遷移金属ダイカルコゲナイドナノチューブの構造と電子状態

Geometries and Electronic Properties of Transition Metal Dichalcogenide Nanotubes

東工大理[1]，　○大島 駿太郎[1]，豊田 雅之[1]，斎藤 晋[1]

Tokyo Tech.[1], ○Shuntaro Oshima[1], Masayuki Toyoda[1], Susumu Saito[1]

E-mail: soshima@stat.phys.titech.ac.jp

VI属遷移金属ダイカルコゲナイド（TMD）は近年、層状物質の中でも特に注目を集めている。TMD は遷移金属原子（Mo, W, …）とカルコゲン原子（S, Se, …）から構成され、1-2 eV のエネルギーギャップを持つ半導体としてオプトエレクトニクス・スピントロニクス等への応用が期待されている。また歪みに対して非常に強い物質であることが知られており、歪みによる物性制御も盛んに研究されている。

異種カルコゲン原子を含むハイブリッド TMD である MoSSe の合成が 2017 年に報告された[1]。ハイブリッド TMD は幾何学的な非対称性のために自然な曲率を持つことが予想されており、従来よりも半径の小さいナノチューブの実現が期待される。我々はハイブリッド TMD を含む TMD のジグザグ型ナノチューブ（Fig. 1）に対して一軸歪みを加えた際の電子物性への影響を、密度汎関数理論（DFT）に基づく第一原理計算によって明らかにした。加えて我々は、幾何学的な構造を精査することによって、局所密度近似（LDA）によるギャップ値と構造パラメータとの間に、ナノチューブの半径やカルコゲン原子の選択に依存しない強い相関があることを明らかにした（Fig. 2）。大きな単位胞を持つ系のギャップ値を予測する際に役立つ結果と期待される。

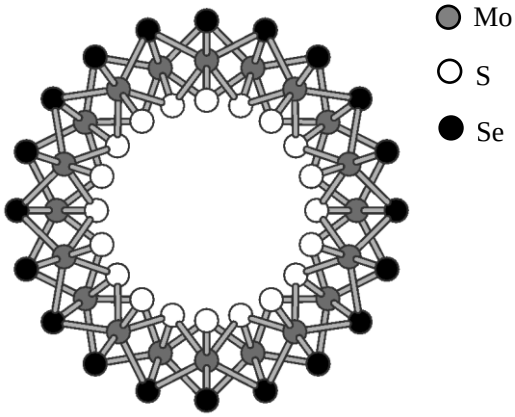


FIG. 1. Top view of (10,0) hybrid TMD nanotubes.

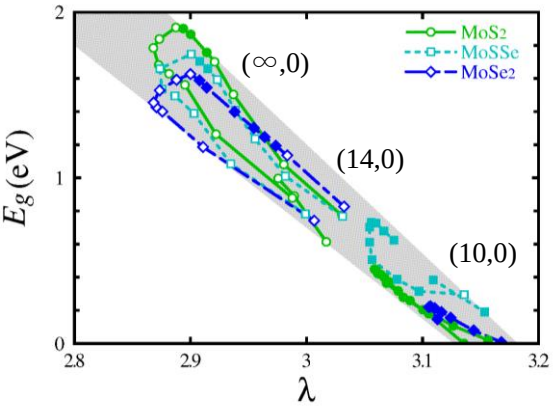


FIG. 2. Energy gap values of several TMD nanotubes on the function of geometrical parameter λ.

[1]. A. Lu, H. Zhu, J. Xiao, C. Chuu, Y. Han, M. Chiu, C. Cheng, C. Yang, K. Wei, Y. Yang, Y. Wang, D. Sokaras, D. Nordlund, P. Yang, D. A. Muller, M. Chou, X. Zhang, and L. Li, Nat. nanotechnol. **12**, 744 (2017)

© 2019年 応用物理学会