

光電子回折法による MoSe₂ (0001) 表面の局所構造解析

奈良先端大・物質創成, 岡山大・理^A, JASRI/SPring-8^B
吉田善紀, Xiao Miao^A, 久保園芳博^A, 松下智裕^B, 松井文彦

Local Structure Analysis of Molybdenum Diselenide

by Photoelectron Diffraction

NAIST, Okayama Univ.^A, JASRI/SPring-8^B

Y. Yoshida, X. Miao^A, Y. Kubozono^A, T. Matsushita^B, F. Matsui^A

MoSe₂は遷移金属カルコゲナイド(TMDs)の1つであり、層状の結晶構造をとる。MoSe₂は層間にLiやKなど金属原子を挿入することで超伝導を示すことが確認されている[1]。MoSe₂は主に6回対称性を示す2H型と3回対称性を示す3R型の積層構造の異なる2つの結晶構造が知られているが、表面の局所的な原子構造は明らかになっていない。積層構造が異なれば挿入された金属原子周辺の位置関係も変わり、転移温度 T_c が変化することが考えられる。そこで我々は非破壊で表面の局所構造を観察できる2次元光電子回折法によりMoSe₂単結晶の(0001)表面の解析を行った。実験はSPring-8 BL25SUに設置した2次元表示型分析器(DIANA)を用いて行った。DIANAは光電子の角度分布を $\pm 60^\circ$ の立体角で測定可能である。MoSe₂を大気中でへき開後、DIANAにてXPSを取得した。次にMoとSeの3d軌道電子をそれぞれ円偏光で励起し、光電子の運動エネルギーが同じ600 eVで2次元光電子回折パターン(PIAD)を取得した。するとFig.1.に示すように3回対称性をもつPIADパターンが得られた。励起原子がMoとSeで異なれば、現れるそれぞれの第一近接原子による前方収束ピーク(FFP)が鏡面对称の位置に現れていることが分かる。このことから本実験で用いたMoSe₂試料の積層ポリタイプは3R型であると判明した。

本研究会ではこれらの結果と c 軸方向の原子間距離を変化させたときのシミュレーション結果において、FFPの方向を比較することで層間距離について議論する。また、同時にMo 3p準位からのエネルギー損失電子の角度分布についても測定を行った。すると徐々にFFPの強度が減少し、Mo 3pから50 eVほど離れたところでFFPが反転するネガ回折模様を取得できた。これらの結果を元にネガ回折模様の発生機構についても議論を行う。

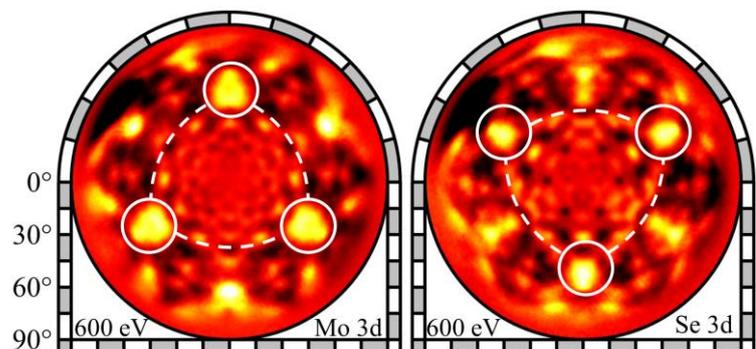


Fig.1. Mo 3d and Se 3d PIAD Patterns

[1] Xiao Miao *et al.* *Sci. Rep.* **6**, 36258 (2016)