## 多層 MoS<sub>2(1-x)</sub>Te<sub>2x</sub> 混晶における物理構造と電子構造の関連に関する考察

The relationship between the c-axis lattice spacing and

the valence band maximum in multi-layer  $MoS_{2(1-x)}Te_{2x}$  alloy

°日比野祐介<sup>1,2</sup>,山崎浩多<sup>1</sup>,橋本侑祐<sup>1</sup>,町田英明<sup>3</sup>,石川真人<sup>3</sup>,須藤弘<sup>3</sup>,若林整<sup>3</sup>,小椋厚志<sup>1,5</sup>

(1. 明治大学, 2. 学振特別研究員, 3. 気相成長株式会社, 4. 東工大, 5. 明大 MREL)

°Y. Hibino<sup>1</sup>, K. Yamazaki<sup>2</sup>, Y. Hashimoto<sup>1</sup>, H. Machida<sup>3</sup>, M. Ishikawa<sup>3</sup>, H. Sudoh<sup>3</sup>,

H. Wakabayashi<sup>4</sup>, and A. Ogura<sup>1,5</sup>

(1. Meiji Univ., 2. JSPS Research Fellow, 3. Gas-Phase Growth Ltd., 4. Tokyo Tech, 5. MREL)

## E-mail: yusuke hibino@meiji.ac.jp

**背景**: 遷移金属ダイカルコゲナイド(TMD)において近年盛んに研究が進められている混晶はその応用の幅を拡大することが期待される。一方で、混晶における電子構造と組成の関連性は特に多層材料において未だ不明瞭な点が多い. これまで我々は MoS<sub>2(1-x)</sub>Te<sub>2x</sub>混晶の作製とその評価を行いカルコゲン組成による物理構造の変化やバンド構造の制御に関して報告をしてきた[1]. 本発表では、混晶の物理構造と電子構造、特に格子定数と価電子端エネルギーの関連性に関して報告する.

**実験手法:**  $MoS_{2(1-x)}Te_{2x}$  混晶は  $MoS_2$  と  $MoTe_2$  の共スパッタ, さらに S もしくは Te 雰囲気下の熱処理によって作製した. 格子面間隔の評価には Cu- $K\alpha$  線( $\lambda$  = 1.5406 Å)を用いた X 線回折(XRD)測定を,価電子帯端の評価には Al- $K\alpha$  線(1486.6 eV)を用いた X 線光電子分光法(XPS)を利用した[1].

**結果**: 異なる Te 濃度における格子面間隔を図1に,002 格子面間隔と価電子帯端のエネルギーの関係を図1に示す。多層 TMD において層同士を結合するのはファンデルワールス力であるが,

ファンデルワールス力は接触する 2 面の表面粗さによって変動することが報告されている[2]. TMD 混晶においては層の表面にあるのはカルコゲン原子であり、S と Te の原子半径に差があることからカルコゲン組成に応じて表面粗さは大きくなりそれにより層間距離は大きくなると考えられる. また価電子帯端のエネルギーもカルコゲン組成に依存する[1]. つまり図1に示した結果は002 格子面間隔, 価電子帯端のエネルギーがカルコゲンの種類と濃度を介してほぼ線形的に相関していることを示唆している.

**謝辞:** 本研究は JST, CREST JPMJCR16F4 及び JSPS 科研 18F22879 の支援を受けたものである。

引用: [1] Y. Hibino, *et al.*, ECS J. Solid State Sci. Technol. **9**, 093018 (2020).

[2] 增田弘昭, 電子写真学会誌 36 巻, 169 (1997).

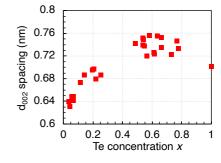


Fig. 1  $d_{002}$  spacing for different Te concentration.

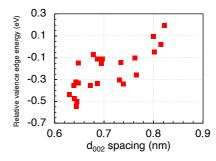


Fig. 2 The relationship between  $d_{002}$  spacing and valence band energy.