

日本—V4 国際共同研究「先端材料」 2021年度 年次報告書	
研究課題名（和文）	新奇半導体創出に基づくバンドギャップエンジニアリング
研究課題名（英文）	Band-gap engineering in unconventional semiconductors
日本側研究代表者氏名	北浦 良
所属・役職	名古屋大学 大学院理学研究科物質理学専攻(化学系)・准教授
研究期間	2021年11月1日 ～ 2024年10月31日

1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
北浦 良	名古屋大学大学院・理学研究科・准教授	新奇半導体の創出とデバイス作製

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

本年度の目標は、試料作製条件の検討を進めることである。(1)超高真空チャンバーを用いた異原子ドーピング法を用いた二次元半導体への発光中心の埋め込み、(2)有機金属化学気相成長(MOCVD)法を用いた結晶成長、の二通りのアプローチのそれぞれについて基本的な条件検討を終え、次年度以降に新たな材料を提出するための基盤を築くことを目指す。

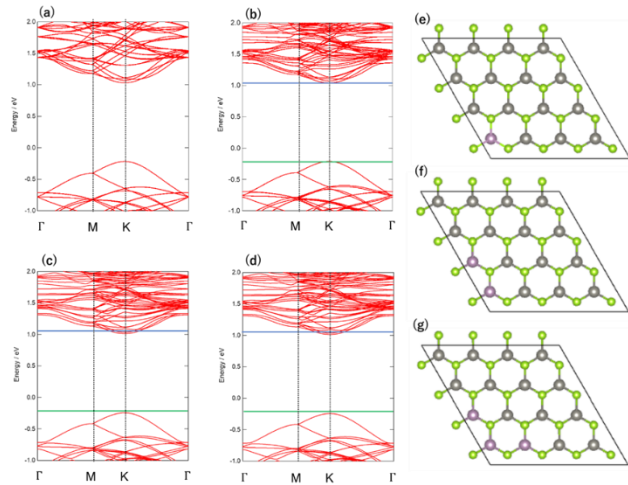
3. 日本側研究チームの実施概要

(1) 異原子ドーピングによる二次元半導体への発光中心の埋め込み

本年度は、 MoSe_2 および WSe_2 の両者について、種々のドーパントを導入した試料の作製を行った。第一原理計算の結果から、 WSe_2 に Mo を導入することで、 Mo サイト周りに数十 meV 程度の励起子に対する閉じ込めポテンシャルができることをがわかっていた（右図）ため、 Mo を中心に検討を進めた。

実際に Mo をドーピングした試料を作製して発光特性を観測したところ、低エネルギー領域に新たなピークが得られたものの、励起子が閉じ込められたことに由来するシャープな発光ピークは得られなかった。第一原理計算では、ドーピングされた Mo がクラスターを形成することで閉じ込めポテンシャルの深さが変わることが示唆されており、導入された Mo がランダムに種々の大きさのクラスターを形成したことがブロードな発光ピークが得られた一因ではないかと考えている。今後、 Cr や Re をドーピングした試料についても、詳細な発光測定を行う予定である。

上記に加えて、 MoS_2 および WS_2 を構成要素とする接合超構造の作製の検討も進めた。その結果、当初想定していなかった原子レベルでの極細接合構造が実現可能であることが明らかとなってきた。この構造では、一次元構造が二次元構造中に埋め込まれているため、カーボンナノチューブで見られたような単一光子発光が期待できるのではないかとと思われる。今後は、種々の接合幅の構造体の作製を進めつつ、単一光子発光の実現を目指して発光分光測定を進めていく予定である。



(a) $\text{W}_{16}\text{Se}_{32}$ のバンド構造、(b) $\text{MoW}_{15}\text{Se}_{32}$ のバンド構造、(c) $\text{Mo}_2\text{W}_{14}\text{Se}_{32}$ のバンド構造、(d) $\text{Mo}_3\text{W}_{13}\text{Se}_{32}$ のバンド構造、(e)~(g) (b)~(d) の簡易分子モデル