

MoS₂/金属界面での圧電分極形成位置の特定

Identification of the position of piezoelectric polarization at MoS₂/metal interface

東大工¹, 名古屋大理² ○梅田 雅也¹, 東垂水 直樹¹, 北浦 良², 西村 知紀¹, 長汐 晃輔¹

○M. Umeda¹, N. Higashitarumizu¹, R. Kitaura², T. Nishimura¹, K. Nagashio¹

E-mail: m_umeda@ncd.t.u-tokyo.ac.jp

【緒言】 MoS₂は奇数層において結晶構造に中心対称性を持たず、単層にて最も大きな圧電特性を示すことが報告^[1]されており、極限スケールでの基礎物性の観点のみならずナノ環境発電素子として期待されている。典型的な圧電セラミクスと異なり、MoS₂は半導体であるため、静的歪み印加時に金属電極/MoS₂ 界面に形成される分極のためショットキー障壁高さが非対称に変調され順バイアスと逆バイアスで電流が非対称に変化する^[2]ことが報告されている。しかしながら、実験的再現性は報告が殆どなく、歪みにより生じる分極が金属/MoS₂ のどの界面で形成されるか(**Fig. 1**)等、MoS₂の圧電発現機構に関して殆ど明確になっていない。本研究では、静的歪み印加時の電流電圧特性及び動的歪み印加による発電から、2種類の電極構造を比較することで、MoS₂内の圧電分極位置を実験的に特定することを試みた。

【結果及び考察】 フレキシブル基板である PET 基板上に転写した CVD-単層 MoS₂ へ歪みが印加されることを Raman 測定により確認した。歪み印加量を変化させ Raman 測定を行ったところ、**Fig. 2** に示すように MoS₂ の E' ピークの縮退が解け分裂したことから、MoS₂ への歪み印加が確認できた。次に、**Fig. 1** に示す 2 種類の構造のデバイスを様々な金属電極(Pd, Ti, Cr, Co, Ni, Au)により作製し、静的歪み印加状態で I_d - V_d 測定を行ったが、非対称な変調は観察されなかった(**Fig. 3 挿入図**)。歪み印加時、圧電効果によるショットキー障壁の変調だけでなく、圧抵抗効果によるバンドギャップの変調も生じ、これは対称な I_d - V_d の原因となる。これらの効果の切り分けのため、コンタクト抵抗と比較してチャネル抵抗の寄与を下げるため、benzyl viologen(BV)を塗布し n ドープした状態で同様の計測を行ったが非対称な変調が見られなかった(**Fig. 3**)。分極によるショットキー障壁の変調は小さいことが予想され優位性・再現性ある結果は極めて困難であるといえる。

そこで、回転型アクチュエータを用いて動的歪み印加し、分極発生により外部回路に流れる変位電流の測定を行った。変位電流の有無により分極位置の特定が可能となると考えられる。**Fig. 1** に示す 2 種類の構造のデバイスを作製し、動的歪みを印加して変位電流を測定すると、いずれの構造においても変位電流を確認できた(**Fig. 4**)。この結果から金属/MoS₂ の接触端に分極が生じると考えられる。MoS₂ の S 原子は金属原子と相互作用し電子密度分布が変化するため、純粋な MoS₂ はチャネル部のみであり、そのため圧電電荷は金属/MoS₂ の接触端に生じるとする DFT 計算の報告^[2]があり、本研究の実験結果はこれと一致するものである。以上から、圧電特性を示す二次元材料について、その分極位置を特定する実験的根拠を示すことができた。

【参考文献】 [1] W. Wu, *et al.*, *Nature* **2014**, 514, 470. [2] W. Liu, *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **2016**, 108, 181603.
本研究の一部は科研費及びJSPS「研究拠点形成事業(JPJSCCA20160005)」により助成を受け行われた。

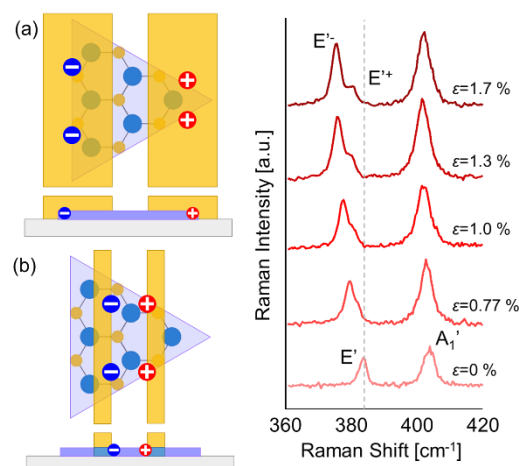


Fig. 1 Polarization position
(a) A: MoS₂ flake edge
(b) B: Metal/MoS₂ interface.

Fig. 2 Raman spectrum of MoS₂ on PET substrate under tensile strain.

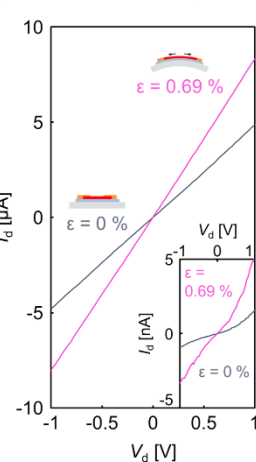


Fig. 3 I_d - V_d of BV-doped MoS₂ under tensile strain (inset: I_d - V_d without BV).

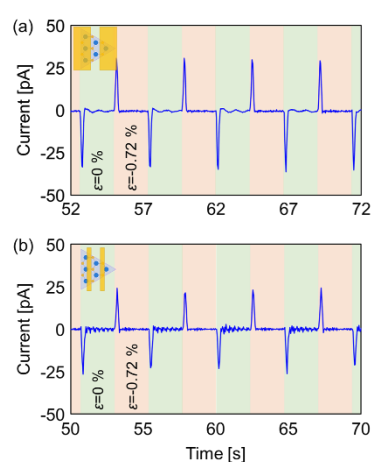


Fig. 4 Piezoelectric outputs from MoS₂ devices with (a) type A & (b) type B in **Fig. 1**.