

MoS₂ 二層膜のバンドギャップのツイスト角依存性に関する理論的研究

Theoretical Study on Twist-angle Dependence of Energy Bandgap of MoS₂ Bilayer

物材機構 °奈良 純, 耿 文通, 大野 隆央

National Institute for Materials Science, °Jun Nara, Wentong Geng, Takahisa Ohno

E-mail: NARA.Jun@nims.go.jp

遷移金属ダイカルコゲナイド (Transition Metal Dichalcogenide, TMDC) は弱いファンデルワールス (vdW) 相互作用で積層する 2 次元系物質である。TMDC には遷移金属とカルコゲンの組み合わせにより多数の種類があり、また、それらを組み合わせて積層させる自由度から様々な物性のコントロールが期待され積極的に研究が進められている。さらに近年では、積層する層同士を面方向に回転 (ツイスト) させることによる物性探索が行われている。最近、MoS₂ に対してツイスト角を変えることによってバンドギャップが変わることが報告された[1]。本研究では、そのバンドギャップ変化について理論的に調べた。

計算には密度汎関数法・擬ポテンシャル法に基づいた第一原理電子状態計算プログラム PHASE/0[2]を用いた。汎関数には PBE を用いた。vdW 相互作用は DFT-D2 手法を用いて考慮した。

図 1 に構造例を示す。セルサイズは $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ で、ツイスト角は 21.8 度である。周期境界条件を満たすツイスト構造はセルサイズの小さい順から $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ (21.8 度)、 $\sqrt{13} \times \sqrt{13}$ (27.8 度)、 $\sqrt{19} \times \sqrt{19}$ (13.2 度)、 $\sqrt{31} \times \sqrt{31}$ (17.9 度)・・・となる。図 2 にツイスト角 (横軸) に対するバンドギャップ、層間距離をプロットした。バンドギャップ、層間距離が同じように変化している様子が分かる。バンドギャップの変化は層間距離の変化に伴う層間の波動関数の重なりが変化することによって起こると考えられる。

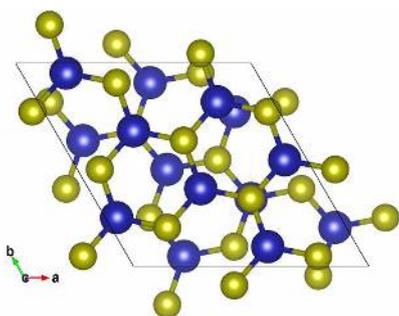


図 1 $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 構造

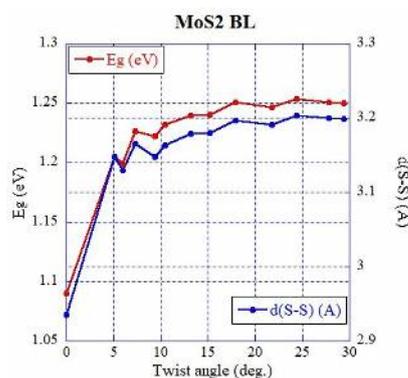


図 2 ツイスト角とバンドギャップ・層間距離

【謝辞】本研究は、防衛装備庁が実施する安全保障技術研究推進制度 JPJ004596 の支援を受けたものである。計算には物材機構の材料数値シミュレータ及び海洋研究開発機構の地球シミュレータ、Data Analyzer システムを使用した。

[1] M. Liao et al, Nat. Comm. **11**, 2153(2020).

[2] T. Yamasaki et al, Comp. Phys. Comm. **244**, 264 (2019). Download site: <https://azuma.nims.go.jp>