

第一原理計算による遷移金属ダイカルコゲナイドのゲージファクタ解析

First-Principles Analysis of Gauge Factors for Transition Metal Dichalcogenides

京大学際セ¹, エジプト日本科技大² ○中村 康一^{1,2}

Kyoto Univ.¹, E-JUST², °Koichi Nakamura^{1,2}

E-mail: koichi@cpier.kyoto-u.ac.jp

層状物質である遷移金属ダイカルコゲナイド (TMDC) は新しい機能性材料として大きな注目を集めており、とりわけ複数の遷移金属やカルコゲン原子による TMDC ヘテロ接合界面構造については、さまざまなデバイスへの応用が研究されている[1]。本研究では第 6 族金属 (Mo および W) とカルコゲン原子によるいくつかの組み合わせの単層および多層 TMDC について電子構造のひずみ応答を第一原理計算により解析し、ゲージファクタのシミュレーション値に基づいて新規デバイス素子への可能性やヘテロ接合におけるマッチングについて議論した。

TMDC の電子構造を正確に表現するためにはスピン軌道相互作用の考慮が不可欠であり、スピン軌道相互作用によるバンド分裂がキャリア電子やホール分布に大きな影響を与える[2]。各 TMDC の伝導帯および価電子帯はそれぞれ多谷構造・多峰構造を持つが (Fig. 1)、谷間や峰間のエネルギー差が小さい場合、層に平行な方向の単軸ひずみによって顕著なキャリア再分配が生じた。著者が開発したシミュレーション手法[3,4]によって、ドーピングした単層 TMDC での縦方向ゲージファクタを導出したところ、p 型 MoS₂ において大きな正のゲージファクタ ([1100] 方向で 87.4, [1120] 方向で 94.2) が得られた。これは K 点に分布していたホールが単軸ひずみによって有効質量の大きい Γ 点に移動することに伴うものである。また、n 型 MoSe₂ および WSe₂ では、 Γ -K 間にある伝導帯の谷に分布していたキャリア電子が K 点に移動することに伴い、有意な負のゲージファクタが得られた。多層構造やヘテロ接合界面構造に関するシミュレーション結果など、詳細は当日発表する。

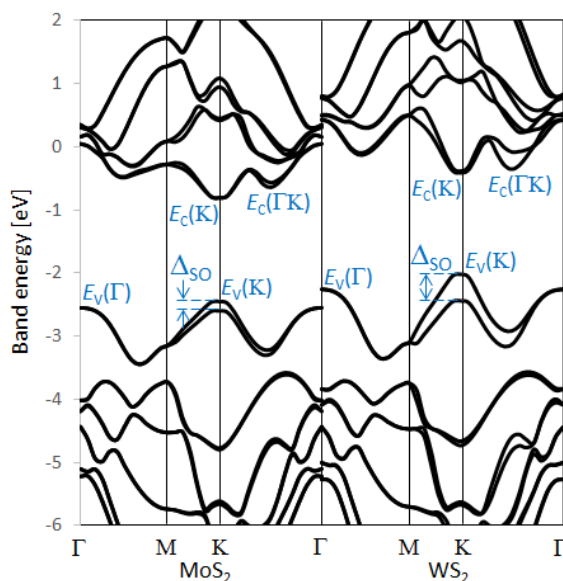


Figure 1. Band diagrams of MoS₂ and WS₂ monolayers with spin-orbit coupling.

- [1] S. Yoshida, Y. Kobayashi, R. Sakurada, S. Mori, Y. Miyata, H. Mogi, T. Koyama, O. Takeuchi, and H. Shigekawa., *Sci. Rep.* **5**, 14808 (2015).
- [2] K. Nakamura, *Jpn. J. Appl. Phys.*, submitted.
- [3] K. Nakamura, Y. Isono, and T. Toriyama, *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 5132 (2008).
- [4] K. Nakamura, Y. Isono, T. Toriyama, and S. Sugiyama, *Phys. Rev. B* **80**, 045205 (2009).