

## 単原子空孔を含む hBN 薄膜の電子状態の積層構造依存性

### Electronic properties of hBN thin films with monatomic vacancies

筑波大数理 <sup>○</sup>丸山 実那, 岡田 晋

Univ. Tsukuba, <sup>○</sup>Mina Maruyama, Susumu Okada

E-mail: mmaruyama@comas-tsukuba.jp

原子層物質の電子状態は、構成原子種に加えて積層構造や積層数といった原子層物質特有のパラメータに依存する。中でも、二種類の原子で構成される原子層物質は、特定の積層構造ならびに積層数の下でシート鉛直方向の自発的分極を有する [1]。さらに、これらの原子層物質に欠陥が導入されると、欠陥由来の状態が誘起される。これら、欠陥起因の状態は欠陥の種類、構造、サイズに強く依存することが知られている [2]。しかしながら、原子層物質薄膜に導入された欠陥が薄膜の電子物性に及ぼす影響はあまり明らかになっていない。そこで、本研究では、密度汎関数理論を用いて、欠陥構造を含む hBN 薄膜の電子状態の積層構造依存性を明らかにした。

ここでは5層 hBN 中に単原子空孔が  $10^{13} / \text{cm}^2$  の密度で埋め込まれた hBN 薄膜に着目した (図1)。hBN 薄膜のエネルギーは、空孔が導入された層の位置に強く依存することが明らかになった。単原子空孔を含む5層 hBN の電子状態は、欠陥構造、欠陥を含む層の薄膜内での位置、ならびに積層構造に依存する。

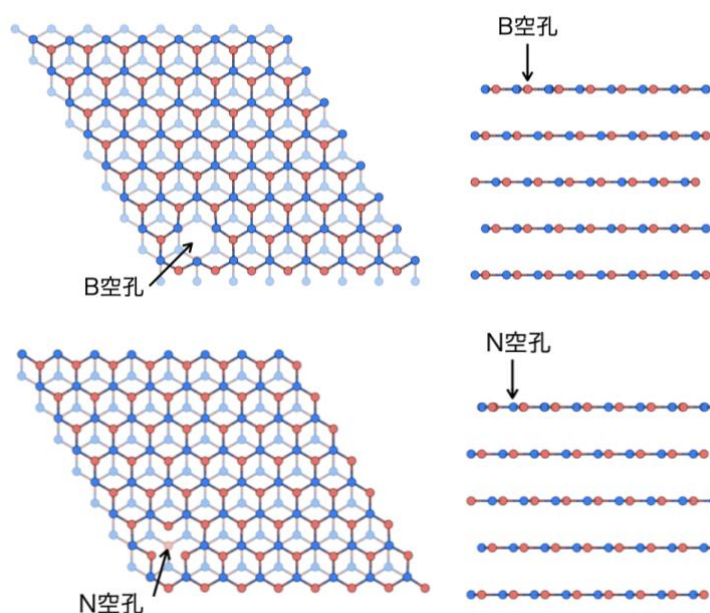


図1: 最外層に単原子空孔を含む ABC 積層 hBN 薄膜の構造. 赤が B 原子、青が N 原子を示す.

#### 参考文献

[1] M. Maruyama and S. Okada, FlatChem **48**, 110571 (2024).

[2] D. Kozawa, et al. Nanotechnology **34**, 115702 (2023).