

MoS₂単原子層中 Re ドーパントの局所電子状態の STM/STS 計測

Localized electronic states on Re dopants in Monolayer MoS₂ studied by STM/STS

筑波大¹、首都大²、関西大³ 吉田昭二¹、吉村真太郎²、竹内高広¹、本田周太³、

植田暁子¹、武内修¹、宮田耕充²、重川秀実¹

Univ. of Tsukuba¹, Tokyo Metropolitan Univ², Kansai Univ³, Shoji Yoshida¹, Shintaro Yoshimura²,

Takahiro Takeuchi¹, Syuta, Honda³, Akiko Ueda¹, Osamu Takeuchi¹, Yasumitsu Miyata²,

Hidemi Shigekawa¹

<http://dora.bk.tsukuba.ac.jp>

近年、Si をベースとした半導体デバイスの微細化による発展が限界を迎えつつある中で次世代半導体材料として遷移金属ダイカルコゲナイド原子層が注目されている。特に MoS₂ は高い化学的安定性、高移動度、単原子層で可視発光を示す直接遷移半導体であることなど、優れた特性からトランジスタや発光・発電素子など様々なデバイスへの応用を目指して盛んに研究が進められている。そのような展開の中でドーピングによる MoS₂ の電気特性制御が課題となっており、n 型のドーパントとして Re が検討されているが、その電子状態について詳細には調べられていない。

そこで本研究では、グラファイト基板上的 CVD 成長した Re ドープ MoS₂ 単原子層(Mo_{1-x}Re_xS₂, x=0.07)の STM/STS 計測を行った。図 1 に単原子層上で測定された STM 像を示す。Re ドーパントの局所電子状態によって Re ドーパントは明るく観測されている。その形状から Re ドーパントは図 2 に示す 3 種類に分類され、A 型が 94%を占めることが分かったが、先行研究の TEM 観察の結果より主要な A 型が Mo 置換の Re ドーパントであることが示唆された。次に同じ単層上で得られた dI/dV スペクトルを図 3 に示す。MoS₂ 上で測定された dI/dV スペクトルに比べて Re 上の dI/dV スペクトルはバンド端に相当する立ち上がり電圧が正負ともに低バイアス側にシフトしていることから、Re ドーパントは MoS₂ の伝導帯端と価電子帯端近傍に浅い不純物準位を形成していることを示している。特に Re 同士が近接すると、価電子帯近傍の状態より深い準位を形成することが明らかになった。この結果は Re を n 型ドーパントとする当初の予想とは大きく異なる結果である。新たな電子状態発現機構を解析するために DFT 計算を行ったところ、特に Re 同士が近接した領域では、格子歪によって伝導帯端近傍に加え価電子帯近傍に不純物準位を形成することが明らかになり、STS 測定結果と定性的な一致が得られた。

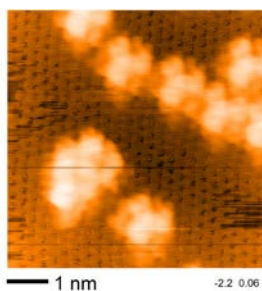


図 1. Re ドープ MoS₂ の STM 像

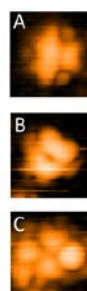


図 2. STM 像による
Re ドーパントの識別

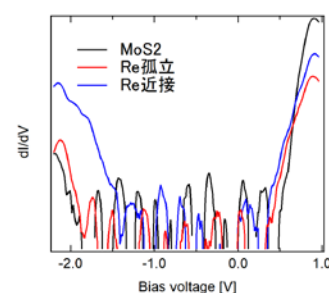


図 3. dI/dV スペクトル MoS₂(黒)、
Re 孤立(赤)、Re 近接領域(青)