

計算科学によるファンデルワールス積層ヘテロ構造の物性探索

Computational studies on physical properties of vdW heterostructures

筑波大学 岡田 晋

Univ. Tsukuba, Susumu Okada

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

剥離法や化学気相成長法等により、種々の2次元原子層状物質の合成ならびに単離が可能となっている。さらに、近年では、これらの2次元原子層状物質を任意の組み合わせで再積層させることにより、ファンデルワールス(vdW)積層ヘテロ構造と呼ばれる、全く新しい層状物質の合成がなされている。これらのvdW積層ヘテロ構造の物性は、多くの場合、積層する原子層状物質の物性の代数和として第0近似として記述可能である。これは、構成単位となる個々の2次元原子層が、その面内において完全に飽和した結合を有し面鉛直方向に対しては化学的に不活性なため、ヘテロ構造を形成しても両者の間の波動関数の重なりが小さく、両者の物性の変調が小さいためである。しかしながら、非常に極端な物性を有する構成原子層状物質からなるvdW積層ヘテロ構造では、単純な代数和を超えた特異な電子物性の発現が期待される。さらに、これらのvdW積層ヘテロ構造に対して外場印加すると、構成原子層物質の構造や配置に依存した特異な電界応答現象が発現する。

本講演では、単純な代数和を超えた物性変調発現の可能性と[1-2]、vdW積層ヘテロ構造の電界応答現象[3-5]に関する最近の話題について紹介する。

引用文献

- [1] K. Kishimoto, S. Okada, Surf. Sci. **644**, 18 (2016).
- [2] Y. A. Saucier, S. Okada, M. Maruyama, Appl. Phys. Express **10**, 095101 (2017).
- [3] K. Kishimoto, S. Okada, Appl. Phys. Lett. **110**, 011601 (2017).
- [4] M. Matsubara, S. Okada Appl. Phys. Express **10**, 025101 (2017).
- [5] M. Matsubara, S. Okada, J. Appl. Phys. **123**, 174302 (2018).