

二軸歪み単層遷移金属ダイカルコゲナイドの光学特性

Optical properties of biaxially tensile-strained transition metal dichalcogenide monolayers

東京都市大学¹ 岩熊高志¹, 星裕介¹

Tokyo City Univ.¹ T. Iwakuma¹, Y. Hoshi¹

E-mail: g2181211@tcu.ac.jp

単層遷移金属ダイカルコゲナイド(1L-TMD)は、優れた機械的特性を持つことから歪みエンジニアリングに適した原子層材料である。1L-TMD への結晶歪み導入は、バンド構造変調によりその光学特性が著しく変化することが知られている[1,2]。これまで、1L-TMD に一軸方向へ機械的応力を印加した場合の光学特性調査が広くおこなわれてきた。本研究では、PDMS を利用することで 1L-TMD に二軸性引っ張り歪みを導入し、これによる光学特性変化について調べたので報告する。

まず、MoS₂ のバルク単結晶を用いて機械的剥離法で PDMS シート上に単層 MoS₂ を形成した。この試料を室温から 140 °C まで加熱しながら PL 測定を行った。加熱により PDMS シートが熱膨張することで、単層 MoS₂ が引っ張られ、結晶に二軸歪みが導入される[3]。また Quantum Espresso を用いて、無歪みの場合と歪み量 0.5 % の場合の単層 MoS₂ のバンド計算をおこなった。

図 1 に温度が 25, 80, 140 °C の場合の PL スペクトルを示す。室温の場合、中性励起子発光(X₀)による PL ピークが 1.88 eV 付近に見られ、作製した試料が単層 MoS₂ であることが確認できる。またピーク分離すると、その低エネルギー側にも PL ピーク(X₁)が存在していることが分かる。一方、温度を 140 °C に上昇させると、X₀ ピークはレッドシフトしながら強度の増大が見られることが分かった。温度上昇による PL スペクトルの変化が MoS₂ 中への二軸歪み導入であることを示すため、単層 MoS₂ のバンド計算を行った。図 2(a)と 2(b)に無歪みと歪み率 0.5 % の場合の単層 MoS₂ のバンド構造を示す。二軸歪み導入により、K 点における伝導帯下端と価電子帯上端のエネルギー差が減少している。また、伝導帯の Λ 点バレーのエネルギーが上昇しており、二軸歪みが導入されることで K 点バレーにおける電子占有率が増加すると考えられる。これらの結果は、図 1 に示す PL スペクトル変化が、二軸性歪み導入によるバンド構造変調に起因していることを示唆している。当日は、その他の TMD 材料に関して、歪みとバンド構造の関連からそれらの発光特性変化を示す。

[1] E. Scalise et al., Nano Res. **5**, 43 (2011). [2] H.J. Conley et al., Nano Lett. **13**, 3626 (2013).

[3] G. Plechinger et al., 2D mater. **2**, 015006 (2015).

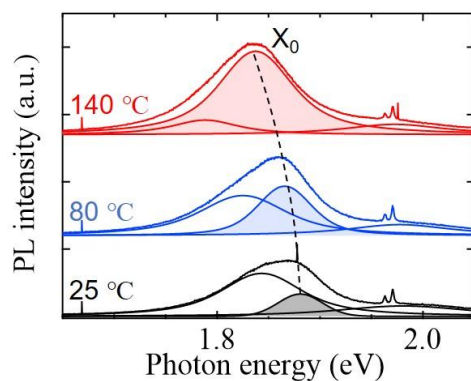


Figure 1. PL spectra of the 1L-MoS₂ on PDMS at 25 (black), 80 (blue), and 140 °C (red).

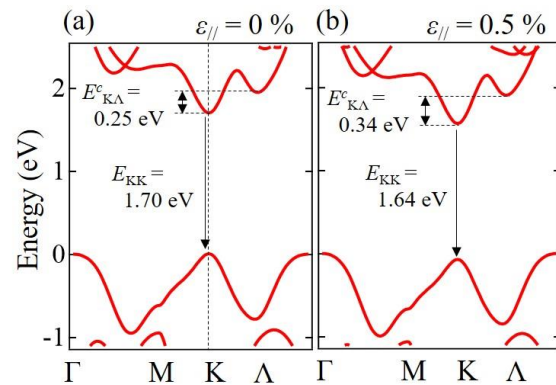


Figure 2. Band structure of 1L-MoS₂ with a tensile strain of (a) $\varepsilon_{//} = 0$ and (b) $\varepsilon_{//} = 0.5$ %, respectively.