

(t-C₄H₉)₂S₂ を用いた MoS₂ 薄膜作製および S/Mo 比の硫化条件依存 Fabrication of MoS₂ thin film using (t-C₄H₉)₂S₂ and sulfurization condition dependence on S/Mo ratio

○石原 聖也^{1,4}, 日比野 祐介¹, 澤本 直美¹, 大橋 匠², 松浦 賢太郎²,

町田 英明³, 石川 真人³, 須藤 弘³, 若林 整², 小椋 厚志¹

明治大¹, 東工大², 気相成長(株)³, 学振特別研究員⁴

○S. Ishihara^{1,4}, Y. Hibino¹, N. Sawamoto¹, T. Ohashi², K. Matsuura²,

H. Machida³, M. Ishikawa³, H. Sudoh³, H. Wakabayashi², and A. Ogura¹

Meiji Univ.¹, Tokyo Tech², Gas-phase Growth Ltd.³, JSPS Research Fellow⁴

E-mail: s_ishihara@meiji.ac.jp

背景:遷移金属ダイカルコゲナイドの一種である MoS₂ はディスプレイ用途として優れた特性を有し、大面積・低温・低不純物成膜手法での MoS₂ 薄膜作製は次世代 LCD 実現に貢献すると期待される。これまでに我々は、高温スパッタ MoS₂ 薄膜に対し有機硫黄原料(t-C₄H₉)₂S₂ を用いた硫化アニールを施すことで膜中硫黄欠損を補填し、S/Mo 比改善により薄膜の電気特性が向上することを示してきた[1]。図 1 に (t-C₄H₉)₂S₂、および一般的な硫黄原料である S 粉末、H₂S の蒸気圧曲線を示す[2]。(t-C₄H₉)₂S₂ は S 粉末と比較し低温でも高い蒸気圧を有するため生産性に優れ、また H₂S と比較し毒性や爆発性などの危険性がない。本研究では、(t-C₄H₉)₂S₂ の硫化反応速度の温度依存、雰囲気依存について調査したため報告する。

実験: MoS₂ 薄膜は電子ビーム蒸着金属 Mo 薄膜を(t-C₄H₉)₂S₂ で硫化することで作製した。硫化温度は 200-440°C、雰囲気は N₂、H₂ と変化させ、各条件につき膜中の S/Mo 比を XPS により算出することで硫化反応速度を比較した。また密度汎関数理論(DFT)により生成エンタルピー変化を求めることで(t-C₄H₉)₂S₂ の分解過程を調査した。基底関数は B3LYP/3-21G、計算プログラムは PC GAMESS/Firefly[3, 4]を用いた。

結果: 硫化温度上昇に従い S/Mo 比が増加し、N₂ 雰囲気中では 440°C で S/Mo=2.0 となることが確認された。また H₂ 雰囲気中では低温でも反応が進行し、400°C で S/Mo=2.0 となることが確認された。DFT により、H₂ 雰囲気中で生成エンタルピー変化が最小となり、(t-C₄H₉)₂S₂ の分解が促進されることが確認された。

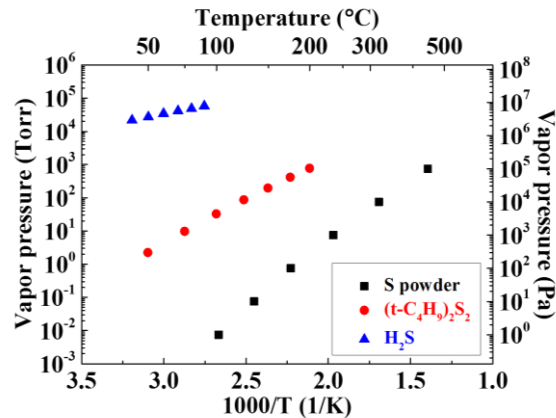


Fig. 1 Temperature dependent vapor pressures of (t-C₄H₉)₂S₂, S powder, and H₂S.

参考文献:

- [1] S. Ishihara, *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 04EJ07 (2015). [2] R. Hultgren, *et al.*, Metals Park, American Society for Metals, Ohio 1973. [3] A. A. Granovsky, Firefly version 8. [4] M. W. Schmidt, *et al.*, J. Comput. Chem. **14**, 1347-1363 (1993).