

MoS₂ クラスタ成長過程の第一原理計算による研究

First-Principles Study of Crystal Growth of MoS₂ clusters

島根大学 大学院総合理工学研究科 岡田 克也, 影島 博之

Shimane Univ., Katsuya Okada, Hiroyuki Kageshima

E-mail: s159611@matsu.shimane-u.ac.jp

グラフェンの持つ驚異的な物性に注目が集まる一方で、グラフェンと同じ層状の構造を持つ層状物質にも目が向けられた。とりわけ、層状物質の中でもバンドギャップを持つ TMD(遷移金属ダイカルコゲナイド)は、バンドギャップを持たないグラフェンと組み合わせて新たな FET を作成出来るとして盛んに研究が行われている。今回研究の対象とした MoS₂ も TMD であり、MoS₂ の単層結晶は層状の三角形クラスタを形成しながら成長することが知られている。本研究では第一原理計算ソフト PHASE を用いて、MoS₂ クラスタが三角形に成長する前段階のメカニズムを探る[1]。計算方法として、ウルトラソフト擬ポテンシャルを用い、密度汎関数には GGAPBE96 を使用した[2]。実験で確認されている最小のクラスタである Mo₁₀S₂₄ を元に、モデルを作成した[3]。このモデルは S75%edge と呼ばれており、先行研究の実験と理論計算とを組み合わせた結果によりこのモデルが最も安定であると報告されている。このモデルから原子を 1 つずつ抜いていく。これは抜けている原子がはまって欠陥の無い MoS₂ に成長していく過程を計算結果から検討するのが目的である。S 原子を 1-8 個、抜いた時の最も安定となったクラスタの原子構造を Fig.1 に示す。この結果よりわかることは次の通りである。結果として、S 原子は青い線を軸として対称性を保つことを優先して抜けていく。次に、エッジの S 原子から抜けていく傾向が見られた。エッジの中でも重なった S 原子は抜けやすい。この過程でエッジにおける S 原子は Mo と同平面上になろうとすることがわかった。さらに、結晶成長のメカニズムの理解のために、原子の増減の法則性を模索した。Fig.2 に S 原子を 5 個抜いたクラスタ Mo₁₀S₁₉ の構造と構造変化のモデルを示す。エッジの原子を抜いていくと S 原子は 3 つの Mo 原子の間に構造変化することがわかった。つまり、Fig.2 の右の図のように重なっていた S 原子が六角形の間に移動し、重なりが解消される。これは S 原子が抜けていくと、三角プリズム型から正 8 面体型に構造が変化していることを意味している。正 8 面体のほうが三角プリズム型よりも必要な S 原子が少なく済むことが原因である。本研究の一部は科研費(26289107)により助成を受けて行われました。また、計算の一部は東京大学物性研究所スーパーコンピュータセンターにて行われました。

[1] 岡田克也, 影島博之, 2016 年第 63 回応用物理学会春季学術講演会, 20a-P4-62.

[2] <http://azuma.nims.go.jp/software/phase>

[3] J. V. Lauritsen, Nature Nanotech. **171**, 53 (2007).

[4] 原子構造の描画:K. Momma and F. Izumi, J. Appl. Crystallogr, **44**, 1272 (2011).

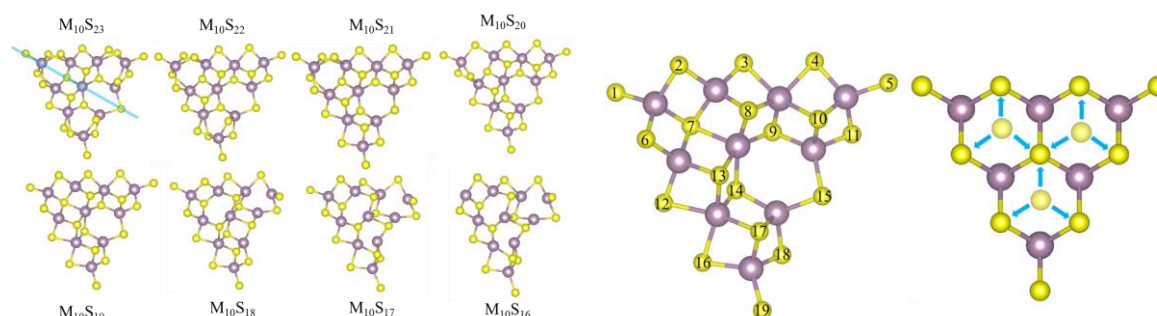


Fig.1 S_n(n=1-8)の抜けたMoS₂クラスタ Fig.2 Mo₁₀S₁₉の原子構造と正八面体MoS₂の概念図