

## X線照射による MoS<sub>2</sub> の結晶相転移機構解明に向けた研究

### Towards the Mechanism of Crystal Phase Transition of MoS<sub>2</sub> Under X-ray Irradiation

東大院工<sup>1</sup>, 宇宙研<sup>2</sup> ○谷澤 涼太<sup>1,2</sup>, 小林 大輔<sup>2</sup>, 廣瀬 和之<sup>1,2</sup>

UTokyo<sup>1</sup>, ISAS<sup>2</sup> ○Ryota Tanizawa<sup>1,2</sup>, Daisuke Kobayashi<sup>2</sup>, and Kazuyuki Hirose<sup>1,2</sup>

E-mail: ryota-tani18@g.ecc.u-tokyo.ac.jp, hirose@isas.jaxa.jp

**[はじめに]** MoS<sub>2</sub> 2H相は半導体で広いバンドギャップ、化学的安定性、耐熱性等を有しており、またSiと比べて薄膜化による移動度の減少が緩和されることから、MOSFET 応用への関心が高まっている。一方、MoS<sub>2</sub> 1T相は金属で、2H相の10<sup>7</sup>倍以上の伝導率を有することが報告されており、その様々な性質から触媒、スーパーキャパシタ、バッテリー、センサー等多くの分野における応用が期待されている [1]。1T相の作製方法の一つとして、自然界で存在する2H相を相転移させる方法がある。相転移の手法として、単層 MoS<sub>2</sub> (0.65 nm)/SiO<sub>2</sub> に対する電子線照射 [2]や、バルク MoS<sub>2</sub> (3 nm)/SiO<sub>2</sub> (400 nm)/Si に対するX線照射 [3]などが報告されているが、いまだ相転移のメカニズムは解明されていない。メカニズムを解明して相転移が起きる有効な条件を見出すことは、1T-MoS<sub>2</sub>の作製のために必要である。そこで、本研究ではX線照射によるMoS<sub>2</sub>の結晶相転移に着目し、相転移のメカニズムの解明を目指した。

**[実験]** MoS<sub>2</sub> (3 nm)/SiO<sub>2</sub> (400 nm)/Si 試料にX線を照射して相転移が確認された際のXPSスペクトルの、2H/1T相のMo 3dピークの半値幅とピーク結合エネルギーのシフトについて、詳細に評価した。さらに、MoS<sub>2</sub>単結晶をスコッチテープで剥離して作成した下地のないMoS<sub>2</sub>薄膜にX線を照射することで相転移に対する下地SiO<sub>2</sub>層の影響を検討した。

**[結果と考察]** 解析結果より、X線照射時間とともに1T相割合は増加することが確認できた。Fig. 1, 2に半値幅 (FWHM) の時間変化とピーク結合エネルギーのシフトをそれぞれ示す。Fig. 1より半値幅は、2H相 (青丸) では1時間から10時間において減少し、10時間から40時間においてほぼ一定であることが分かり、1T相 (橙丸) では照射後1時間から21時間において大きくなっていき、21時間から40時間においてほぼ一定である。このことから、2H相では膜中の電界は照射後1時間から10時間において小さくなっていき、10時間から40時間においてほぼ一定であること、一方1T相では膜中の電界は照射後1時間から21時間において大きくなっていき、21時間から40時間においてほぼ一定であることが考えられる。またFig. 2から、2H相 (青丸) は下地のSiO<sub>2</sub> (Siピーク 灰丸) よりピークシフトが大きく、1T相 (橙丸) はSiO<sub>2</sub>よりピークシフトが小さいことが分かる。この結果にFig. 1の考察を加味すると、2H相は時間とともに、2H相のSiO<sub>2</sub>下地側の界面に、界面ダイポールが増大した可能性、一方1T相は時間とともに負に帯電した可能性が示唆される。

さらに、SiO<sub>2</sub>下地がないMoS<sub>2</sub>薄膜 (~3.2 nm) に対して8時間X線を照射し続けたが、相転移は確認されなかった。この結果より、相転移を生じさせるためには、SiO<sub>2</sub>下地が必要であることが示唆される。したがって、2H/SiO<sub>2</sub>界面が相転移の起点になっていると考えられる。そこで、①2H/1T構造と②1T/2H構造の電界分布を計算して、Fig. 1,2を再現するのは①2H/1T構造であることの確認を進めている。この結果も用いて当日議論したい。

**[参考文献]** [1] Jayabal, *Materials Today Energy*, **10**, 264 (2018).

[2] Lin, *Nat. Nanotechnol.*, **9**, 391 (2014).

[3] Matsuzawa, *JSAP Spring Meeting* (2021).

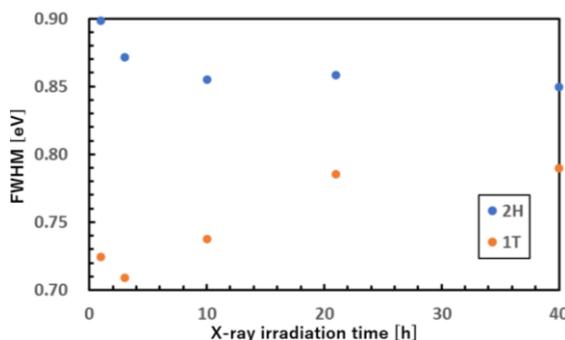


Fig. 1. Dependence of full width at half maximum (FWHM) of the Mo 3d peak on X-ray irradiation.

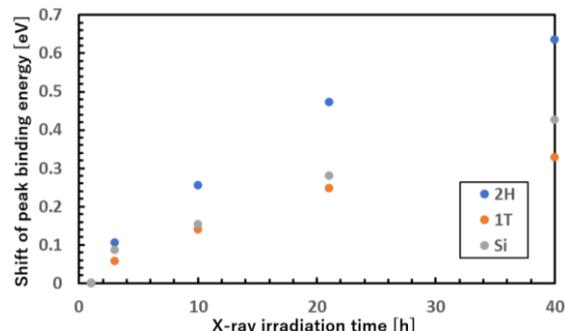


Fig. 2. Shift of peak binding energy of Mo 3d peak with X-ray irradiation time.