

二層ヘテロ構造を有する遷移金属カルコゲナイドへの電界効果キャリア蓄積

Carrier accumulation in TMDC thin films with bilayer heterostructure by an external electric field

筑波大学 丸山 実那

Univ. Tsukuba, Mina Maruyama

E-mail: mmaruyama@comas.frsc.tsukuba.ac.jp

新奇な原子層物質である、遷移金属ダイカルコゲナイド(TMDC)は、構成原子種とその組み合わせの多様性により、多くの原子層状構造が報告されている。これらの原子層物質は、ファンデルワールス力によって積層構造が保持されているため、機械的剥離、転写が容易である。そのため、種々の原子層物質を積層させた、ヘテロ積層原子層物質を得ることができ、積層構造に依存した新奇物性発現や、電子物性の制御が期待されている[1]。本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算手法を用いて、FET 構造を有する 2 層からなるヘテロ TMDC 薄膜への電界効果による電子物性変調の解明を行った。

図に計算モデルと電界効果電荷密度分布を示す。MoS₂/WS₂ ヘテロ構造の場合、MoS₂ が電極に近い積層構造(図左側)では、注入された電子はほぼ MoS₂ 近傍に蓄積することを明らかにした。一方、注入されたホールは MoS₂ に加えて WS₂ にも蓄積することを明らかにした。WS₂ が電極に近い積層構造(図右側)では、注入したホールはほぼ WS₂ 近傍に蓄積するが、注入した電子は、WS₂ に加えて MoS₂ にも蓄積される。電極に対する積層構造の違い、つまり電場に対するバンドアライメントの違いによって、蓄積するキャリア種、キャリア量、蓄積分布域が変調することを明らかにした。このことから、積層構造を制御することで注入された電子系の広がりやを制御できることを明らかにした。

[1] A. K. Geim and I. V. Grigorieva, Nature **499**, 419 (2013).

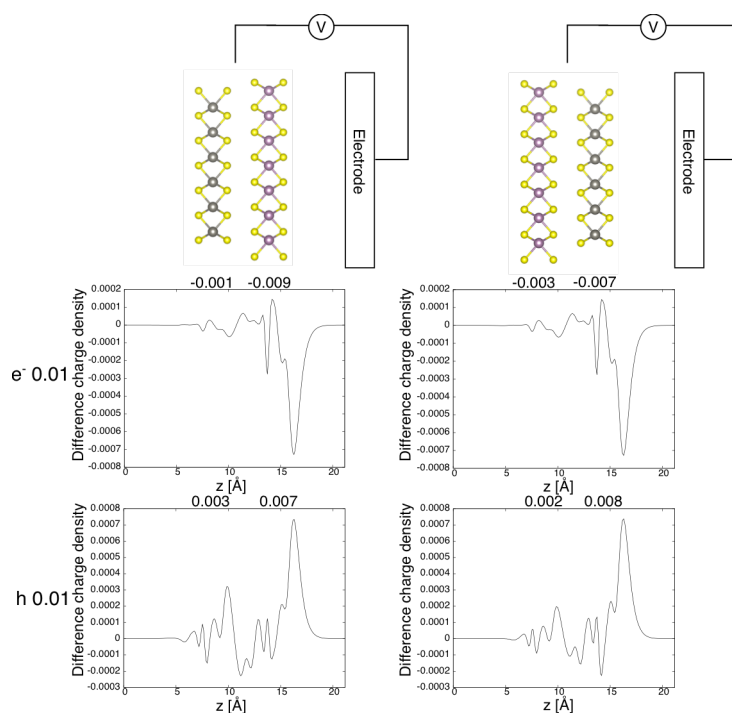


Figure: Calculation model and distribution of charge density by an external electric field.