamma_1)/(\varepsilon^{1/2}\hbar^2\omega cd)$,吸收系数随波长的增加而降低;若入射光子能量 $\hbar\omega > 2\gamma_1$ (即波长 $\lambda < 1550$ nm)时,四种跃迁全部发生, $\alpha = 8e^2\pi^2(\hbar\omega - \gamma_1)/(\varepsilon^{1/2}\hbar^2\omega cd)$,吸收系数也随波长的增加而降低,且降低得更快.

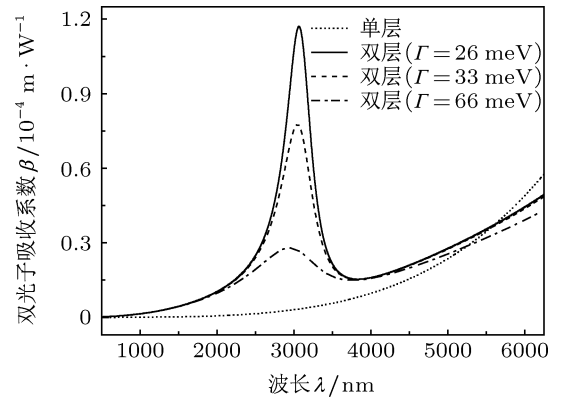


图4 单层石墨烯和双层石墨烯的双光子吸收谱

图4描述了单层石墨烯和双层石墨烯的双光子吸收谱.对于单层石墨烯,其双光子吸收系数与 λ^4 成正比,波长越长,双光子吸收系数越大,在可见光波段,双光子吸收系数的量级大约为 10^{-9} m/W .双层石墨烯的双光子吸收谱与单层石墨烯有很大不同,在红外波段(~ 3100 nm处),出现一个很强的共振吸收峰,其吸收系数达到 10^{-4} m/W 量级,比单层石墨烯高出了两个量级.当波长远大于 3100 nm时,双光子吸收系数近似与 λ^3 成正比,如果波长足够长(> 5000 nm),单层石墨烯的双光子吸收将会强于双层石墨烯.图4中还分别给出了双层石墨烯不同展宽因子 Γ (Γ 取 $26, 33, 66$ meV,对应的弛豫时间分别为 $25, 20, 10$ fs)所对应的吸收谱,发现在可见光和近红外波段,展宽因子不会影响其双光子吸收.

4 结 论

本文采用紧束缚模型方法分别描述单层、双层石墨烯的能带结构,利用光子-电子相互作用的微扰理论分别计算单光子和双光子吸收系数.研究发现:单层石墨烯单光子吸收系数是与入射光波长无关的常数,约为 $6.8 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$,即单层石墨烯对入射光的吸收率约为 2.3%;双层石墨烯的单光子吸收比单层石墨烯的单光子吸收强,且随入射光波

长呈分段性变化,当波长大于 3100 nm,吸收系数为常数,约为 $2.1 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$,比单层的高 1 个数量级.单层石墨烯的双光子吸收系数与波长 λ^4 成正比,在可见光波段,量级为 10^{-9} m/W ;双层石墨烯双光子吸收系数在红外波段 ($\sim 3100 \text{ nm}$ 处) 有一个很强的共振吸收峰,量级为 10^{-4} m/W ,比单层的高两个数量级.本文计算可为石墨烯材料光电子器件的研究和制作提供理论指导.

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [3] Zhang Q H, Han J H, Feng G Y, Xu Q X, Ding L Z, Lu X X 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 214209 (in Chinese) [张秋慧, 韩敬华, 冯国英, 徐其兴, 丁立中, 卢晓翔 2012 物理学报 **61** 214209]
- [4] Hu H X, Zhang Z H, Liu X H, Qiu M, Ding K H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7156 (in Chinese) [胡海鑫, 张振华, 刘新海, 邱明, 丁开和 2009 物理学报 **58** 7156]
- [5] Schedin F, Geim A K, Morozov S V, Hill E W, Blake P, Katsnelson M I, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 652
- [6] Xu X G, Zhang C, Xu G J, Cao J C 2011 *Chin. Phys. B* **20** 027201
- [7] Zhao J, Zhang G Y, Shi D X 2013 *Chin. Phys. B* **22** 057701
- [8] Ouyang F P, Xu H, Wei C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1073 (in Chinese) [欧阳方平, 徐慧, 魏辰 2008 物理学报 **57** 1073]
- [9] Toyoda T, Zhang C 2012 *Phys. Lett. A* **376** 616
- [10] Min H, Sahu B, Banerjee S K, Mac-Donald A H 2007 *Phys. Rev. B* **75** 155115
- [11] Mak K F, Lui C H, Shan J, Heinz T F 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 256405
- [12] Mucha-Kruczyński M, McCann E, Fal'ko V I 2010 *Semicond. Sci. Technol.* **25** 033001
- [13] Rao C N R, Sood A K, Subrahmanyam K S, Govindaraj A 2009 *Angewandte Chemie International Edition* **48** 7752
- [14] Sarma S D, Shaffique A, Hwang E H, Enrico R 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 407
- [15] Nair R R, Blake P, Grigorenko A N, Novoselov K S, Booth T J, Stauber T, Peres N M R, Geim A K 2008 *Science* **320** 1308
- [16] Bao Q L, Zhang H, Wang Y, Ni Z H, Yan Y L, Shen Z X, Loh K P, Tang D Y 2009 *Adv. Funct. Mater.* **19** 3077
- [17] Xing G C, Guo H C, Zhang X H, Sum T C, Alfred Huan C H 2010 *Opt. Express* **18** 4564
- [18] Fan Y, Jiang Z G, Yao L F 2012 *Chin. Opt. Lett.* **10** 071901
- [19] Hendry E, Hale P J, Moger J, Savchenko A K 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 097401
- [20] Zhang H, Virally S, Bao Q L, Ping L K, Massar S, Godbout N, Kockaert P 2012 *Opt. Lett.* **37** 1856
- [21] Guinea F, Castro Neto A H, Peres N M R 2007 *Solid State Commun.* **143** 116
- [22] Nilsson J, Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R 2008 *Phys. Rev. B* **78** 045405
- [23] Yin W H, Han Q, Yang X H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 248502 (in Chinese) [尹伟红, 韩勤, 杨晓红 2012 物理学报 **61** 248502]
- [24] Yang Z, Gao R G, Hu N, Chai J, Cheng Y W, Zhang L Y, Wei H, Kong E S W, Zhang Y F 2012 *Nano-Micro Lett.* **4** 1
- [25] Bonaccorso F, Sun Z, Hasan T, Ferrari A C 2010 *Nature Photon.* **4** 611
- [26] Nathan V, Guenther A H, Mitra S S 1985 *J. Opt. Soc. Am. B* **2** 294
- [27] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [28] Koshino M 2013 *New J. Phys.* **15** 015010
- [29] McCann E 2006 *Phys. Rev. B* **74** 161403
- [30] McCann E, Abergel D S L, Fal'ko V I 2007 *Solid State Commun.* **143** 110

Optical absorptions in monolayer and bilayer graphene*

Chen Ying-Liang Feng Xiao-Bo[†] Hou De-Dong

(School of Physics and Electronic Information Technology, Yunnan Normal University, Kunming 650500, China)

(Received 5 May 2013; revised manuscript received 16 June 2013)

Abstract

We theoretically simulate one-photon and two-photon absorption spectra for monolayer and bilayer graphene employing the second-order perturbation theory of the electron-photon interaction. The tight-binding model is used to describe the band structure of graphene. The results show that one-photon absorption coefficient of monolayer graphene is a constant about $6.8 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$, demonstrating that the absorptivity of incident light in monolayer graphene approximates to 2.3%. The one-photon absorption coefficient of bilayer graphene changes sectionally with the wavelength and is greater than that of monolayer graphene. The two-photon absorption coefficient of monolayer graphene is proportional to λ^4 . The two-photon absorption coefficient of bilayer graphene exhibits a giant resonance absorption peak in the infrared ($\sim 3100 \text{ nm}$) region. Our results will provide theoretical guidance for the application of graphene in the research field of optoelectronic devices.

Keywords: graphene, optical absorption, tight-binding model

PACS: 73.22.Pr, 78.20.Ci, 73.20.At

DOI: 10.7498/aps.62.187301

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11064017) and the Applied Basic Research General Programs of Yunnan Province, China (Grant Nos. 2010ZC078, 2010CD047).

[†] Corresponding author. E-mail: fengxiaobo1220@gmail.com