

FET 構造下における $\text{MoS}_2/\text{MoSe}_2$ ヘテロ構造体へのキャリア蓄積

Carrier accumulation in $\text{MoS}_2/\text{MoSe}_2$ under the FET structure

筑波大数理 丸山 実那, 岡田 晋

Univ. Tsukuba, Mina Maruyama, Susumu Okada

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

遷移金属カルコゲン化合物(TMDC)は、原子種に依存した多様な電子物性を示すことが知られている。さらに、弱い層間力に起因して、単層の TMDC の剥離や転写が可能であるため、種々の TMDC を積層させたヘテロ積層構造体を得ることができ、積層構造によるさらなる電子物性制御が可能となっている [1]。前回の学術講演では、我々は格子の整合性を有する TMDC によるヘテロ構造体に着目し、FET 構造を有する MoS_2/WS_2 ヘテロ構造体での電界効果による蓄積キャリア分布を明らかにした。 MoS_2/WS_2 ヘテロ構造体は、面内の等方伸縮によって蓄積キャリア分布が非対称に変調することを示した。本研究では、格子の整合性を有さない TMDC によるヘテロ構造体に着目をし、そこに存在する本質的な歪みによる蓄積キャリア分布の影響を明らかにした。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 $\text{MoS}_2/\text{MoSe}_2$ ヘテロ構造体の電子構造を明らかにし、特に系に対する電極相対配置やキャリア種に対するキャリア分布依存性の解明を行った。

計算の結果、 $\text{MoS}_2/\text{MoSe}_2$ ヘテロ構造体は、 MoS_2/WS_2 ヘテロ構造体と比較して、面内の等方伸縮によるキャリア分布の変調が誘起しされないことを明らかにした。この結果は、格子の整合性を有さない組み合わせでのヘテロ構造体で起こりうるネットワークの歪みは、電界効果によるキャリア蓄積機構へあまり影響を及ぼさないことを示している。

引用文献

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