

# 鉛直電場が印加された $\text{MoS}_2/\text{WS}_2$ ヘテロ積層構造体中のキャリア分布

## Carrier distribution in $\text{MoS}_2/\text{WS}_2$ vdW heterostructure under a perpendicular electric field

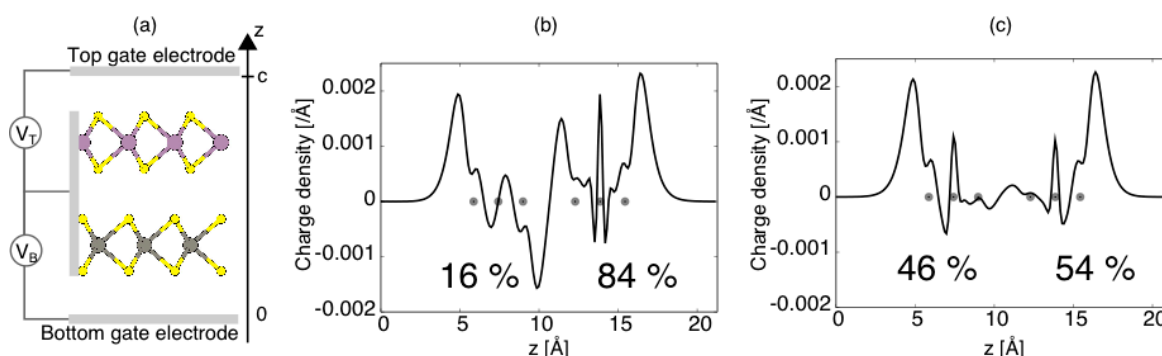
筑波大数理<sup>1</sup>, 東大工<sup>2</sup> ○丸山 実那<sup>1</sup>, 長汐 晃輔<sup>2</sup>, 岡田 晋<sup>1</sup>

Univ. of Tsukuba<sup>1</sup>, The Univ. of Tokyo<sup>2</sup>, ○Mina Maruyama<sup>1</sup>, Kosuke Nagashio<sup>2</sup>, Susumu Okada<sup>1</sup>

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

遷移金属カルコゲン化合物は、柔軟な原子層状構造と低次元性を反映した特異な電子状態から、柔軟性を有する電界効果トランジスタ(FET)のチャンネル材といったナノデバイスを構築する材料として期待されている。遷移金属カルコゲン化合物の電子状態は、構成原子種、積層層数、積層構造に依存することが知られている。さらに、格子系の伸縮や電場印加によっても、大きな変調を受ける。とりわけ、原子種の制御により構築されるヘテロ系においては、ヘテロ構造を構成する遷移金属カルコゲン化合物のバンドオフセットを利用して、新しい機能デバイスの創生が試みられている。我々は前回、二層  $\text{MoS}_2$  系に対して鉛直電界を印加することで、非対称なキャリア分布が生じることを報告した[1]。

本研究では、密度汎関数理論を用いて、鉛直電場を印加した  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2$  ヘテロ積層系への電界効果によるキャリア蓄積現象の解明を行った。図にデュアルゲート FET 構造下でのヘテロ積層系のキャリア密度分布を示す。 $\text{MoS}_2$  側の電極が正である正電場下では、注入された電荷は  $\text{MoS}_2$  に集中して分布し、他方負電場下では、注入された電荷は  $\text{MoS}_2$  と  $\text{WS}_2$  へほぼ等しく分布することを明らかにした。この非対称な電子分布は、電場の向きに加えて電場の大きさ、電荷の注入量、積層配向によって変調される。



(a) Calculation model of  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2$  heterostructure under dual-FET. Violet, gray, and yellow denote Mo, W, and S atoms, respectively. Accumulated electron distribution as a function of the z-axis of  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2$  heterostructure with twisted stacking structure under the (a) positive and (b) negative strong electric field with low doping concentration.

[1] M. Maruyama, K. Nagashio, S. Okada, ACS Appl. Electron. Matter. **2**, 1352 (2020)