

リン薄膜におけるバンドギャップの層数依存性の機構解明

Clarification of the relation between the band-gap and the number of layer in the few-layer phosphorene

○杉原 裕規¹、押山 淳¹ (1. 東大院工)

°YUKI SUGIHARA¹, ATSUSHI OSHIYAMA¹ (1.Univ. of Tokyo)

E-mail: sugihara@comas.t.u-tokyo.ac.jp

本研究では層状半導体物質として近年注目を集めている単層および数層の黒リン薄膜について、バンドギャップと層数との関係を第一原理電子状態計算により明らかにした。単層黒リン薄膜は高い易動度を持つ一方で、グラフェンとは異なり 1.5 eV 程度のバンドギャップを有しており、デバイスへの応用が期待されている。また複数層ではバンドギャップは小さくなり、バルクにおいては 0.3 eV 程度となることが知られているが[1]、その機構については未だ明らかになっていない。本研究では、密度汎関数理論および Green 関数摂動展開理論(GW 近似)を用いて電子状態計算を行い、複数層でのバンドギャップの減少が単層の場合には現れなかった層間の相互作用による価電子帯上端のバンドの分裂によるものであることを明らかにした(Fig.1)。

またリン薄膜には 4 つの同素体 α (黒リン)、 β (青リン)、 γ 、 δ -リンが存在することが理論的に予測されており、いずれも層数に反比例してバンドギャップが小さくなると予想されている[2]。これら同素体についても同様の計算を行い、バンドギャップが減少する機構が黒リンの場合と同様に層間の相互作用によるものであることを明らかにした。特に 2 層以上において金属になると予想されていた γ -リン薄膜についても、バンドギャップの消滅は同様の層間相互作用機構によるものであることが分かった。加えて GW 近似を用いた計算によりバンドギャップの値を正確に計算した結果、 γ -リン薄膜は 2 層では半導体となることが明らかになった。

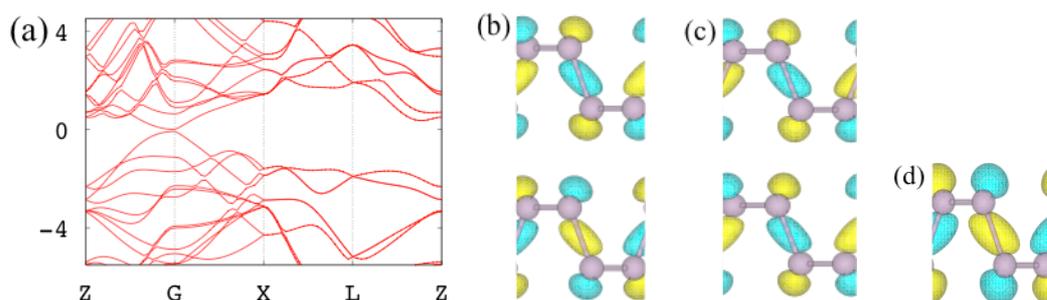


Fig.1 (a) The band structure of the bulk black phosphorus. The Fermi level is set to zero. The isosurface of the Kohn-Sham orbitals at the highest (b) and the second highest (c) states of the valence-band of the bulk black phosphorus. (d) The state of the valence-band top of the mono-layer phosphorene. The inter-layer interaction splits the state (d) into the bonding (c) and the anti-bonding (b) states.

[1] Han Liu, Adam T. Neal, Zhen Zhu, Zhe Luo, Xianfan Xu, David Tomanek, and Peide D. Ye, ACS Nano **8**, 4033 (2014)

[2] Jie Guan, Zhen Zhu, and David Tomanek, PRL **113**, 046804 (2014)