フラックス法による層状カルコゲナイド化合物の単結晶育成と剥離応用

（信州大）○林 文隆・横塚 雄斗・Chokradjaroen Chayanaphat・工藤 諒大・山田 哲也・手嶋 勝弥

Flux Growth and Exfoliation Applications of Chalcogenide Compounds Single Crystals

(*Shinshu University*) ○Fumitaka Hayashi, Yuto Yokotsuka, Chayanaphat Chokradjaroen, Ryota Kudo, Tetsuya Yamada, Katsuya Teshima

Transition metal dichalcogenides (TMD) have been attractive for their semiconducting character. TMD materials are represented by the chemical formula MX_2, M refers to a transition metal atom (*e.g.*, Mo, W) and X is a chalcogen atom (*e.g.*, S, Se). TMD can be produced in an atomic-scale thickness with direct band gap and suitable spin-orbit coupling through chemical vapor deposition and exfoliation, which make it favorable for especially electronics applications. In general, it is challenging to grow large, high-quality parent MX_2 crystals, and achieving scalable crystal growth is highly desirable. Herein, we report the flux growth of MoX_2 (X = S, Se, Te) single crystals from chloride and molybdate-based fluxes for the first time. When examining the holding temperature using NaCl flux, large MoS_2 crystals exceeding 50 μm were obtained, although size variation was observed at 1100 °C. In contrast, using K_2MoO_4 flux resulted in relatively uniform MoS_2 crystal particles with an approximate size of 20 μm. The grown MoX_2 crystals were exfoliated using a hexane-butyllithium solution.

Keywords : Transition metal dichalcogenides; Nanosheet; Exfoliation; Two-dimensional materials

遷移金属カルコゲナイド(TMD)は化学式 MX_2 で表され，M は遷移金属原子（Mo, W 等)を，X はカルコゲン原子（S, Se 等）を指す。TMD は化学気相成長（CVD）や剥離によって原子スケールの厚みで作製可能である。単層 TMD は直接遷移型のバンドギャップと適切なスピン軌道結合をもち，半導体特性に優れた材料である。大型 MoX_2 単結晶の液相育成はほとんど例がなく，大規模スケールで高品質な結晶育成が望まれる。本研究では, 塩化物やモリブデン酸塩フラックスからの MoX_2 単結晶(X=S, Se, Te)育成を報告する。MoX_2 結晶の育成に，フラックスとして NaCl や K_2MoO_4 等を用い，溶質として金属 Mo と S を用いた。これらの原料を石英封緘し，所定温度で 24 時間加熱した。NaCl フラックスを用いて保持温度を検討すると，1100 °C にて，サイズにばらつきが見られるものの，50 μm を超える大型 MoS_2 結晶粒子を得た。K_2MoO_4 フラックスを用いると，比較的均一サイズで，20 μm 程度の MoS_2 結晶粒子を得た。当日は，MoX_2 結晶の成長様式や化学剥離の結果についても議論する。

謝辞：本研究の一部は，内閣府 SIP 事業(JPJ012307)および科研費基盤研究 B(24K01234)の援助のもとに遂行された。記して謝意を表する。