(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2021-0112614
(43) 공개일자 2021년09월15일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C23C 16/56 (2006.01) *B01D 57/02* (2006.01)
C23C 16/30 (2006.01) *H01L 29/786* (2006.01)
H01L 31/032 (2006.01) *H01L 33/00* (2010.01)
H01M 4/139 (2010.01) *H01M 4/58* (2015.01)
(52) CPC특허분류
C23C 16/56 (2013.01)
B01D 57/02 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2020-0027835
(22) 출원일자 2020년03월05일
심사청구일자 2020년03월05일

(71) 출원인
울산대학교 산학협력단
울산광역시 남구 대학로 93(무거동)
(72) 발명자
한상욱
울산광역시 남구 대학로 93(무거동)
(74) 대리인
이원희

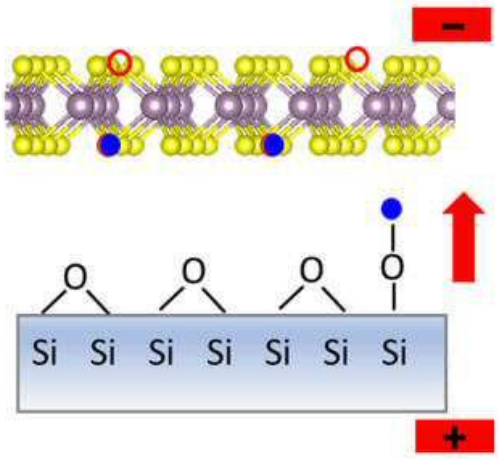
전체 청구항 수 : 총 24 항

(54) 발명의 명칭 **전이금속 칼코겐 화합물 박막 및 그 제조방법**

(57) 요 약

알칼리 금속염의 존재 하에 전이금속 전구체 및 칼코겐 원소 전구체를 주입하여, 기판 상에 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 형성하는 단계; 및 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막에 두께 방향의 전압을 인가하는 단계;를 포함하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법이 개시된다. 본 발명의 일 측면에서 제공되는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법은 불순물로 작용하는 기판 및 전이금속 칼코겐 화합물 박막 사이의 알칼리 금속을 효과적으로 제거함과 동시에, 이를 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함을 치유하는 효과가 있다. 이로써, 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결정성이 향상되며, 전이금속 칼코겐 화합물이 진성 반도체와 같은 성질을 가질 수 있다. 또한, 다른 기판으로 박막을 전사할 필요가 없다는 공정 상의 이점 또한 있다.

대 표 도 - 도2b



(52) CPC특허분류
C23C 16/305 (2013.01)
H01L 29/78681 (2013.01)
H01L 31/0324 (2013.01)
H01L 33/0083 (2013.01)
H01M 4/139 (2013.01)
H01M 4/581 (2013.01)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 1345293288
부처명 교육부
과제관리(전문)기관명 한국연구재단
연구사업명 개인기초연구(교육부)(R&D)
연구과제명 이황화몰리브덴 표면의 결함과 수소 반응성 연구
기 여 율 60/100
과제수행기관명 울산대학교
연구기간 2019.03.01 ~ 2020.02.29
이 발명을 지원한 국가연구개발사업
과제고유번호 1711109308
부처명 과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명 한국연구재단
연구사업명 집단연구지원(R&D)
연구과제명 오비탈 전류, 오비트로닉스-스핀트로닉스의 확장
기 여 율 40/100
과제수행기관명 울산대학교
연구기간 2020.03.01 ~ 2021.02.28

명 세 서

청구범위

청구항 1

알칼리 금속염의 존재 하에 전이금속 전구체 및 칼코겐 원소 전구체를 주입하여, 기판 상에 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 형성하는 단계; 및

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막에 두께 방향의 전압을 인가하는 단계;를 포함하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 전이금속 전구체는 $TiCl_4$, TiF_4, TiI_4, $HfCl_4$, $HfCp_2Me_2$, HfI_4, $Hf(CpMe)_2(OMe)Me$, $ZrCl_4$, ZrI_4, VCl_3, $VoCl_3$, $NbCl_5$, $TaCl_5$, TaF_5, TaI_5, $MoCl_5$, $Mo(CO)_6$, WCl_6, WCl_4, WF_6, $WOCl_4$, $TcCl_4$, $ReCl_4$, $ReCl_5$, $ReCl_6$, $CoCl_2$, $CoCp(CO)_2$, CoI_2, $Co(acac)_2$, $CoCp_2$, $RhCl_5$, $IrCl_3$, $NiCl_2$, $Ni(acac)_2$, $NiCp_2$, $PdCl_2$, $Pd(thd)_2$, $PtCl_2$, $ZnCl_2$, $ZnMe_2$, $ZnEt_2$, ZnI_2, $SnCl_2$, $SnCl_4$ 및 SnI_4로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 칼코겐 원소 전구체는 황파우더(sulfur powder), 황화수소(H_2S), 디에틸설파이드(diethyl sulfide), 디메틸디설파이드(dimethyl disulfide), 에틸메틸설파이드(Ethyl methyl sulfide), $(Et_3Si)_2S$, 셀레늄 파우더(selenium powder), 셀레늄화수소(H_2Se), 디에틸셀레나이드(diethyl selenide), 디메틸디셀레나이드(dimethyl diselenide), 에틸메틸셀레나이드(ethyl methyl selenide), $(Et_3Si)_2Se$, 텔레늄 파우더(Telenium powder), 텔레늄화수소(H_2Te), 디메틸텔루라이드(dimethyl telluride), 디에틸텔루라이드(diethyl telluride), 에틸메틸텔루라이드(Ethyl methyl telluride) 및 $(Et_3Si)_2Te$로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 알칼리 금속염은 NaCl, Na_2CO_3, KNO_3 및 LiBr로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법.

청구항 5

제1항에 있어서,

알칼리 금속염의 존재 하에 전이금속 전구체 및 칼코겐 원소 전구체를 주입하여, 기판 상에 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 형성하는 단계는

알칼리 금속염이 로딩된 진공 챔버를 준비하는 단계; 및

상기 진공 챔버에 전이금속 전구체 및 칼코겐 원소 전구체를 주입하여, CVD에 의해 전이금속 칼코겐 화합물을 합성하는 단계;

를 포함하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께는 0.1 nm 내지 10 nm인 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막에 두께 방향의 전압을 인가하는 단계는

상기 기판 측에 양전극이 연결되고, 전이금속 칼코겐 화합물 박막 측에 음전극이 연결되는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막에 두께 방향의 전압을 인가하는 단계에서, 기판 및 전이금속 칼코겐 화합물 박막 사이에 잔존하는 알칼리 금속이 전이금속 칼코겐 화합물의 계면 상의 결함으로 이동하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막에 두께 방향의 전압을 인가하는 단계에서 인가되는 전압의 세기는 1 V 내지 100 V인 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법.

청구항 10

기판 상에 알칼리 금속을 촉매로 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 합성하는 방법에 있어서,

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께 방향으로 전압을 인가하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함을 치유하는 방법.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 기판 측에 양전극이 연결되고, 전이금속 칼코겐 화합물 박막 측에 음전극이 연결되는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함을 치유하는 방법.

청구항 12

알칼리 금속염의 존재 하에 전이금속 전구체 및 칼코겐 원소 전구체를 주입하여, 기판 상에 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 형성하는 단계; 및

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막에 두께 방향의 전압을 인가하는 단계;를 포함하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법으로 제조된 전이금속 칼코겐 화합물 박막으로,

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함의 적어도 일부에 상기 알칼리 금속이 위치하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 전이금속 칼코겐 화합물은 진성 반도체인 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막.

청구항 14

제12항에 있어서,

상기 알칼리 금속이 위치하는 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함은 상기 박막 및 기판의 계면에 위치하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막.

청구항 15

제12항에 있어서,

상기 전이금속 칼코겐 화합물은

Ti, Hf, Zr, V, Nb, Ta, Mo, W, Tc, Re, Co, Rh, Ir, Ni, Pd, Pt, Zn 및 Sn로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상의 전이금속; 및

S, Se 및 Te로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상의 칼코겐 원소;

를 포함하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막.

청구항 16

제12항에 있어서,

상기 기판은 Si, Al_2O_3 및 소다 라임 글라스로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막.

청구항 17

제12항에 있어서,

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께는 0.1 nm 내지 10 nm인 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막.

청구항 18

제12항에 있어서,

상기 알칼리 금속은 Na, K 및 Li로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상인 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막.

청구항 19

제12항의 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 전계 효과 트랜지스터.

청구항 20

제12항의 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 리튬 이온 전지.

청구항 21

제12항의 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 태양전지.

청구항 22

제12항의 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 발광소자.

청구항 23

기판 상에 알칼리 금속을 촉매로 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 합성하는 방법에 있어서,

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께 방향으로 전압을 인가하여 전이금속 칼코겐 화합물의 페르미 준위를 조절하는 방법.

청구항 24

기판 상에 알칼리 금속을 촉매로 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 합성하는 방법에 있어서,

상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께 방향으로 전압을 인가하여 전이금속 칼코겐 화합물의 결정성을 향상시키는 방법.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 전이금속 칼코겐 화합물 박막 및 그 제조방법에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0003] 전이금속 칼코겐 화합물은 전기 이동도가 높고 온-오프 특성이 우수한 물질로서 다양한 용도로의 활용이 기대되는 물질이다. 특히, 전이금속 칼코겐 화합물은 그 유연성으로 인해 박막 트랜지스터, 플렉서블 디스플레이를 구현하기 위한 채널 등으로 사용하기에 적합한 장점을 가지고 있다.

[0004] 이러한 전이금속 칼코겐 화합물은 다양한 방식으로 합성될 수 있는데, CVD에 의해 합성이 이루어질 경우 늦은

반응 속도로 인해 생산성이 저하되는 문제점이 있었다.

[0005] 이를 극복하기 위한 새로운 방법으로, 알칼리 금속을 사용하는 방법이 제안되기는 하지만, 과량의 알칼리 금속은 전이금속 칼코겐 화합물의 결정성을 저해하여, 오히려 소자의 성능을 떨어뜨릴 수 있다.

[0006] 이에, 이를 극복할 수 있는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법에 대한 연구가 활발히 이루어지고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0008] 본 발명의 일 측면에서의 목적은 기판과 전이금속 칼코겐 화합물 사이에 잔존하는 알칼리 금속을 효율적으로 제거함과 동시에, 진성 반도체의 성질을 가질 수 있는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법을 제공하는 데 있다.

과제의 해결 수단

[0010] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명의 일 측면에서

[0011] 알칼리 금속염의 존재 하에 전이금속 전구체 및 칼코겐 원소 전구체를 주입하여, 기판 상에 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 형성하는 단계; 및

[0012] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막에 두께 방향의 전압을 인가하는 단계;를 포함하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법이 제공된다.

[0014] 또한, 본 발명의 다른 측면에서

[0015] 기판 상에 알칼리 금속을 촉매로 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 합성하는 방법에 있어서,

[0016] 상기 전이금속 칼코겐 화합물의 두께 방향으로 전압을 인가하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함을 치유하는 방법이 제공된다.

[0018] 또한, 본 발명의 다른 일 측면에서

[0019] 기판 상에 알칼리 금속을 촉매로 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 합성하는 방법에 있어서,

[0020] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께 방향으로 전압을 인가하여 전이금속 칼코겐 화합물의 페르미 준위를 조절하는 방법이 제공된다.

[0022] 또한, 본 발명의 다른 일 측면에서

[0023] 기판 상에 알칼리 금속을 촉매로 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 합성하는 방법에 있어서,

[0024] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께 방향으로 전압을 인가하여 전이금속 칼코겐 화합물의 결정성을 향상시키는 방법이 제공된다.

[0026] 또한, 본 발명의 다른 일 측면에서

[0027] 상기 제조방법으로 제조된 전이금속 칼코겐 화합물 박막으로,

[0028] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함의 적어도 일부에 상기 알칼리 금속이 위치하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막이 제공된다.

[0030] 또한, 본 발명의 또 다른 측면에서

[0031] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 전계 효과 트랜지스터가 제공된다.

[0033] 또한, 본 발명의 또 다른 측면에서

[0034] 상기 전이금속 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 리튬 이온 전지가 제공된다.

[0036] 또한, 본 발명의 또 다른 측면에서

[0037] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 태양전지가 제공된다.

[0039] 나아가, 본 발명의 또 다른 측면에서

[0040] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 발광소자가 제공된다.

발명의 효과

[0042] 본 발명의 일 측면에서 제공되는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법은 불순물로 작용하는 기판 및 전이금속 칼코겐 화합물 박막 사이의 알칼리 금속을 효과적으로 제거함과 동시에, 이를 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함을 치유하는 효과가 있다.

[0043] 이로써, 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결정성이 향상되며, 전이금속 칼코겐 화합물이 진성 반도체와 같은 성질을 가질 수 있다.

[0044] 또한, 다른 기판으로 박막을 전사할 필요가 없다는 공정 상의 이점 또한 있다.

도면의 간단한 설명

[0046] 도 1a는 본 발명의 일 제조예에 따른 샘플에 대하여, 면 내(in-plane) 방향으로 I-V 특성을 측정한 결과를 보여주는 그래프이고,

도 1b는 본 발명의 일 실시예에 따른 샘플에 대하여, 면 내(in-plane) 방향으로 I-V 특성을 측정한 결과를 보여주는 그래프이고,

도 2a는 본 발명의 일 제조예에 따른 샘플의 기판 및 박막 사이의 계면을 모식적으로 나타낸 것이고,

도 2b는 본 발명의 일 실시예에 따른 샘플의 기판 및 박막 사이의 계면을 모식적으로 나타낸 것이고,

도 2c는 본 발명의 일 제조예 및 실시예에 대하여 광전자 분광법을 이용한 기판의 Si 2p 스펙트럼을 각각 위 및 아래에 나타낸 것이고,

도 2d는 본 발명의 일 제조예 및 실시예에 대하여 광전자 분광법을 이용한 가전자대 스펙트럼을 각각 위 및 아래에 나타낸 것이고,

도 3a는 본 발명의 일 제조예 및 실시예에 대하여 광전자 분광법을 이용한 O 1s 스펙트럼을 각각 위 및 아래에 나타낸 것이고,

도 3b는 본 발명의 일 제조예 및 실시예에 대하여 광전자 분광법을 이용한 C 1s 스펙트럼을 각각 위 및 아래에 나타낸 것이고,

도 3c는 본 발명의 일 제조예 및 실시예에 대하여 광전자 분광법을 이용한 Mo 3d 스펙트럼을 각각 위 및 아래에 나타낸 것이고,

도 3d는 본 발명의 일 제조예 및 실시예에 대하여 광전자 분광법을 이용한 S 2p 스펙트럼을 각각 위 및 아래에

나타낸 것이고,

도 3e는 본 발명의 일 제조예 및 실시예에 대하여 광전자 분광법을 이용한 Na 2s 스펙트럼을 각각 위 및 아래에 나타낸 것이고,

도 3f는 본 발명의 일 제조예 및 실시예에 대하여 광전자 분광법을 이용한 Na 2p 스펙트럼을 각각 위 및 아래에 나타낸 것이고,

도 4a는 본 발명의 일 제조예 및 실시예에 대한 PL 스펙트럼을 나타낸 것이고,

도 4b 및 도 4c는 본 발명의 일 제조예 및 실시예에 대한 라만 스펙트럼을 나타낸 것이고,

도 5는 본 발명의 일 제조예에서 사용되는 전이금속 칼코겐 화합물 박막 제조장치의 일 예시를 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0047] 다른 식으로 정의되지 않는 한, 본 명세서에서 사용된 모든 기술적 및 과학적 용어들은 본 발명이 속하는 기술 분야에서 숙련된 전문가에 의해서 통상적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 가진다. 일반적으로, 본 명세서에서 사용된 명명법은 본 기술 분야에서 잘 알려져 있고 통상적으로 사용되는 것이다.

[0049] 본 발명의 일 측면에서

[0050] 알칼리 금속염의 존재 하에 전이금속 전구체 및 칼코겐 원소 전구체를 주입하여, 기판 상에 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 형성하는 단계; 및

[0051] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막에 두께 방향의 전압을 인가하는 단계;를 포함하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법이 제공된다.

[0053] 이하, 본 발명의 일 측면에서 제공되는 전이금속 칼코겐 화합물 박막 제조방법을 각 단계별로 상세히 설명한다.

[0055] 먼저, 본 발명의 일 측면에서 제공되는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법은 알칼리 금속염의 존재 하에 전이금속 전구체 및 칼코겐 원소 전구체를 주입하여, 기판 상에 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 형성하는 단계를 포함한다.

[0056] 상기 전이금속 전구체는 $TiCl_4$, TiF_4, TiI_4, $HfCl_4$, $HfCp_2Me_2$, HfI_4, $Hf(CpMe)_2(OMe)Me$, $ZrCl_4$, ZrI_4, VCl_3, $VoCl_3$, $NbCl_5$, $TaCl_5$, TaF_5, TaI_5, $MoCl_5$, $Mo(CO)_6$, WCl_6, WCl_4, WF_6, $WOCl_4$, $TcCl_4$, $ReCl_4$, $ReCl_5$, $ReCl_6$, $CoCl_2$, $CoCp(CO)_2$, CoI_2, $Co(acac)_2$, $CoCp_2$, $RhCl_5$, $IrCl_3$, $NiCl_2$, $Ni(acac)_2$, $NiCp_2$, $PdCl_2$, $Pd(thd)_2$, $PtCl_2$, $ZnCl_2$, $ZnMe_2$, $ZnEt_2$, ZnI_2, $SnCl_2$, $SnCl_4$ 및 SnI_4로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함할 수 있다.

[0057] 상기 칼코겐 원소 전구체는 황파우더(sulfur powder), 황화수소(H_2S), 디에틸설파이드(diethyl sulfide), 디메틸디설파이드(dimethyl disulfide), 에틸메틸설파이드(Ethyl methyl sulfide), $(Et_3Si)_2S$, 셀레늄 파우더(selenium powder), 셀레늄화수소(H_2Se), 디에틸셀레나이드(diethyl selenide), 디메틸디셀레나이드(dimethyl diselenide), 에틸메틸셀레나이드(ethyl methyl selenide), $(Et_3Si)_2Se$, 텔레늄 파우더(Telenium powder), 텔레늄화수소(H_2Te), 디메틸텔루라이드(dimethyl telluride), 디에틸텔루라이드(diethyl telluride), 에틸메틸텔루라이드(Ethyl methyl telluride) 및 $(Et_3Si)_2Te$로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함할 수 있다.

[0058] 상기 알칼리 금속염은 NaCl, Na_2CO_3, KNO_3 및 LiBr로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함할 수 있다.

[0059] 상기 기판은 Si, Al_2O_3 및 소다 라임 글라스로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함할 수 있다.

[0060] 상기 전이금속 칼코겐 화합물은 보다 상세하게는 MX_2의 형태로 표현되는 전이금속 디칼코제나이드(Transition

Metal Dichalcogenide, TMD)일 수 있다. 여기서 M은 전이금속, X는 칼코겐 원소일 수 있다.

[0061] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께는 0.01 nm 내지 50 nm 일 수 있으며, 바람직하게는 0.05 nm 내지 10 nm일 수 있다.

[0062] 전이금속 칼코겐 화합물 두께가 50 nm 이상인 경우, 간접 밴드갭(indirect band-gap)을 가지며, 충분한 크기의 밴드갭을 확보하지 못할 수 있다는 점에서 바람직하지 않을 수 있다. 예를 들어, MoS_2 단일층 두께는 0.65 nm 수준으로, 직접 밴드갭(direct band-gap)을 가지며, 다만 단일층을 초과하는 경우 간접 밴드갭을 갖게 된다.

[0063] 상기 단계는 일 실시예에서, 알칼리 금속염이 로딩된 진공 챔버를 준비하는 단계 및 상기 진공 챔버에 전이금속 전구체 및 칼코겐 원소 전구체를 주입하여, 화학기상증착법(CVD)에 의해 전이금속 칼코겐 화합물을 합성하는 단계를 포함할 수 있다.

[0064] 상기 진공 챔버 내로는 반응하지 않은 전구체 물질의 제거를 위해 가스가 주입될 수 있으며, 여기서 가스는 비활성가스일 수 있다. 예를 들어, 아르곤(Ar) 및 수소(H_2) 가스를 포함할 수 있다. 반응이 완료된 후 가스는 진공 챔버로부터 배출될 수 있다.

[0065] 상기 알칼리 금속염이 로딩되면, 진공 챔버 내에서의 공정 환경을 설정할 수 있다. 공정 압력 및 공정 온도가 설정될 수 있으며, 바람직하게는, 공정 온도는 600℃ 이상일 수 있다.

[0066] 상기 단계에서 전이금속 전구체 및 칼코겐 원소 전구체가 주입되면, 전이금속 칼코겐 화합물 합성을 위한 반응이 진공 챔버 내에서 이루어질 수 있다.

[0067] 상기 알칼리 금속염은 전이금속 칼코겐 화합물에서 반응속도 촉진을 위한 촉매로 작용할 수 있다. 특히, 알칼리 금속염은 유기 리간드를 가지는 반응물질이 사용될 경우 탄소 성분을 효율적으로 제거될 수 있는 촉매로 기능할 수 있다.

[0068] 다만, 상기 알칼리 금속염 중 알칼리 금속이 완전히 제거되지 않고, 기판 및 박막 사이에 남아있을 수 있다.

[0069] 이 때, 전이금속 칼코겐 화합물은 n형 반도체일 수 있다.

[0071] 다음으로, 본 발명의 일 측면에서 제공되는 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 제조방법은 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막에 두께 방향의 전압을 인가하는 단계를 포함한다.

[0072] 상기 단계에서 상기 기판 측에 양전극이 연결되고, 전이금속 칼코겐 화합물 박막 측에 음전극이 연결될 수 있다. 이에 따라, 상기 박막과 기판 사이에 위치하는 알칼리 금속 양이온이 박막 측으로 이동할 수 있다.

[0073] 보다 상세하게는 상기 단계에서, 기판 및 전이금속 칼코겐 화합물 박막 사이에 잔존하는 알칼리 금속이 전이금속 칼코겐 화합물의 계면 상의 결함으로 이동할 수 있다.

[0074] 상기 인가되는 전압의 세기는 1 V 내지 100 V일 수 있다. 바람직하게는 5 V 내지 50 V일 수 있다.

[0075] 상기 인가되는 전압의 세기가 1 V 미만인 경우 알칼리 금속 양이온이 박막 측으로 충분히 이동하지 못할 수 있다는 문제점이 있다.

[0077] 상기 단계를 통하여, 기판 및 박막 사이에 잔존하는 알칼리 금속이 박막 측으로 이동하여, 박막의 결함에 위치할 수 있다. 이에 따라 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함이 치유될 수 있으며, 그 결과 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결정성이 향상될 수 있다.

[0078] 또한, 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함이 치유되어, 진성 반도체가 될 수 있다.

[0079] 본 명세서에서, 진성 반도체란 반도체 물질의 페르미 준위가 $\{(E_C+E_V)/2\}\pm 0.1$ eV 이내인 경우, 바람직하게는 $\{(E_C+E_V)/2\}\pm 0.05$ eV 인 경우, 더욱 바람직하게는 $\{(E_C+E_V)/2\}\pm 0.01$ eV 이내인 경우를 의미한다. 여기서 E_C는 전도대의 에너지 준위, E_V는 가전도대의 에너지 준위를 의미한다.

[0080] 일 실시예에서, 전이금속 칼코겐 화합물의 페르미 준위는 직접 밴드갭의 중간 값으로부터 ± 0.1 eV 이내에 위치할 수 있으며, 상기 직접 밴드갭은 예를 들어, 1.8 eV 내지 1.9 eV일 수 있다.

[0082] 본 발명의 다른 측면에서

[0083] 기판 상에 알칼리 금속을 촉매로 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 합성하는 방법에 있어서,

[0084] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께 방향으로 전압을 인가하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함을 치유하는 방법이 제공된다.

[0086] 또한, 본 발명의 다른 일 측면에서

[0087] 기판 상에 알칼리 금속을 촉매로 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 합성하는 방법에 있어서,

[0088] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께 방향으로 전압을 인가하여 전이금속 칼코겐 화합물의 페르미 준위를 조절하는 방법이 제공된다.

[0090] 또한, 본 발명의 다른 일 측면에서

[0091] 기판 상에 알칼리 금속을 촉매로 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 합성하는 방법에 있어서,

[0092] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께 방향으로 전압을 인가하여 전이금속 칼코겐 화합물의 결정성을 향상시키는 방법이 제공된다.

[0094] 기판 상에 알칼리 금속을 촉매로 이용하여 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 합성하는 경우, 기판 및 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 계면에 결함이 존재한다.

[0095] 또한, 이와는 별개로, 알칼리 금속을 촉매로 이용하는 경우, 적은 양의 알칼리 금속이 기판 및 전이금속 칼코겐 화합물 박막 사이에 잔존하게 된다.

[0096] 이러한 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께 방향으로 전압을 인가함으로써, 상기 잔존하는 알칼리 금속이 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 계면의 결함으로 위치하여, 이러한 결함을 치유할 수 있다.

[0097] 따라서, 이러한 알칼리 금속 양이온의 이동을 위하여, 바람직하게는 상기 기판 측에 양전극이 연결되고, 전이금속 칼코겐 화합물 박막 측에 음전극이 연결될 수 있다.

[0098] 또한, 알칼리 금속 양이온의 이동으로 인하여, 합성된 전이금속 칼코겐 화합물의 페르미 준위를 조절할 수 있다.

[0099] 일 실시예에서, 페르미 준위는 $\{(E_C+E_V)/2\}\pm 0.1$ eV, 바람직하게는 $\{(E_C+E_V)/2\}\pm 0.05$ eV, 더욱 바람직하게는 $\{(E_C+E_V)/2\}\pm 0.01$ eV 범위 내로 조정되어, 상기 전이금속 칼코겐 화합물은 진성 반도체의 특성을 가질 수 있다.

[0100] 또한, 알칼리 금속 양이온의 이동으로 인하여, 합성된 전이금속 칼코겐 화합물의 결정성이 향상될 수 있다.

[0101] 일반적으로, 기판 상에 형성되는 전이금속 칼코겐 화합물의 경우, 기판 및 전이금속 칼코겐 화합물 계면 사이의 결함으로 인하여, 결정성이 떨어지게 되는데, 이러한 결함을 알칼리 금속 양이온이 치유함으로써, 전이금속 칼코겐 화합물의 결정성이 향상될 수 있다.

[0103] 본 발명의 다른 일 측면에서

[0104] 상기 제조방법으로 제조된 전이금속 칼코겐 화합물 박막으로,

[0105] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함의 적어도 일부에 상기 알칼리 금속이 위치하는 것을 특징으로 하는 전이금속 칼코겐 화합물 박막이 제공된다.

[0107] 이하, 본 발명의 다른 일 측면에서 제공되는 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 각 구성별로 상세히 설명한다. 다만, 구체적인 제조방법에 대하여는 앞서 상세히 설명하였는 바, 중복하여 설명하지는 않는다.

[0109] 먼저, 본 발명의 다른 일 측면에서 제공되는 전이금속 칼코겐 화합물 박막은 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결함의 적어도 일부에 상기 알칼리 금속이 위치할 수 있다.

[0110] 이에 따라, 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 결정성이 향상될 수 있으며, 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막은 진성 반도체일 수 있다.

[0111] 또한, 상기 박막 및 기판 사이에 잔존하는 알칼리 금속의 양을 감소시킬 수 있다.

[0112] 상기 전이금속 칼코겐 화합물에서 상기 전이금속은 Ti, Hf, Zr, V, Nb, Ta, Mo, W, Tc, Re, Co, Rh, Ir, Ni, Pd, Pt, Zn 및 Sn로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함할 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

[0113] 상기 전이금속 칼코겐 화합물에서 상기 칼코겐 원소는 S, Se 및 Te로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함할 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

[0114] 상기 전이금속 칼코겐 화합물은 보다 상세하게는 MX_2의 형태로 표현되는 전이금속 디칼코제나이드일 수 있다. 여기서 M은 전이금속, X는 칼코겐 원소일 수 있다.

[0115] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막의 두께는 0.01 nm 내지 50 nm 일 수 있으며, 바람직하게는 0.05 nm 내지 10 nm일 수 있다.

[0116] 전이금속 칼코겐 화합물 두께가 50 nm 이상인 경우, 간접 밴드갭(indirect band-gap)을 가지며, 충분한 크기의 밴드갭을 확보하지 못할 수 있다는 점에서 바람직하지 않을 수 있다. 예를 들어, MoS2 단일층 두께는 0.65 nm 수준으로, 직접 밴드갭(direct band-gap)을 가지며, 다만 단일층을 초과하는 경우 간접 밴드갭을 갖게 된다.

[0117] 상기 기판은 Si, Al_2O_3 및 소다 라임 글라스로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상을 포함할 수 있다.

[0118] 상기 알칼리 금속은 Na, K 및 Li로 이루어지는 군으로부터 선택되는 1종 이상일 수 있다.

[0120] 본 발명의 또 다른 측면에서 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 전계 효과 트랜지스터가 제공된다.

[0121] 일 실시예에서, 상기 트랜지스터는 기판, 상기 기판 상에 형성된 활성층, 상기 활성층 상에 서로 이격되도록 형성된 소스 전극 및 드레인 전극 및 게이트 전극을 포함할 수 있다.

[0122] 상기 활성층은 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함할 수 있다.

[0124] 본 발명의 또 다른 측면에서 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 리튬 이온 전지가 제공된다.

[0125] 상기 리튬 이온 전지는 애노드 전극, 캐소드 전극, 상기 애노드 전극 및 캐소드 전극 사이에 위치하는 분리막 및 상기 애노드 전극 및 캐소드 전극 사이에 위치하는 전해질을 포함할 수 있다.

[0126] 상기 애노드 전극은 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함할 수 있다.

[0128] 본 발명의 또 다른 측면에서 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 태양전지가 제공된다.

[0129] 상기 태양전지는 제1 전극, 제2 전극 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 위치하는 전자 수송층, 광활성층 및 정공 수송층을 포함할 수 있다.

[0130] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막은 전자 수송층, 광활성층 또는 정공 수송층에 포함될 수 있다.

[0132] 본 발명의 또 다른 측면에서 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막을 포함하는 발광소자가 제공된다.

[0133] 상기 발광소자는 제1 전극, 제2 전극 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 위치하는 전자 수송층, 발광층 및

정공 수송층을 포함할 수 있다.

[0134] 상기 전이금속 칼코겐 화합물 박막은 전자 수송층, 발광층 또는 정공 수송층에 포함될 수 있다.

[0136] 이하, 제조예, 실시예 및 실험예를 통하여 본 발명을 더욱 상세히 설명하고자 한다. 본 발명의 범위는 특정 실시예에 한정되는 것은 아니며, 첨부된 특허청구범위에 의하여 해석되어야 할 것이다. 또한, 이 기술분야에서 통상의 지식을 습득한 자라면, 본 발명의 범위에서 벗어나지 않으면서도 많은 수정과 변형이 가능함을 이해하여야 할 것이다.

[0138] **<제조예 1>**

[0139] 튜브로 CVD 반응기를 사용하여 MoS_2 단일층을 합성 하였다. MoS_2를 700℃의 성장 온도에서 $MoCl_5$ 및 디메틸 설파이드(dimethyl sulfide, DMS)를 사용하여 SiO_2(285 nm)/Si 기판 상에 합성하였다. 전구체를 함유하는 버블러의 온도를 90℃로 가열하여 적절한 증기압을 달성하고, 기화된 전구체 분자를 3 sccm의 순수한 아르곤 (99.999 %) 캐리어 가스를 사용하여 튜브 내로 운반하였다. DMS 및 H_2 흐름은 각각 20 sccm 및 10 sccm으로 고정되었다.

[0140] 또한, 10 mg의 NaCl이 온도가 700℃ 인 CVD 반응기에 첨가되었다.

[0141] 이러한 MoS_2 합성 과정의 개략도는 도 1에 도시되어 있다.

[0142] 또한, MoS_2 단일층 표면 및 Si 기판 후면에 은으로 된 전도성 에폭시 전극을 형성하였다.

[0144] **<실시예 1>**

[0145] 제조예 1에서 합성한 MoS_2에 대하여, MoS_2 단일층 표면 및 Si 기판 후면의 전극에 전압을 인가하였다.

[0147] **<실험예 1> I-V 측정 결과 분석**

[0148] 제조예 1의 MoS_2 및 실시예 1의 MoS_2에 대하여 I-V 특성을 면 내(in-plane) 방향에 대하여 측정하였다.

[0149] 제조예 1에 대하여, 도 1a에 나타내었다. 도 1a에서 볼 수 있는 것과 같이, 특정 부분(P2와 P5)의 전극들(i)-(vi)에서의 전극 사이의 간격차이에 따른 I-V 그래프를 나타낸다. 신호가 아주 작거나 거의 나타나지 않는 것은 비옴 전극 접촉(non-Ohmic contacts) 또는 아주 큰 MoS_2 단일층 박막의 저항에 의한 것으로 고려된다. 가장 긴 전극 사이(i-vi)의 비선형 I-V신호의 기울기의 역수로부터 수 MΩ의 저항이 유추된다

[0151] 실시예 1에 대하여는 도 1b에 나타내었다. 도 1b의 경우, 아주 큰 I-V 신호를 나타내는 것을 확인할 수 있다. 특히, 전극 간격이 짧은 경우 아주 크게 증가된 비선형 I-V 신호와 선형의 I-V 신호를 나타내며, 이로부터 유추되는 저항은 수백 Ω이다. 따라서 1차와 비교하여 10^4 정도의 저항이 감소되었음을 의미한다. 그러나 도 1a에서 가장 긴 전극 사이의 작은 비선형 I-V 신호는 도 1b에서 완전히 감소되었다.

[0153] 이로부터, 도 2a에 나타낸 것과 같이, CVD 성장 중에 MoS_2/SiO_2 계면에서, 미량의 Na 양이온들이 SiO_2 기판에 흡착되어 있는데, 도 2b에서와 같이, MoS_2 단일층 박막 표면에 형성된 전극들에 (-)전압을 인가하면 SiO_2 표면에 잔류한 미량의 Na 양이온들이 MoS_2의 계면부분 황 원자의 빈자리 결함에 유도되어 결함을 치유하기 때문인 것으로 유추할 수 있다. 도 2a 및 2b에서 검정색, 파란색, 빨간색 원들은 각각 산소, 나트륨(Na), 황 원자 빈자리 결함을 나타낸다.

[0155] **<실험예 2> 광전자 분광법, 광방출, 라만 분석법에 의한 분석 결과**

[0156] 도 2c와 2d, 그리고 도 3은 포항가속기 8A1 빔라인에서 광전자 분광법을 이용하여 제조예 1(각 도면의 위 스펙트럼) 및 실시예 1(각 도면의 아래 스펙트럼)에 대하여 수행한 실험 결과들을 비교한다. 광원의 에너지는 630 eV이며, 빔 크기는 ~ 50 μm^2 이고, 결합 에너지(binding energy)는 Au 박막의 기준 시료로부터 교정하였으며, 에너지 분해능은 600 meV이다.

[0157] 도 4의 PL과 Raman 실험 결과는 울산대 중점연구소 공동실험관의 장비를 이용하여 측정한 결과이며, 여기 레이저의 광원의 파장은 473 nm이며 1 μm^2의 빔 크기를 갖는다.

[0159] 도면 2c를 보면, 제조예 1에 대 측정한 Si 2p 내각 준위 스펙트럼은 각각 ~104 eV와 ~102 eV의 결합 에너지를 가지는 두 개의 피크들을 나타낸다.

[0160] 반면 실시예 1의 경우, ~102 eV의 피크가 감소하거나 사라진다. 실시예 1의 Si 2p 스펙트럼들의 면적 또는 세기는 제조예 1의 스펙트럼들과 비교하여 절반의 크기를 갖는다. 두 시료의 Si 2p 스펙트럼의 변화는 도면 3(a)의 O 1s 스펙트럼 변화와 일치한다.

[0161] 참고로 NaCl을 이용하지 않고 CVD 성장한 시료의 경우, Si 2p 피크는 SiO_2 기판에 의한 단일 피크(~104 eV)를 나타낸다.

[0162] 또한, 도 3e, 3f에서 제조예 1의 Na 2s와 Na 2p 스펙트럼들의 세기는 아주 약한 반면, 실시예 1의 스펙트럼은 상당한 크기를 갖는다. 특히, 도 3f에서 비슷한 운동 에너지(kinetic energy)의 Na 2p/O 2s 피크의 세기 비는 제조예 1의 경우보다 실시예 1의 경우가 7배나 더 크다.

[0163] 즉, 이로부터 제조예 1의 경우, 도 2a에서 모식적으로 나타낸 것과 같이, MoS_2/SiO_2 계면에서 미량의 Na 양이온이 CVD 공정 중에 SiO_2 계면에 잔류한 것으로 예측된다. 이 결과는 원자가 띠 스펙트럼 결과에서 더욱 입증될 수 있다.

[0165] 도 2d를 보면, 제조예 1의 원자가 띠 끝머리(valence band maximum, 두 점선의 교차점)의 에너지는 ~1.76 eV이다. 이 값은 도 4a의 PL측정에서, 직접 전이 엑시톤 밴드갭(1.870 eV)에 근접한다. 따라서 단일층 MoS_2의 밴드갭을 고려하면, ~1.76 eV인 원자가 띠 끝머리 값은 SiO_2기판에 지지된 대면적 MoS_2 단일층이 n-type의 반도체임을 알 수 있다. 또한, 이미 보고된 이론 계산결과에 따르면, MoS_2/SiO_2 계면에서 Na이온이 SiO_2에 도핑되는 경우, n-type MoS_2가 유도되는 것을 예측하였으며, 이 결과와도 일치함을 알 수 있다.

[0166] 반면, 실시예 1의 원자가 띠 끝머리는 ~1.1 eV이다. 다른 내각 준위 스펙트럼들도 제조예 1의 경우와 비교하여 ~0.6 eV 정도 함께 이동하였다. 원자가 띠 끝머리 값은 직접전이 엑시톤 밴드갭(1.876 eV)의 절반에 가까우며, 진성 반도체 상태에 근접하는 것을 의미한다.

[0168] 이와 더불어, 제조예 1의 Mo 3d 스펙트럼에서 ~237 eV의 미약한 피크는 CVD 성장 중에 SiO_2 기판과의 상호작용으로 인한 MoO_3의 Mo^{6+} 상태에 기인하는데, 실시예 1의 스펙트럼에서는 거의 존재하지 않는다. 또한, CVD 공정 중에 생성될 수 있는 Na-S 결합에 의한 Na_2S_x 또는 sulfate(~167 eV)와 관련된 피크들은 S 2p 스펙트럼에서 관측되지 않았다. 나아가, 실시예 1의 S 2p/Mo 3d 피크의 세기 비는 1.68 이며, 제조예 1의 1.72 보다 약간 작다. 반면, 전체적인 Mo 3d와 S 2p 스펙트럼들의 세기는 실시예 1의 경우가 약간 더 크다.

[0169] 특히, 도 2d에서 화살표로 나타낸, 원자가 띠 끝머리에서 페르미 에너지 준위 쪽으로 향하는 기울어진 꼬리 부분(tails)의 면적이 제조예 1의 경우보다 실시예 1의 경우 약 13% 더 작다. 이러한 꼬리 부분은 n-type의 단일층 또는 수 층의 MoS_2에서 나타나는 반면, p-type의 경우에서는 드물게 나타난다. 이론 계산에 의하면 충분한 양의 황 원자 빈자리 결함 농도에 의해서 유도되는 원자가 띠 부분의 결함상태에 해당된다. 반면, Na 양이온 배

터리의 음극재료로서 단일층 MoS_2의 경우 황 원자 빈자리 결함은 높은 흡착에너지(adsorption energy)와 장애벽(diffusion barrier)으로, Na 양이온과 강한 결합을 하는 것이 보고되었다.

[0170] 따라서, 도 2b의 모델과 같이, 실시예 1에서 MoS_2 표면에 인가한 음의 전압에 의해 SiO_2 기판에 잔류되었던 미량의 Na 양이온들이 MoS_2의 계면 부분으로 이끌려 황 원자 빈자리 결함을 치유하는 것으로 예상된다. 특히, 면 방향 및 수직 방향 등의 I-V측정으로 인한 양이온의 불규칙적인 이동에 의한 황원자 빈자리 결함 치유는 실시예 1에서 Mo 3d와 S 2p의 스펙트럼의 약간 다른 결합 에너지와 세기에 영향을 준 것으로 이해된다. 특히, 전극 간격에 따른 불규칙한 I-V 신호(도면 1b) 또한 이에 의한 것으로 고려된다.

[0172] 한편, 도 3b의 C 1s 스펙트럼에서 실시예 1의 경우는 약간 복잡한 선 형태, 즉, 높은 결합에너지에 추가적인 피크들이 나타낸다. 그러나 제조예 1과 비교하여 전체적인 스펙트럼의 세기 변화는 거의 없는 상태이다. 이러한 추가적인 피크들은 두께 방향의 전압 인가를 위해 만든 에폭시 전극들을 광전자 분광법을 측정하기 위해서 떼어낸 흔적들과 관련된다. 에폭시 성분의 탄소산화물과 수소화탄소들에 의해 생성된 피크들이다. 그리고 MoS_2 표면과 전극들이 반데르 발스 결합으로 접촉된 것을 간접적으로 입증한다.

[0174] 마지막으로 광전자 분광법 결과를 바탕으로 제안한 모델들(도 2a, 도 2b)은 MoS_2의 두께 및 시료의 결정성 평가에 뛰어난 PL 측정 및 Raman 측정 결과로 뒷받침된다. 주목할 사항은 도 4에서 PL과 Raman 스펙트럼을 각각 규격화(normalization)하기 전의 실시예 1에서의 스펙트럼들의 세기는 2~3배 정도 제조예 1보다 크다. 그러나 시료 위치에 따른 불균일한 분포를 나타낸다.

[0175] 도 4a를 보면, PL 스펙트럼의 선맞추기(curve-fitting) 결과는 MoS_2 단일층의 원자가 띠가 스핀-궤도 결합에 의해서 분리되어 직접 전이 A와 B의 엑시톤 피크를 분리한다. 더욱이 A 엑시톤 피크는 중성 엑시톤 A^0와 전하된 엑시톤 또는 트리온 A^-로 구별된다. 특히, 실시예 1의 중성 엑시톤 피크의 에너지가 ~ 6 meV 정도 제조예 1보다 크다. 이러한 미세한 차이는 두 시료의 품질 차이에 의한 것 일 수도 있다.

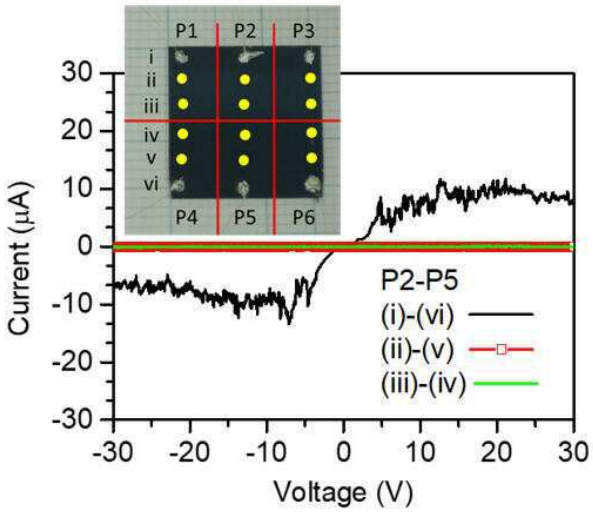
[0176] 그러나 실시예 1의 경우, 도면 2b의 모델에서와 같이, MoS_2/SiO_2 계면에서 전기적으로 제어된 Na 양이온에 의한 계면 결합이 약해지는 결과에 의한 것일 수 있다. 달리 말해서, SiO_2 기판(a=4.9138 Å)과 MoS_2(a=3.161 Å)의 격자 상수 차이에 의해 가해지는 인장 변형(tensile strain)의 감소에 의해 밴드갭이 증가된다.

[0177] 이러한 압축 변형 효과는 라만 결과에서 뒷받침된다. MoS_2의 면 방향 포논 진동(phonon vibration) 모드의 E^1_{2g} 피크와 면 수직 방향 포논 진동 모드 A_{1g} 피크 사이의 파수 차이가 실시예 1에서는 21 ~ 20.9 cm^{-1}이며, 이는 제조예 1의 경우(21.5 ~ 22 cm^{-1})보다 약간 작다(도 4b). 그리고, 도 4c에 나타낸 Si 포논 진동 모드의 피크 세기도 약간 작다. 그리고 주목할 사항은 330 cm^{-1}에서 Na 양이온 삽입에 의한 금속 성질을 나타내는 팔면체 구조의 1T-MoS_2의 특징적인 피크들이 나타나지 않다는 점이고, 이는 구조 변화가 없다는 것을 의미한다.

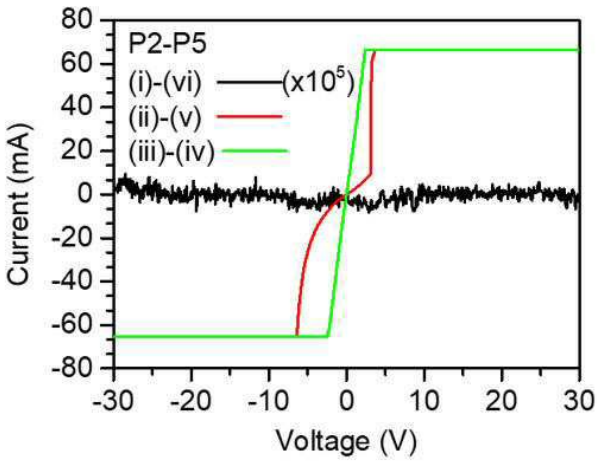
[0178] 반면에, 실시예 1에서 E^1_{2g}, A_{1g}, 및 Si의 각 포논 모드 피크들의 반치폭(Full width at half maximum) 값(6.43, 6.59, 6.91 cm^{-1})들이 제조예 1의 경우(8.08, 7.15, 7.90 cm^{-1})보다 작다. 이 결과는 실시예 1의 결정성이 향상되었음을 의미한다. 특히, E^1_{2g}/A_{1g}의 세기 비도 실시예 1이 약간 작은데, 이것은 면 방향의 결정성이 보다 향상되었음을 나타낸다.

도면

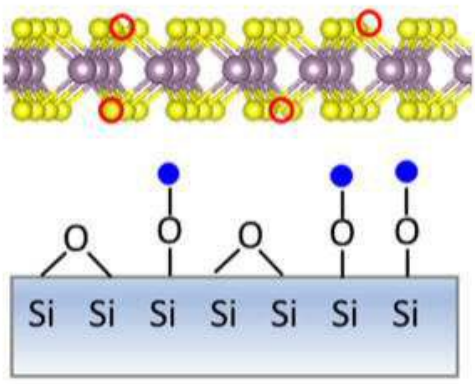
도면1a



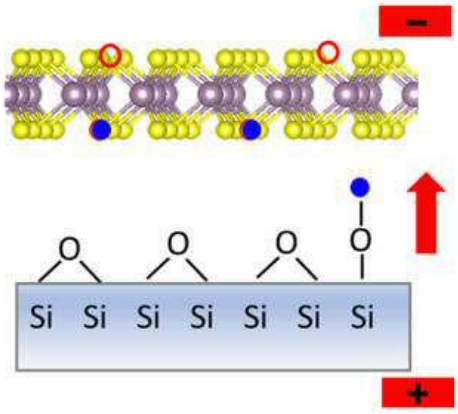
도면1b



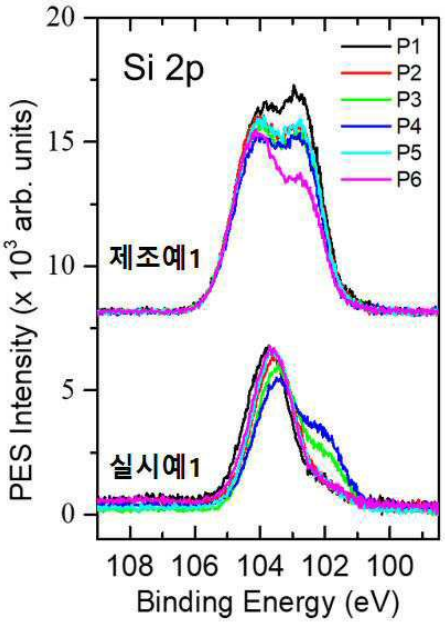
도면2a



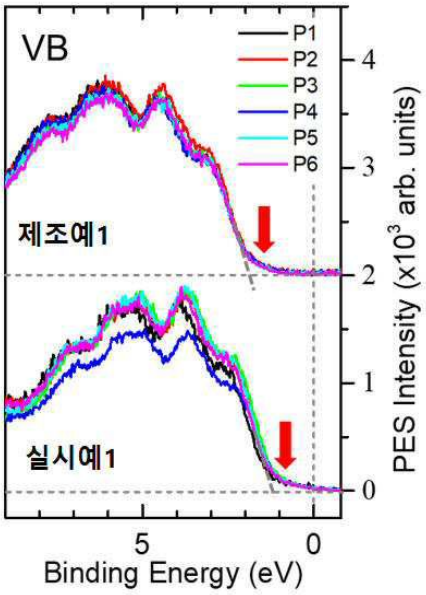
도면2b


-
O
O
O
O
Si
Si
Si
Si
Si
Si
Si
+

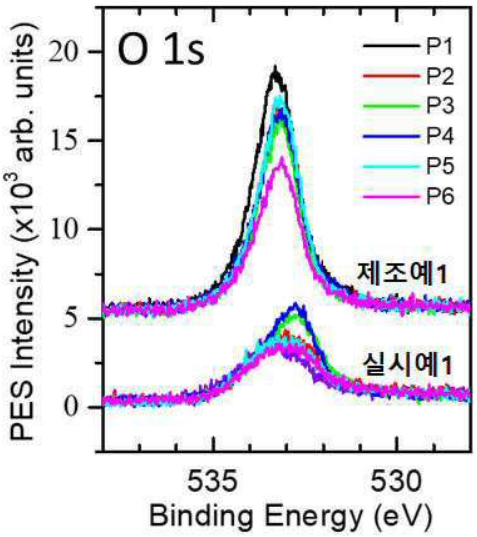
도면2c


Si 2p
P1
P2
P3
P4
P5
P6
제조예1
실시예1
PES Intensity (x 10^3 arb. units)
20
15
10
5
0
108
106
104
102
100
Binding Energy (eV)

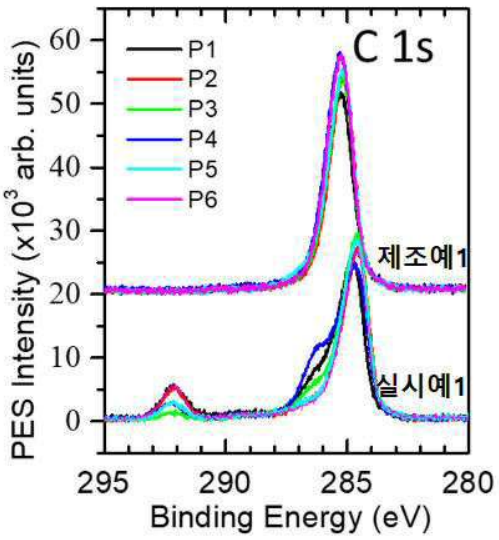
도면2d


VB
P1
P2
P3
P4
P5
P6
제조예1
실시예1
PES Intensity (x10^3 arb. units)
Binding Energy (eV)

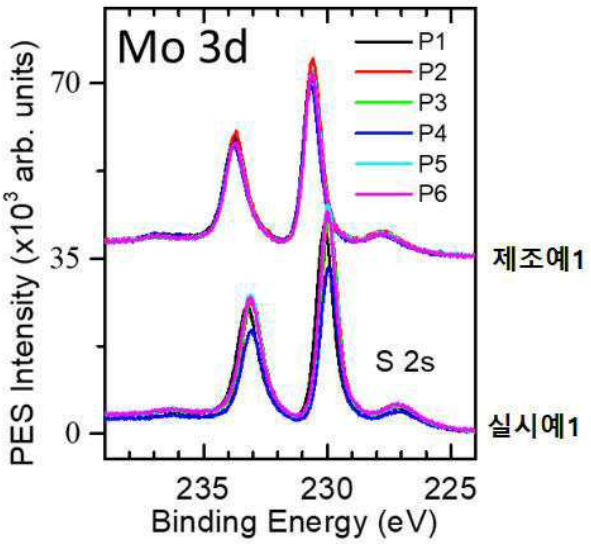
도면3a


O 1s
P1
P2
P3
P4
P5
P6
제조예1
실시예1
PES Intensity (x10^3 arb. units)
Binding Energy (eV)

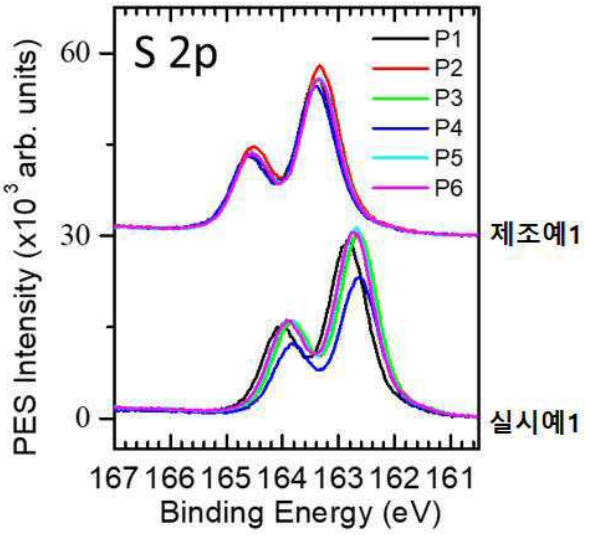
도면3b


C 1s
P1
P2
P3
P4
P5
P6
제조예1
실시예1
PES Intensity (x10^3 arb. units)
Binding Energy (eV)
60
50
40
30
20
10
0
295
290
285
280

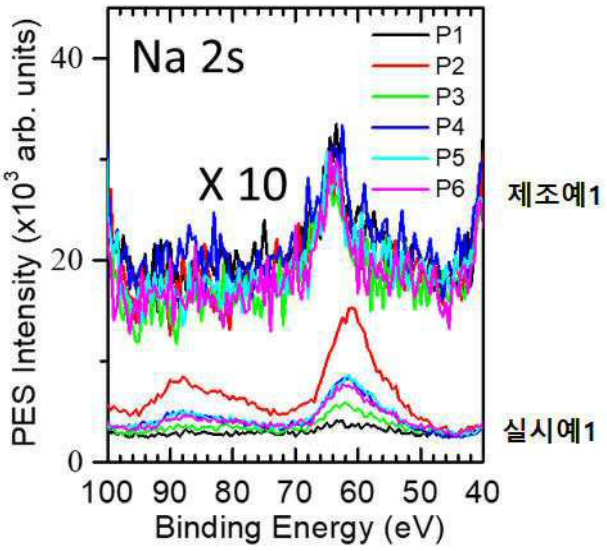
도면3c


Mo 3d
P1
P2
P3
P4
P5
P6
제조예1
S 2s
실시예1
PES Intensity (x10^3 arb. units)
Binding Energy (eV)
70
35
0
235
230
225

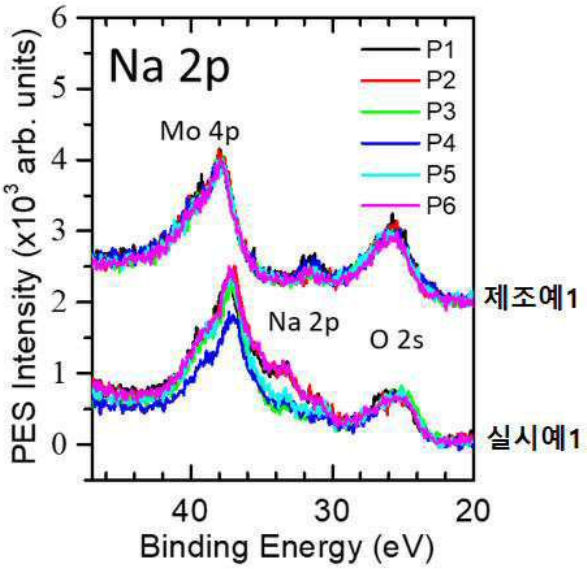
도면3d


S 2p
P1
P2
P3
P4
P5
P6
제조예1
실시예1
PES Intensity (x10^3 arb. units)
60
30
0
167 166 165 164 163 162 161
Binding Energy (eV)

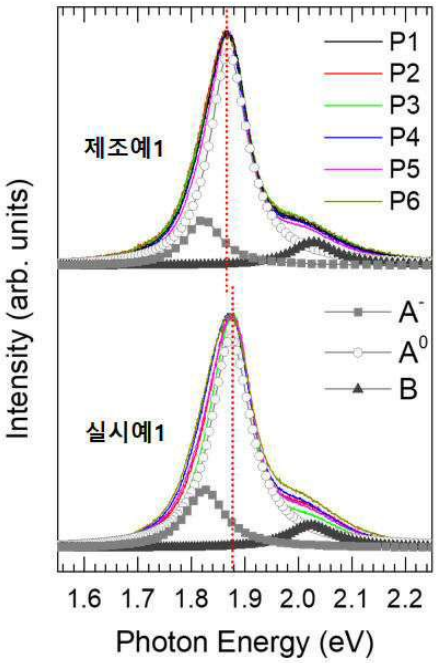
도면3e


Na 2s
X 10
P1
P2
P3
P4
P5
P6
제조예1
실시예1
PES Intensity (x10^3 arb. units)
40
20
0
100 90 80 70 60 50 40
Binding Energy (eV)

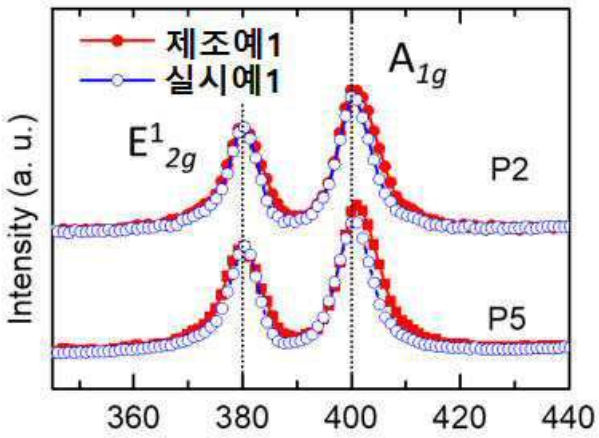
도면3f


Na 2p
Mo 4p
Na 2p
O 2s
P1
P2
P3
P4
P5
P6
제조예1
실시예1
PES Intensity (x10^3 arb. units)
Binding Energy (eV)
0
1
2
3
4
5
6
40
30
20

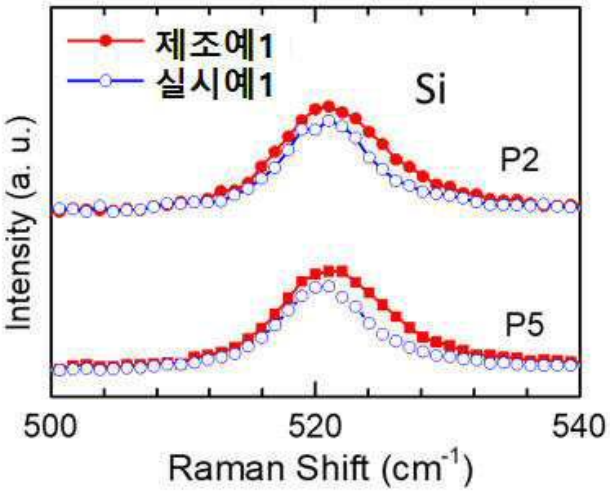
도면4a


제조예1
실시예1
P1
P2
P3
P4
P5
P6
A$^-$
A^0
B
Intensity (arb. units)
Photon Energy (eV)
1.6
1.7
1.8
1.9
2.0
2.1
2.2

도면4b



도면4c



도면5

