

電氣的な偏りのない2次元結晶を重ねるだけで面内に電荷の偏りと光発電機能を実現 —2次元物質界面における新たな機能性の開拓—

1. 発表者：

- 赤松 孝俊 (研究当時：東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 修士課程2年)
井手上 敏也 (東京大学大学院工学系研究科附属量子相エレクトロニクス研究センター 助教)
Ling Zhou (College of Engineering and Applied Sciences, Nanjing University)
Yu Dong (東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 修士課程2年)
北村 想太 (東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 助教)
吉井 真央 (東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 修士課程1年)
Dongyang Yang (Department of Physics & Astronomy, The University of British Columbia)
恩河 大 (研究当時：東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 博士課程)
中川 裕治 (研究当時：東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 博士課程)
渡邊 賢司 (物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点)
谷口 尚 (物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクニクス研究拠点)
Joseph Laurienzo (Department of Physics, Case Western Reserve University)
Junwei Huang (College of Engineering and Applied Sciences, Nanjing University)
Ziliang Ye (Department of Physics & Astronomy, The University of British Columbia)
森本 高裕 (東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 准教授)
Hongtao Yuan (College of Engineering and Applied Sciences, Nanjing University)
岩佐 義宏 (東京大学大学院工学系研究科附属量子相エレクトロニクス研究センター、同研究科物理工学専攻 教授／理化学研究所 創発物性科学研究センター 創発デバイス研究チーム チームリーダー)

2. 発表のポイント：

- ◆極性(注1)を持たない2次元結晶(注2)を重ねて界面(2つの2次元結晶の境界)を作製するだけで、面内に電気分極(注3)が発現し、それを反映して室温で巨大な光起電力効果(注4)が生じることを発見した。
- ◆観測された光起電力効果が、従来の半導体接合構造を必要としない光起電力効果であり、量子力学的な機構によって説明できることを明らかにした。
- ◆2次元界面における物性開拓への新しい可能性を見出した。

3. 発表概要：

東京大学大学院工学系研究科の井手上敏也助教、同研究科の岩佐義宏教授(理化学研究所創発物性科学研究センター 創発デバイス研究チーム チームリーダー兼任)らの研究グループは、同研究科の森本高裕准教授らのグループやNanjing University、物質・材料研究機構、The University of British Columbiaのグループと共同で、2種類の異なる2次元結晶(WSe₂と黒リン)を重ねて作製した界面において、面内に電気分極とそれを反映した巨大な光起電力効果が生じることを発見した。

層状物質から剥離した、原子層 1 枚、あるいは数枚だけからなる 2 次元結晶は、元の物質とは全く異なる性質を示すことに加えて、剥離した 2 次元結晶同士をはり合わせるだけで新しい 2 次元界面を作製でき、予想外の物性や機能が発現することから、近年大きな注目を集めている。これらの界面は、はり合わせる物質の種類とはほぼ無関係に作製できるという点でこれまでの 2 次元界面の常識を大きく破っており、作製した界面では、元の結晶には無いさまざまな特徴的構造が現れて、物性に大きく影響を与える場合がある。本研究では、2 次元結晶界面において初めて面内の極性構造に着目して、2 つの異なる 2 次元結晶を重ねて界面の対称性を制御することで、面内に電気分極を実現するとともに、分極に由来する自発的な光起電力効果（バルク光起電力効果（注 5））を観測することに成功した。さらに、光電流の詳細な振る舞いを調べ、観測されたバルク光起電力効果が、電子の量子力学的な波束の重心位置が光照射によって空間的に変化するという機構によって説明できることを見出した。

本研究成果は、2 次元結晶界面における新たな対称性制御の指針を与えるものであり、2 次元結晶界面の機能性開拓をさらに推進する契機となるだけでなく、結晶の持つ周期性が失われた物質における電気分極や光起電力効果といった現象の探索に重要な知見を与えるものと期待される。

本研究は、科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業 さきがけ 研究領域「トポロジカル材料科学と革新的機能創出」における研究課題「ファンデルワールス結晶の対称性制御とトポロジカル非線形輸送」（研究者：井手上 敏也）および「トポロジカル物質の非線形応答および非平衡現象の理論的研究」（研究者：森本 高裕）の支援を受けて行われた。

本研究成果は、米国科学雑誌「Science」（米国東部夏時間 4 月 2 日）に掲載される。

4. 発表内容：

①背景

3 次元層状物質を原子層 1 枚、あるいは数枚だけ剥離することによって得られる 2 次元結晶は、元の 3 次元物質とは全く異なる性質を示すだけでなく、剥離した 2 次元結晶を自由に重ねて界面を作製することで、元の 2 次元結晶にも無い新しい機能性の開拓が可能になる。近年、そのような 2 次元結晶界面特有の構造を反映した物性が議論されるようになり、さまざまな輸送特性や光機能性の発現が報告されるようになってきた。しかしながら、そのような特徴的構造を反映した物性の開拓は類似の結晶構造を持った 2 次元結晶界面に限られており、全く異なる構造を持った 2 次元結晶界面における議論は難しいため、これまでほとんどされてこなかった。また、元の結晶が持っていた周期的構造が失われた界面において、結晶で議論されてきた分極や光起電力効果に着目した研究はなかった。

②研究内容

本研究では、どちらも極性を持たない、異なる構造を持った 2 次元結晶である、二セレン化タングステン (WSe_2) と黒リン（図 1 左、中央）を重ねることで、ユニークな対称性を持つ 2 次元結晶界面を作製した。 WSe_2 と黒リン界面では、元の WSe_2 や黒リンが持っている回転対称性（注 6）が消失して鏡像対称性（注 7）のみが存在するようになるため、面内に極性構造が実現していると期待される（図 1 右）。そこで、この界面に光を照射した際の電流応答を調べたところ、電極から離れた位置に光を照射した場合に、電圧を印加しなくても極性構造を反映して有限に光電流が流れることを発見した（図 2）。また、界面のさまざまな位置に光を照射して光電流を測定することにより、電極から離れた位置に光を照射した場合に自発的に生じるような光起電力効果は、分極が期待される方向にのみ生じており（図 3 中央）、それに対して

垂直な方向には消失していることを明らかにした（図3右）。さらに、光電流の大きさの照射光強度依存性や光エネルギー依存性等を詳細に調べることにより、観測されたバルク光起電力効果が、電子の量子力学的な波束の重心位置が光照射によって空間的に変化するという機構によって説明できることを見出した。

③今後の展望

本研究では、2次元結晶界面の極性構造に着目し、極性を持たない2次元結晶を重ねて作製した界面において、電気分極とそれを反映したバルク光起電力効果が生じることを報告した。今後は、物質の組み合わせやデバイス構造の最適化による、光発電効率のさらなる向上が期待される。また、このような2次元結晶界面は、はり合わせる物質の種類の制限を受けないため、今後他のさまざまな2次元結晶界面の実現とそこでの機能性開拓が大いに期待できる。さらに、本研究成果は、結晶の持っていた周期的構造が失われた物質における電気分極や光起電力効果といった物性の発現を示唆しており、新奇固体物性を開拓、考察していく上での重要な知見を与えるものと期待される。

5. 発表雑誌：

雑誌名：「Science」（オンライン版：4月2日）

論文タイトル：A van der Waals interface that creates in-plane polarization and a spontaneous photovoltaic effect

著者：Takatoshi Akamatsu, Toshiya Ideue*, Ling Zhou, Yu Dong, Sota Kitamura, Mao Yoshii, Dongyang Yang, Masaru Onga, Yuji Nakagawa, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Joseph Laurienzo, Junwei Huang, Ziliang Ye, Takahiro Morimoto, Hongtao Yuan, Yoshihiro Iwasa

DOI 番号：10.1126/science.aaz9146

6. 問い合わせ先：

<研究に関すること>

東京大学 大学院工学系研究科附属量子相エレクトロニクス研究センター
助教 井手上 敏也（いでうえ としや）

TEL：03-5841-6822

E-mail：ideue[at]ap.t.u-tokyo.ac.jp

東京大学 大学院工学系研究科附属量子相エレクトロニクス研究センター
教授 岩佐 義宏（いわさ よしひろ）

TEL：03-5841-6828

E-mail：iwasa[at]ap.t.u-tokyo.ac.jp

<JST事業に関すること>

科学技術振興機構 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ
嶋林 ゆう子（しまばやし ゆうこ）

TEL：03-3512-3526 FAX：03-3222-2066

E-mail：presto[at]jst.go.jp

<報道に関すること>

東京大学 大学院工学系研究科 広報室
TEL : 070-3121-5626 FAX : 03-5841-0529
E-mail : kouhou[at]pr.t.u-tokyo.ac.jp

理化学研究所 広報室
E-mail : ex-press[at]riken.jp

科学技術振興機構 広報課
TEL : 03-5214-8404 FAX : 03-5214-8432
E-mail : jstkoho[at]jst.go.jp

7. 用語解説 :

注1 : 極性

電場の印加や分子・結晶構造に起因して、分子や結晶内に電氣的な偏りが生じている性質。

注2 : 2次元結晶

原子や分子が、1つの層の二次元平面内で周期性を持って配列した物質。炭素からなるグラフェンが代表例。

注3 : 電気分極

電荷の偏った状態、およびそれを定量的に表した物理量。

注4 : 光起電力効果

物質に光を照射すると電流が流れる現象のこと。

注5 : バルク光起電力効果

空間反転対称性の破れた物質において、光を照射した際に生じる自発的な光起電力効果のこと。p型（電子の少ない）半導体とn型（電子の多い）半導体の接合であるpn接合を必要としないため、従来型太陽電池の理論限界を超える可能性が期待されている。

注6 : 回転対称性

特定の軸の周りに決まった角度回転させると、元の物質と同一になる性質。

注7 : 鏡像対称性

特定の面に関する鏡像（鏡に映った像）が元の物質と同一になる性質。

8. 添付資料：

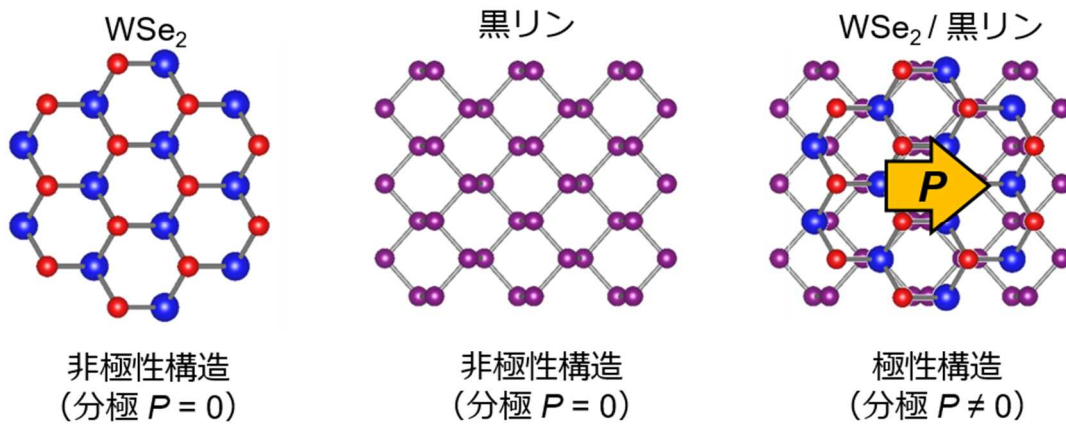


図 1. WSe₂、黒リンおよび WSe₂/黒リン界面の模式図

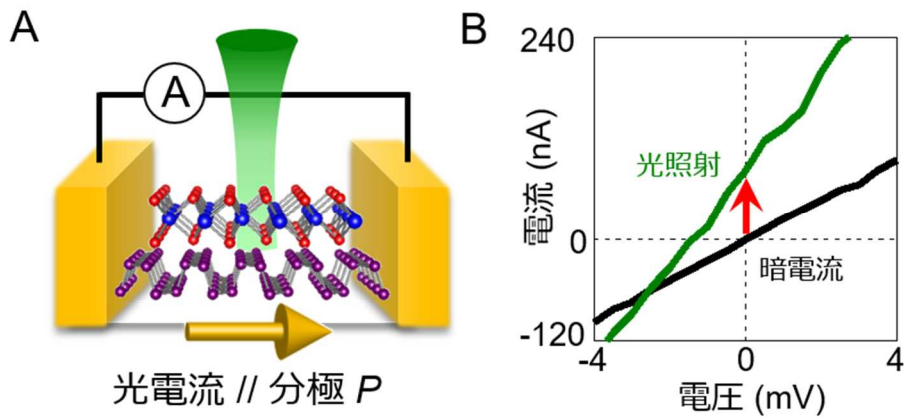


図 2. WSe₂/黒リン界面におけるバルク光起電力効果の模式図 (A) 及び光照射下での電流 - 電圧特性 (B)

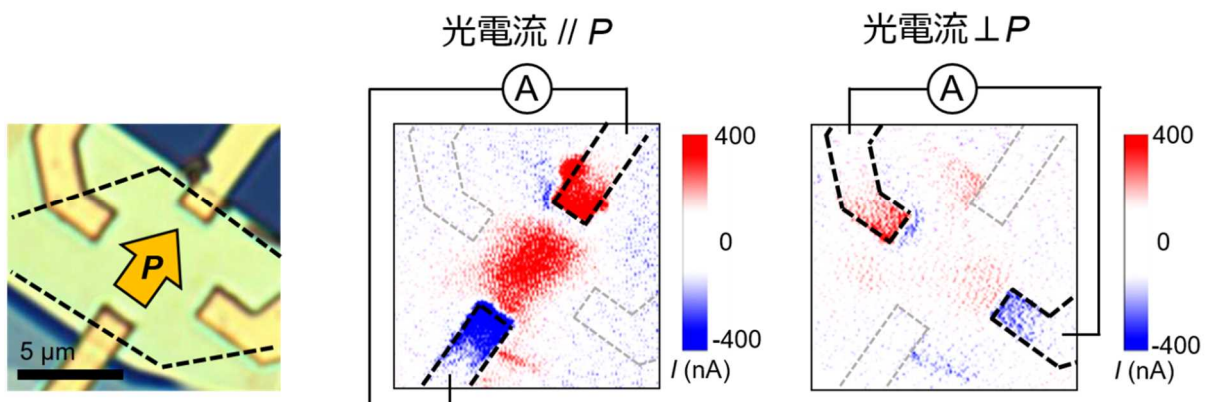


図 3. WSe₂/黒リン界面デバイス写真 (左) と異なる電極対を流れる自発的な光電流の光照射位置依存性 (中央、右)。分極と平行な方向には、電極から離れた位置に光を照射した場合にも光電流が流れているが、分極と垂直な方向には、そのような振る舞いは観測されない。