

局所的な曲率構造を有するヤヌス WSe 面内ヘテロ系のエネルギー論と電子状態

Energetics and electronic structures of corrugated in-plane heterostructures of Janus WSe

筑波大数理 [○]丸山実那, 岡田 晋, 高 燕林

Univ. Tsukuba, [○]Mina Maruyama, Susumu Okada, Yanlin Gao

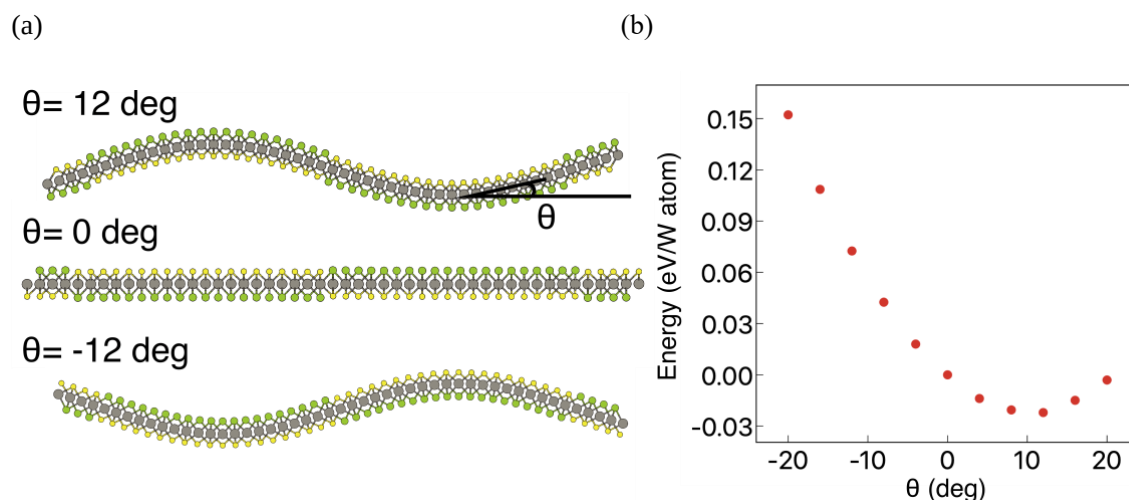
E-mail: mmaruyama@comas-tsukuba.jp

遷移金属カルコゲン化合物 (TMD) は、遷移金属原子とカルコゲン原子からなる三原子厚の原子層物質である。TMD の電子状態は構成原子種に依存した多様性を示すことから、構造による TMD 系の電子状態の制御が着目されている [1]。加えて、TMD の面鉛直方向の高い柔軟性は、シワや折り畳みなどの局所的なナノ構造構築を可能とし、それによる電子状態の変調が理論的に予言されている [2]。本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算手法を用いて、図(a)で示す局所的な曲率構造を有するヤヌス WSe 面内ヘテロ構造のエネルギー論と電子状態の解明を行なった。

図(b)に曲率構造を有するヤヌス WSe 面内ヘテロ構造のエネルギーの曲率角度依存性を示す。曲率の内側が S、外側が Se、かつ $\theta = 12^\circ$ の構造が最もエネルギー的に安定であることを明らかにした。他方、曲率の外側が Se、内側が Se の構造は、曲率角度が大きくなるにつれてエネルギー的に不安定な構造となる。曲率構造を有するヤヌス WSe 面内ヘテロ構造の電子状態は、局所的な構造に依存した変調を示すことを明らかにした。

[1] Y. Gao and S. Okada, Appl. Phys. Express **16**, 075004 (2023).

[2] Y. Gao, et al. Jpn. J. Appl. Phys. **62**, 015001 (2023).



図：曲率構造を有するヤヌス WSe 面内ヘテロ構造の(a) 最適化構造、(b) エネルギーの曲率角度依存性。黄色、緑、灰色は硫黄、セレン、タングステンを表す。