一軸歪み印加下における MoS_2 ナノリボンの力学特性と電気特性

Mechanical and electric properties of MoS_2 nanoribbons under uniaxial strain

筑波大数理 ○岡田 晋，丸山 実那，高 燕林

Univ. of Tsukuba, °Susumu Okada, Mina Maruyama, Yanlin Gao

E-mail: sokada@comas-tsukuba.jp

グラフェンや遷移金属カルコゲン化合物等の原子層物質は、２次元的原子間結合に起因して、層内ならびに層鉛直方向に対しての変形の自由度がある。これらの性質から、原子層物質は柔軟なデバイスへの応用を可能としている。なかでも遷移金属カルコゲン化合物は、有限のバンドギャップを有することから、柔軟性を有する半導体デバイスの構成物質として注目を集めている。遷移金属カルコゲン化合物の反転対称性を有しない二元系蜂の巣格子では、伸長や圧縮といった構造歪みに対して極めてユニークな物性現象の発現が期待される。本研究では単層二硫化モリブデンに注目し、密度汎関数理論を用いて、その力学特性と電気的特性の伸長並びに圧縮歪みに対する応答をしらべた。

二硫化モリブデンの力学特性と電気的特性の伸長並びに圧縮歪みに対する応答を調べるために、ここでは幅 2nm のアームチェア端からジグザグ端までの５種類の端構造を有するナノリボン構造を採用した。このナノリボンに対してリボン軸にそって±6%の伸長ならびに圧縮歪みを印加して構造解析と電気物性の解析を行なった。計算の結果、カイラル形の端を有するリボンにおいては 6%の圧縮印加により端の原子サイトの再構築が生じ、４員環が構築されることが明らかになった。他方、ジグザグならびにアームチェア端は圧縮／伸長に対して極めて安定であることが明らかになった。次にリボン両端間の電位差の歪み依存性を解析したところ、ジグザグ端を有するリボンにおいて、伸長と圧縮により符号の異なる電位差、すなわち圧電効果が期待されることが明らかになった。他方、アームチェアならびにカイラルリボンでは小さな歪み領域では圧電効果が生じないことが明らかになった。