鉛直電場が印加された二層二硫化モリブデンのキャリア密度分布

Carrier distribution in bilayer MoS_2 under an external field

筑波大数理 [1]，東大工 [2]　○丸山 実那 [1]，長汐 晃輔 [2]，岡田 晋 [2]

Univ. of Tsukuba [1], Univ. of Tokyo[2], ◦Mina Maruyama[1], Kosuke Nagashio[2], Susumu Okada[2]

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)のチャネル材など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、積層構造に依存し、さらには、伸縮や電場印加にも依存することが知られている。加えて、近年では種々の遷移金属カルコゲン化合物を組み合わせたヘテロ系を構築することでバンドオフセットを利用した新しい機能物性の付与が試みられている。このようなヘテロ積層系では、バンドオフセットに起因した、キャリア種や電極相対配置に強く依存した電界効果による電荷蓄積が生じる[1]。バンドオフセットによる非対称なキャリア分布現象は、実験的にも二層二硫化モリブデンをチャネル材としたデュアルゲート FET において報告されている[2]。本研究では、密度汎関数理論に基づく電子状態計算の手法を用いて、鉛直電場が印加された二層二硫化モリブデンへのキャリア密度を明らかにし、前述の実験結果の理論的な解釈とキャリア蓄積制御方法の提示を行う。図にデュアルゲート FET 構造下での二層二硫化モリブデンのキャリア密度分布を示す。鉛直電場を印加すると二硫化モリブデンの間でバンドオフセットが生じ、そこに電子を注入すると二層の二硫化モリブデンへの偏った電子蓄積が生じることを明らかにした。この分布の偏りは、電場の大きさと積層配向の制御によって制御ができる。特に、回転積層構造を有する二層二硫化モリブデンでは、注入された電荷のほぼ 9 割が正極側の二硫化モリブデン層に分布する。これらの結果は、正極側の二硫化モリブデン層に対して、負極側の二硫化モリブデンが絶縁層として振る舞う可能性を示唆している。

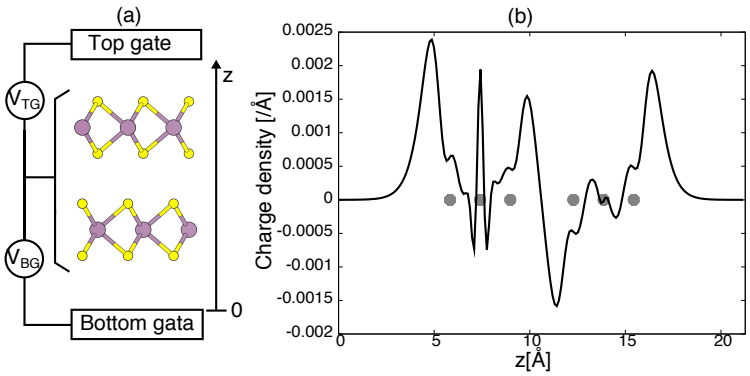

図 (a) Calculation model of bilayer MoS_2 under dual-FET. Violet and yellow balls denote Mo and S atoms. (b) Carrier distribution in bilayer MoS_2. Gray ball denotes z of atoms.

Reference

[1] M. Maruyama, Appl. Phys. Express, **12**, 075008 (2019).

[2] K. Maruyama, K. Nagashio, SSDM extended abstract, 2018, 761.