

# WS<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub> ヘテロ積層構造における発光特性の並進の自由度依存

## Effect of stacking order in PL properties of interlayer excitons in WS<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub>

### van der Waals heterostructures



名大理<sup>1</sup>, Rice大<sup>2</sup>, 物材機構<sup>3</sup> ○(DC)岡田 光博<sup>1</sup>, Alex Kutana<sup>2</sup>, 暮石 宥介<sup>1</sup>,

Sunny Gupta<sup>2</sup>, 渡邊 賢司<sup>3</sup>, 谷口 尚<sup>3</sup>, Boris I. Yakobson<sup>2</sup>, 篠原 久典<sup>1</sup>, 北浦 良<sup>1</sup>

Nagoya Univ.<sup>1</sup>, Rice Univ.<sup>2</sup>, NIMS<sup>3</sup>, °(DC)Mitsuhiro Okada<sup>1</sup>, Alex Kutana<sup>2</sup>, Yusuke Kureishi<sup>1</sup>,

Sunny Gupta<sup>2</sup>, Kenji Watanabe<sup>3</sup>, Takashi Taniguchi<sup>3</sup>, Boris I. Yakobson<sup>2</sup>, Hisanori Shinohara<sup>1</sup>,

Ryo Kitaura<sup>1</sup>

E-mail: noris@nagoya-u.jp, r.kitaura@nagoya-u.jp

近年、異種の原子層物質同士を積層させた、原子層ヘテロ積層構造が大きな注目を集めている。特に、VI族原子層遷移金属ダイカルコゲナイドを積層したヘテロ積層構造は、電子と正孔が層間にまたがった層間励起子由来の発光を示し、その寿命・バレー寿命は単層のそれと比べ1000倍を超えることなどから、二次元系における励起子物性探索の場として急速に研究が進んでいる。<sup>[1][2]</sup>

この原子層ヘテロ積層構造は、各層の相対角度および並進の自由度という構造の自由度を持っている。これらの自由度はそのバンド構造、ひいては光学特性等に大きな影響を及ぼすと考えられるが、特に、並進が物性に及ぼす影響を実験的に明らかにした例はない。そこで、本研究では、この結晶の並進の自由度による原子層ヘテロ積層構造の基礎的な光学特性の変化を調べることを目的とした。

対象とする原子層ヘテロ積層構造は、WS<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub> ヘテロ積層構造とし、hBN 保護かつ積層角度を制御したヘテロ積層構造を化学気相成長(CVD)法と乾式転写法を用いて作成した。図1に、作成したヘテロ積層構造の発光特性を示す。同一の積層角度(60度)をもつヘテロ積層構造において、層間励起子由来の発光に約数十 meV のシフトが現れた。この由来を探るべく、第一原理計算を行い、実験事実との比較を行った結果、この双方の発光特性を示す構造には層間距離の変化が生じていることがわかった。

当日は、これら並進の自由度による発光特性の変調とともに、DFT 計算による並進の自由度とバンド構造の関係性について議論する予定である。

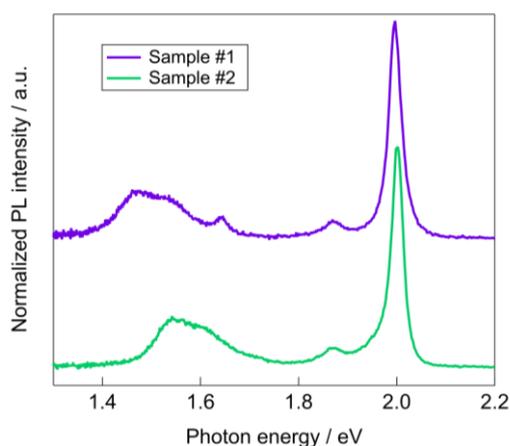


図1. 作成した原子層ヘテロ積層構造の常温における発光特性.

[1] P.Nagler *et al.*, *2D Mater.*, 025112 (2017).

[2] P.Rivera *et al.*, *Science*, 688 (2016).