$MoSe_2$ 中の空孔の安定性に対する帯電効果

Charging effect on vacancy stability of $MoSe_2$

森山聖矢，影島博之　（島根大院自然科学）

Masaya Moriyama, Hiroyuki Kageshima　(Shimane University)

E-mail: n18m222@matsu.shimane-u.ac.jp

遷移金属ダイカルコゲナイト(TMDC)は二次元半導体であり、優れた物性から次世代のデバイス材料として特に期待されている。類似の構造を持つ他の二次元半導体を含め、デバイス応用に向けた研究課題に原子空孔の物性が挙げられている。我々はこれまで、TMDC の一つである MoS_2 における原子空孔の物性を第一原理計算により検討し、負に帯電させるほどエネルギー的に原子空孔が安定することを明らかにした[1]。これは電荷(charge state)が局所的に中性から偏ることで、新たな原子空孔が発生しうることを示唆している。今回の報告では更に、他の TMDC である $MoSe_2$ における原子空孔の物性を解析した。

計算コードは密度汎関数理論に基づく"VASP"を使用した。6×6 のスーパーセルを持った単層の自立した $MoSe_2$ 構造及び AB-stacking $MoSe_2/MoSe_2$ 積層構造を計算モデルとした。対象とした原子空孔は主に V_{Se_t}, V_{Se_b}, V_{Se2}, V_{Mo} で、いずれも片方の $MoSe_2$ 側に導入した。モデルに含まれる総電子数を計算毎に変え、系の charge state を制御した。交換相関ポテンシャルは GGA-PBE を採用し、Tkatchenko-Scheffler の van der Waals 相互作用を使った。PAW 法を適用し、平面波基底のカットオフエネルギーは 400 eV とした。k 点は 6×6×2 とした。

まず、charge state に対する原子空孔の安定性を評価した。自立 $MoSe_2$ [図(a)]と同様に、$MoSe_2/MoSe_2$ 構造[図(b)]でも原子空孔の形成エネルギーは負の帯電により減少し、発生確率が上がった。バンドギャップの大きさは自立 $MoSe_2$ が 1.41eV に対して $MoSe_2/MoSe_2$ 構造は 1.06eV と小さくなった。 $MoSe_2/MoSe_2$ 構造における各原子空孔の q=0 の形成エネルギーは自立 $MoSe_2$ より V_{se} は 0.107eV, V_{se2} は 0.114eV, V_{Mo} は 0.127eV 高い。このため、適切に Fermi level energy を選べば、自立 $MoSe_2$ よりも $MoSe_2/MoSe_2$ 構造ではプロセス中の原子空孔の発生が抑制されると期待できる。

[謝辞] 本研究の計算の一部は東京大学物性研究所スーパーコンピュータセンターにて行われました。

[1] S. Urasaki and H. Kageshima Jpn. J. Appl. Phy. **57**, 125202 (2018).

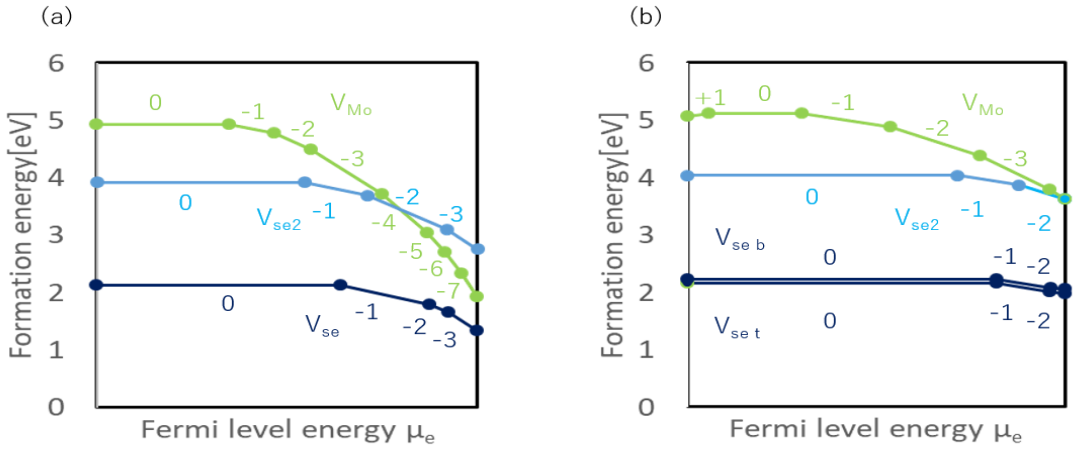

図. Mo-rich における空孔の形成エネルギーに対する帯電効果：(a)自立 $MoSe_2$ (b) $MoSe_2/MoSe_2$ 構造。

© 2019年 応用物理学会