

単層・2層 GeSe および GeSe/MoS₂ ヘテロ構造の第一原理計算

Geometric and Electronic Properties of thin-layer GeSe and GeSe/MoS₂

Heterostructures

○大淵 真理¹ (1. 富士通研)

°Mari Ohfuchi¹ (1.Fujitsu Labs.)

E-mail: mari.ohfuti@jp.fujitsu.com

グラフェンの発見以来、新たな2次元材料の探求が盛んになっている。より新しい材料として、GeSeのようなIV属モノカルコゲナイドが注目されつつあるが、まだ単層 GeSe についての限られた第一原理計算が報告されるにとどまっている [1]。今、GeSe の特性の層数依存性や、よく知られている MoS₂ との積層構造の特性を第一原理計算により明らかにしておくことは、非常に重要であると考えられる。今回我々は、単層・2層 GeSe および GeSe/MoS₂ ヘテロ構造の原子構造、電子状態を密度汎関数プログラム OpenMX [2] を利用して調べた。

GeSe の格子定数は、バルクから層数が減るにつれ大きく変わることがわかった。それに伴い、単位格子内の原子配置も大きく変化する。Fig. 1(c) に示すように、バルクでは Ge 原子が層の外側に位置するが、単層 GeSe では、Fig. 1(a) に示すように Se 原子が層の外側に位置することがわかった。電子状態については、バルクでは Γ 点にある伝導帯の底の状態のエネルギーが上がり、2層 GeSe (Fig.1 (b))でも単層 GeSe と同じように直接バンドギャップと間接バンドギャップがほぼ等しくなることがわかった。これは、MoS₂ などでも知られるように、 Γ 点の層をまたがって広がる状態のエネルギーが量子閉じ込め効果によって変化したものと考えられる。

GeSe/MoS₂ ヘテロ構造についても調べた (Fig.2)。GeSe(4×4)と MoS₂(3×5)の格子が1%以内で整合することがわかった。この格子を用いて原子配置を安定化したところ、GeSe 層の原子配置は2層のものにある程度近づくが、なお Se 原子が外側にあり、Se 原子と MoS₂ 層の S 原子との距離は 0.36nm で、2層の GeSe や MoS₂ の値と比較するとわずかに長いことがわかった。伝導帯 (E_C) および価電子帯 (E_V) のバンド不連続値は 0.71eV と 1.46eV と得られ、単層 MoS₂ のバンドギャップの実験値を考慮すると、GeSe のバンドギャップは 1.14eV と予測される。

[1] Y. Hu et al., Appl. Phys. Lett. 107, 122107 (2015).

[2] <http://www.openmx-square.org/>.

[3] K. F. Mak et al., Phys. Rev. Lett. 105, 136805 (2010).

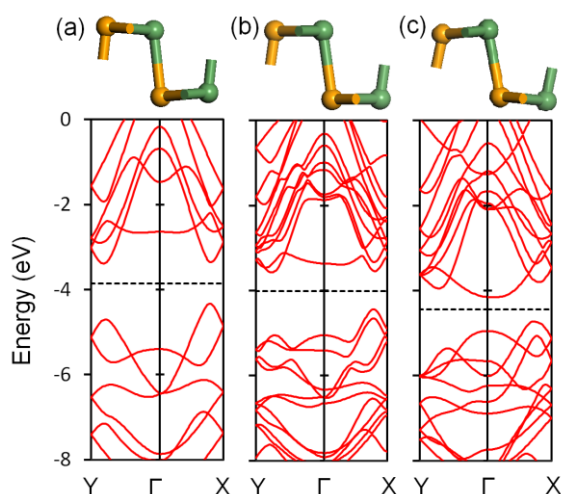


Fig.1: Side views of atomic geometry and band structures of (a) monolayer, (b) bilayer, and (c) bulk GeSe. The dark and light gray spheres represent Ge and Se atoms respectively.

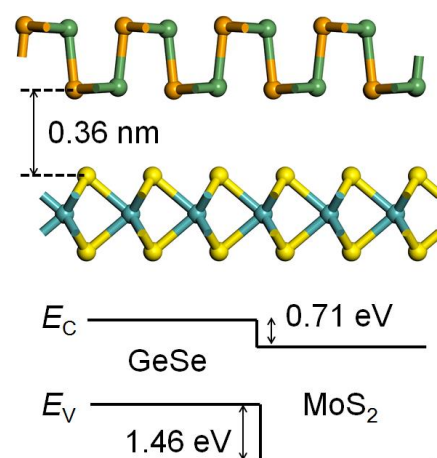


Fig.2: Side view of GeSe/MoS₂ heterostructure and schematic band diagram. The dark and light gray spheres also represent Mo and S atoms respectively.