

プラズマ照射を用いた 1T 相 MoSe₂ 薄膜の形成

Synthesis of 1T-phase MoSe₂ thin films by plasma irradiation

埼玉大学院理工 志田 知洋、上野 啓司

Saitama Univ. Tomohiro Shida and Keiji Ueno

E-mail: t.shida.392@ms.saitama-u.ac.jp

【序論】 二硫化モリブデン(MoS₂)に代表される 6 族の層状遷移金属ダイカルコゲナイド(TMDC)は、その二次元構造に起因する特異な物性に興味をもたれ、長年研究されてきた物質である。6 族層状 TMDC の多くは安定な半導体相と準安定な半金属相を有するが、近年、その相を切り替える相転移手法が数多く提案されている。その中で、H₂/Ar 混合ガスプラズマの照射により、MoS₂ が半導体相(Hexagonal : H 相、三角プリズム型)から半金属相(Trigonal : T 相、八面体型)に相転移することが報告された⁽¹⁾。この手法はインターカレーション法や電子ビーム照射法といった他の手法に比べ、大面積かつ高い収率での相転移が期待される。本研究では、MoS₂ と同じ結晶構造を有する二セレン化モリブデン(MoSe₂)の薄膜を化学気相成長(CVD)法によって合成し、H₂/Ar 混合ガスプラズマを照射することで、相転移の可否を検証した。

【実験】 [MoSe₂ 薄膜の CVD 成長] H₂/Ar をキャリアガスとして、前駆体の三酸化モリブデン(MoO₃)と単体セレンを、横型管状炉の石英炉心管内に設置した SiO₂ 膜(285 nm)付き p++Si 基板の上に導入し、薄膜を成長した。[MoSe₂ 薄膜へのプラズマ照射と評価] 約 30 Pa まで真空引きした後、体積比 5:95 の H₂/Ar 混合ガスを用いた RF プラズマ装置で出力 20 W、混合ガス流量 50 sccm のもと、10 秒間プラズマを照射した。相転移の評価はラマン分光、フォトルミネッセンス(PL)、X 線光電子分光(XPS)測定により行った。また、MoSe₂ の H 相と T 相の物性について、Quantum ESPRESSO による密度汎関数法(DFT)計算⁽²⁾も行い、実験と比較した。

【結果・考察】 DFT 計算結果を Fig. 1 に示す。H 相(Hexagonal)はバンドギャップを有する半導体の電子帯構造であるが、T 相(Trigonal)は半金属である。次に XPS 測定結果を Fig. 2 に示す。プラズマ照射後は Mo 3d のピークが負にシフトし、ピーク幅が増加していることから、H 相とは異なる相の生成が示唆される。最後に PL スペクトルを Fig. 3 に示す。プラズマ照射前は 800 nm 付近にピークが確認できたが、プラズマ照射後はピークが消失している。これらの実験結果は、DFT 計算から半金属と予測される T 相の MoSe₂ の形成を裏付けており、プラズマ照射によって相転移が起こることが確認された。

【参考文献】 (1) Chithra H. Sharma *et al.*, *Sci. Rep.*, **8**, 12463 (2018).

(2) P. Giannozzi *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter*, **21**, 395502 (2009).

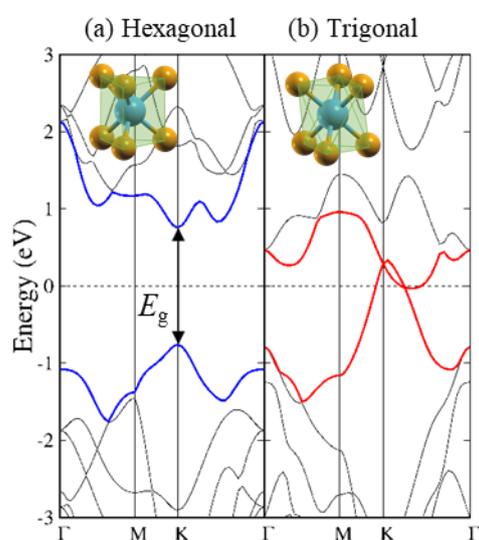


Fig. 1 Calculated band structures of (a) hexagonal and (b) tetragonal MoSe₂ monolayers. The dotted line represents the Fermi level.

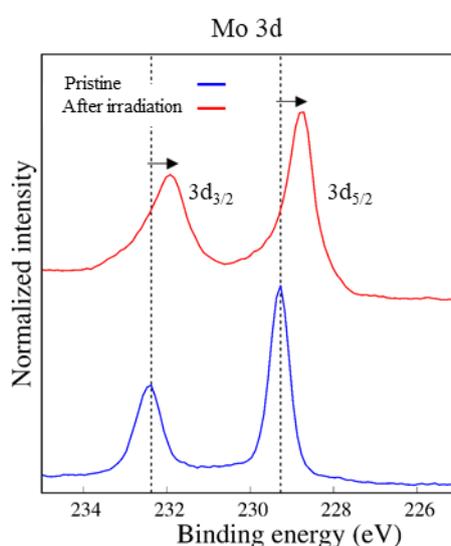


Fig. 2 Changes in Mo 3d core level excitation XPS spectra of pristine and plasma-irradiated MoSe₂ thin films.

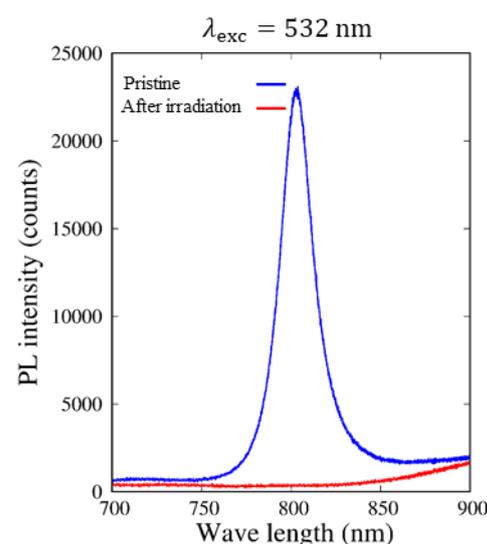


Fig. 3 Changes in PL spectra of pristine and plasma-irradiated MoSe₂ thin films.