

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	
Title(English)	Geometries and Electronic Properties of Transition Metal Dichalcogenide 2D Layers and Nanotubes: A First-Principles Study
著者(和文)	大島駿太郎
Author(English)	Shuntaro Oshima
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第11365号, 授与年月日:2020年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:齋藤 晋,村上 修一,笹本 智弘,橋詰 富博,西田 祐介
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11365号, Conferred date:2020/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	論文要旨
Type(English)	Summary

(博士課程)
Doctoral Program

論文要旨

THESIS SUMMARY

系・コース： 物理学 系
Department of, Graduate major in 物理学 コース
学生氏名： 大島 駿太郎
Student's Name

申請学位(専攻分野)： 博士 (理学)
Academic Degree Requested Doctor of
指導教員(主)： 斎藤 晋
Academic Supervisor(main)
指導教員(副)：
Academic Supervisor(sub)

要旨 (和文 2000 字程度)

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters)

二次元ナノ材料は近年、合成技術の向上によって実用化が現実的となってきており、著しい注目を集めている。それらの中でも特にグラフェンはフェルミレベルにバンドが線形分散を持つ特異で魅力的な性質を持つことが知られている。しかしながら、グラフェンはギャップレスな金属的性質を示すため、半導体デバイスとしての応用を考える上では課題が多い。これに対し、我々の研究対象とするVI属の遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD) は同じく二次元ナノ材料でありながら、ピュアな状態で半導体としての性質を示すことが知られている。特に平面単層では1から2eV程度の直接遷移ギャップとなり、これは可視光の光電子デバイスへの応用にも期待される。TMDは歪みに対しても興味深い振る舞いを見せることが知られている。TMD層の電子構造は歪みに対して大きく変化することが示されている。TMDのナノチューブ構造や、複数のカルコゲンを含む平面単層TMDが合成されているにもかかわらず、それらの幾何構造や電子構造の研究は十分になされていない。本論文では、歪みのくわえられた遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD) の二次元層およびナノチューブにおける幾何構造と電子構造を第一原理計算によって研究した結果を報告する。

本論文ではまず、ジグザグ型 MoXY ($X, Y = \text{O, S, Se}$) ナノチューブの詳細な幾何構造を明らかにし、それらのエネルギー論を論じる。我々はさらに、それらのナノチューブに±15%の歪みを加えた場合のギャップ値への影響を調べた。特に酸素を含む TMD は歪みに対して高い感度を示し、広い範囲で線形な振る舞いを見せることから、歪みセンサーへの応用が期待される。

我々は続いて平面単層の TMD に対して一軸歪みを加えた系を調べ、その結果とナノチューブの結果を比較した。詳細に調べた幾何構造とギャップ値の関係に注目することによって、我々はギャップ値と非常に強い相関を持つ幾何学パラメータを構成した。驚くべきことに、酸素を含まない全ての TMD ナノチューブと、酸素を含まない全ての平面単層 TMD が、歪みの大きさによらずに同一の関係式にのることが判明した。したがって、この関係式を用いることによって $\text{MoS}_x\text{Se}_{2-x}$ のギャップ値を非常にコストの低い計算量で予測することが可能になると期待される。

我々は、平面単層 TMD の二種類の構造、HタイプとTタイプの類似から、TMD ナノチューブにも二種類のものが構成できることに気づき、それらが構造的に分離できるかどうかに興味を持ち、TタイプTMDを初期構造とした構造最適化を行った。その結果、予想に反して我々は一連の新しい構造群を発見した。それらの中でも $\{7, 3\}\text{MoS}_2$ は Tタイプ様 $(10, 0)$ ナノチューブからの最適化で得られた構造の中で最も低い全エネルギーを持つことが判明した。この全エネルギーは従来の $(10, 0)$ ナノチューブよりも低い。我々はこの $\{7, 3\}$ を一般化した $\{n-3, 3\}$ 構造を考え、そのエネルギー論を簡単なモデルによって議論した。 $\{n-3, 3\}$ 構造の電子構造の計算を $n=10$ および $n=14$ に対して行い、ギャップ値が n に対してほとんど変化しないという興味深い結果を得た。この $\{n-3, 3\}$ 構造の幾何構造、電子物性を明らかにするためにさらなる研究が望まれる。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note：Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).

(博士課程)
Doctoral Program

論文要旨

THESIS SUMMARY

系・コース： Department of, Graduate major in	物理学 物理学	系 コース	申請学位(専攻分野)：博士 Academic Degree Requested Doctor of	(理学)
学生氏名： Student's Name	大島 駿太郎		指導教員(主)： Academic Supervisor(main)	斎藤 晋
			指導教員(副)： Academic Supervisor(sub)	

要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words)

We study geometries and electronic properties of transition metal dichalcogenide (TMD) 2D layers and nanotubes by using the local density approximation in the framework of the density-functional theory.

First, we report the geometric and electronic properties of zigzag MoXY (X, Y = O, S, and Se) nanotubes. We explain that the geometries of zigzag TMD nanotubes can be fully expressed using six independent geometrical parameters, and we give the optimized parameter values for series of MoXY nanotubes. We show that the MoXY nanotubes with smaller chalcogen elements inside (MoSSe, MoOS, and MoOSe) have a preferable natural radius. We further reveal the geometric and electronic properties of these MoXY nanotubes under the uniaxial strains up to $\pm 15\%$. We find that the mixed-chalcogen TMD nanotubes have larger fundamental gap values compared to TMD nanotubes with single chalcogen species regardless of the value of the strain. The gap properties of all studied oxygen-included TMD nanotubes (MoO₂, MoOS, and MoOSe) exhibit higher strain sensitivity in broad strain region, which will be prospective for applications for mechanical devices such as strain sensors.

Next, we focus on the geometries and the electronic properties of planar MoXY under biaxial and uniaxial strains. We compare these results with MoXY nanotubes. By carefully examining the relationships between the actual geometries and the gap values, we find a global strong correlation between fundamental gap values and some combined geometrical parameters. Because all MoXY (X, Y = S, and Se) nanotubes studied and all planar MoXY (X, Y =, S, and Se) studied are confirmed to align in this single relationship regardless of strains, we consider that this relationship will enable one to predict the gap values of MoXY layered materials with much less computational resources.

We report some new MoS₂ nanostructures obtained in the optimization from the T-type-like MoS₂ nanotubes. The representative of such new structures is the {7,3} MoS₂, which achieves the lowest total energy in the optimization from the T-type-like (10,0) MoS₂ nanotube. We describe the detailed geometry of {7,3} MoS₂, and construct the generalized {n - 3,3} geometries. We analyze the energetical stability of these {n - 3,3} MoS₂ by assuming a simple energetic model. We also present the band structure of {n - 3,3} MoS₂ for n=10 and n=14. The gap values of {n - 3,3} MoS₂ are found to be almost constant for n.

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note: Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1 copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).