

WS₂/MoS₂ ヘテロ構造における発光ピークの起源 Origin of photoluminescence peaks in WS₂/MoS₂ heterostructures

首都大理工¹, 物材機構²

○齊藤 哲輝¹, 小林 佑¹, 渡邊 賢司², 谷口 尚², 真庭 豊¹, 宮田 耕充¹

Tokyo Metropolitan Univ.¹, NIMS²

○Tetsuki Saito¹, Yu Kobayashi¹, Kenji Watanabe², Takashi Taniguchi²,

Yutaka Maniwa¹, Yasumitsu Miyata¹

E-mail: ymiyata@tmu.ac.jp

遷移金属ダイカルコゲナイド(TMDC)の積層ヘテロ構造は、多様な光・電気特性より、近年大きな注目を集めている。例えば、異なる層に電子とホールが存在する層間励起子を形成し、40 ナノ秒ほどの長いバレー寿命をもつことが報告されている[1]。また、我々のグループでは、hBN 上に合成した高品質な WS₂/MoS₂ ヘテロ構造が 1.4~1.7eV の間に新たな 3 つの発光ピークを持つことを報告してきた[2]。しかし、これらの発光ピークの起源は未だ十分に理解されていない。本研究では、2 層系および 3 層系のヘテロ構造を合成し、発光スペクトルの変化と第一原理計算で得られたバンド構造を比較し、発光ピークの起源について研究を進めてきた。

2、3 層系のヘテロ構造は、二段階の化学気相成長(CVD)法により合成した(Fig.1a)。これらのヘテロ構造では、2 層系と同様に 3 層系においても、1.4~1.7eV の間に 3 つのピーク分離を示す。特に、1.65eV の発光エネルギーはほとんど層数依存がないことを確認した(Fig.1b)。第一原理計算結果(Fig.1c,d)との比較より、この 3 つのピークは直接および間接遷移に起因すると考えられる。特に、1.65eV のピークは、層間励起子に相当する MoS₂ 由来の伝導帯端から WS₂ 由来の価電子帯端への遷移と解釈できる。本成果は、多層を含む多くのヘテロ構造での層間励起子形成の可能性を示唆しており、原子層の励起子研究における新たな材料系の開拓に繋がると期待される。

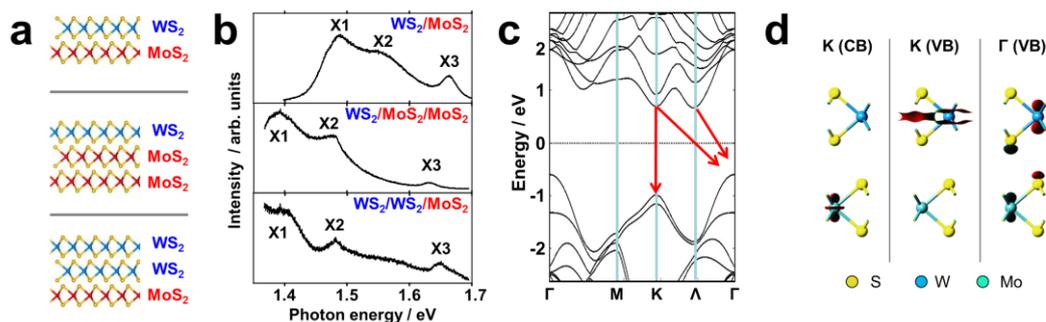


Fig.1 (a) Structure models and (b) PL spectra of WS₂/MoS₂, WS₂/MoS₂/MoS₂, and WS₂/WS₂/MoS₂ vertical heterostructures. (c) Band structure and (d) wavefunction at K point of conduction band (CB) and valence band (VB), and at Γ point of VB of the WS₂/MoS₂ heterostructure.

[1] P. Rivera, *et al.*, Science 351, 688 (2016), [2] 齊藤哲輝, 他, 第 63 回応用物理学会春季学術講演会