

単層 MoS₂ ナノチューブのバンドギャップクロスオーバー

Band gap crossover of single walled MoS₂ nanotubes

東大工¹, 筑波大数理², ○久間 馨¹, 丸山 実那², 岡田 晋², 千足 昇平¹, 丸山 茂夫¹

The Univ. of Tokyo¹, Univ. of Tsukuba²,

○Kaoru Hisama¹, Mina Maruyama², Susumu Okada², Shohei Chiashi¹ and Shigeo Maruyama^{1,3}

E-mail: hisama@photon.t.u-tokyo.ac.jp

原子三個分の厚みからなる単層の二硫化モリブデン (MoS₂) は、グラフェンと同様にチューブ状の構造を取ることが可能である。この MoS₂ ナノチューブ (MoS₂ NT) は、出発となる単層 MoS₂ が直接ギャップの半導体であることから、本質的に半導体であることが知られている。他方、バンドエッジ近傍の詳細な電子状態については、MoS₂ の電子構造が極めて歪みに対して敏感であることから、zigzag を除く全ての螺旋度において間接ギャップを有することが予想されている [1, 2]。しかし、MoS₂ NT の曲率の増加に伴い格子系の歪みは減少することから、十分大きな直径を有する MoS₂ NT は、孤立単層 MoS₂ の電子状態を反映し、直接ギャップの半導体となることが期待される。本研究では、間接-直接バンドギャップクロスオーバーについて、armchair 螺旋度を有する MoS₂ NT に着目し、そのバンド構造の直径依存性を密度汎関数理論に基づく全エネルギー計算により解明した。

計算の結果、MoS₂NT の価電子帯の上端近傍の電子構造は、直径の増加に強く依存することが明らかになった。すなわち、価電子帯上端の Γ 点の固有値と、MoS₂ の価電子帯端の K 点が畳み込まれる $k = 2\pi/3$ 近傍の固有値の差が、MoS₂ NT の直径の増加に伴い減少し、単層の MoS₂ の価電子帯端の構造に漸近する [Figure 1 (a)-(d)]。このことは、直径の大きな MoS₂ NT において、K 点起因の直接ギャップからの蛍光発光が観察できることを示唆している。

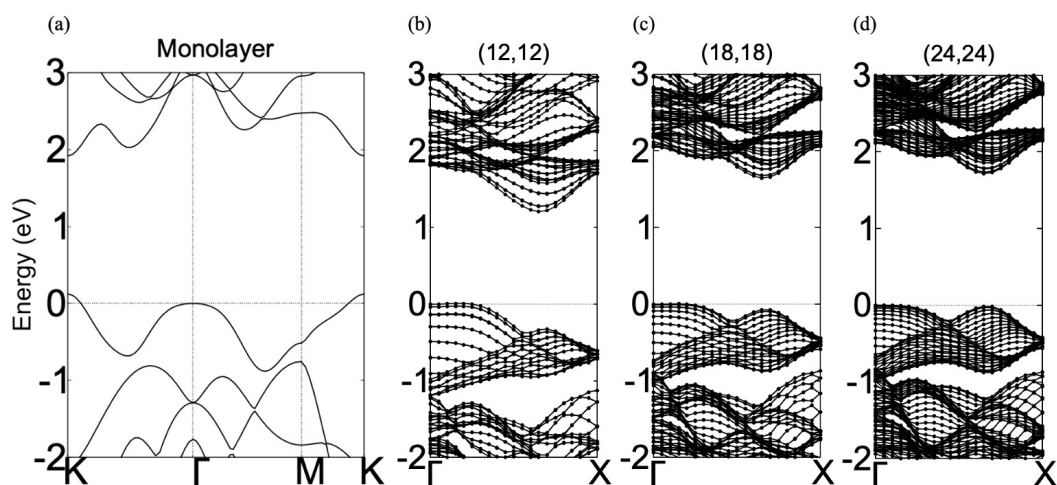


Figure 1: Electronic structure of (a) monolayer MoS₂, (b) (12,12), (c) (18,18) and (d) (24,24) MoS₂ NT, whose diameters are 2.1 nm, 3.2 nm and 4.2 nm, respectively.

[1] G. Seifert, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 146 (2000).

[2] D. -B. Zhang, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 109902 (2011).