

MoS₂ 的价带谱分析

XPS-028

摘要：二维材料界面的电子结构很大程度上决定了器件的性能，通过 XPS 与 UPS 可以对二维材料的价带谱进行研究，本文研究了两者的区别，并分析了导致差异的原因。

关键词：二维材料 UPS 价带谱

近十年来，二维材料因优异的机械、光学、电学特性受到了极大的关注，过渡金属硫族化合物二维原子晶体材料因其具有许多石墨烯所不具有的物理特性，受到人们极大关注，广泛研究表明其在晶体管、光探测器、光伏电池等方面具有较大应用前景。

二维材料界面的电子结构很大程度上决定了器件

的性能，因此，研究界面处的电子结构有助于我们深入了解电子学器件的工作原理，对设计和优化器件有重要的指导意义。本文对剥离的 MoS₂ 薄膜新鲜表面进行了表面分析研究，来增加对 MoS₂ 材料表面及化学环境的认识。

■ 实验部分

1.1 仪器

岛津光电子能谱仪 (AXIS SUPRA⁺)

1.2 分析条件

激发源：单色 Al 靶 (Al K α , 1486.6 eV)

X 射线电压：15 kV

通能：全谱 160 eV，精细谱 40 eV

扫描速度：全谱 1 eV，精细谱 0.1 eV



图 1 岛津 AXIS SUPRA⁺ 型光电子能谱仪

■ 结果与讨论

样品在制备完后尽快送入真空腔室测试，XPS 全谱显示表面存在少量的污染碳（原子比约为 17.2%）。假设污染碳均匀覆盖在 MoS₂ 表面，那么根据信号推算污染碳的厚度约为 1.5nm。^[1]

图 2 为剥离的新鲜表面的价带谱，蓝色谱图是通过 Al K α X 光源 (1486.6eV) 得到的，红色谱图是通过 He II 光源 (40.2eV) 得到的。价带谱显示了整个布里渊区价带能级的态密度情况。

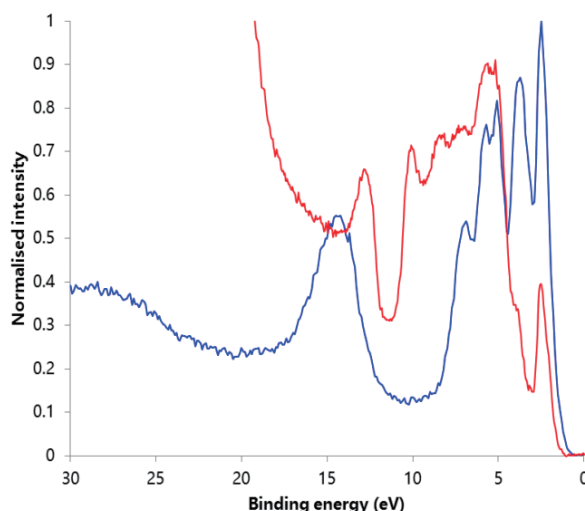


图 2 MoS₂ 样品的价带谱 (蓝色为 XPS, 红色为 He II UPS)

从上图中能看到，两个光源得到的谱图有很大区别，可能的原因有以下若干。

首先，光电子的电离截面不同。不同轨道电子的电离截面随光源能量变化。比如，Mo 4d 轨道的峰显示存在库伯最小 (Cooper minimum) 现象，当光源能量处于某一范围时，谱峰的相对强度最小。

其次，因为 UPS 与 XPS 光电子动能不同，UPS 与 XPS 的取样深度不一样。Al K α X 光源激发的价带层电子与内壳层电子在动能上只有 4.6 eV (~1%) 的差别，因此取样深度大致相同，约为表面 ~10 nm。He II UPS 的取样深度与 XPS 差别很大，紫外光激发电子的动能非常小，因此更加具有表面敏感性，取样深度约为表面 ~3 nm。因此 UPS 对表面状态更加敏感，受污染影响也较大。

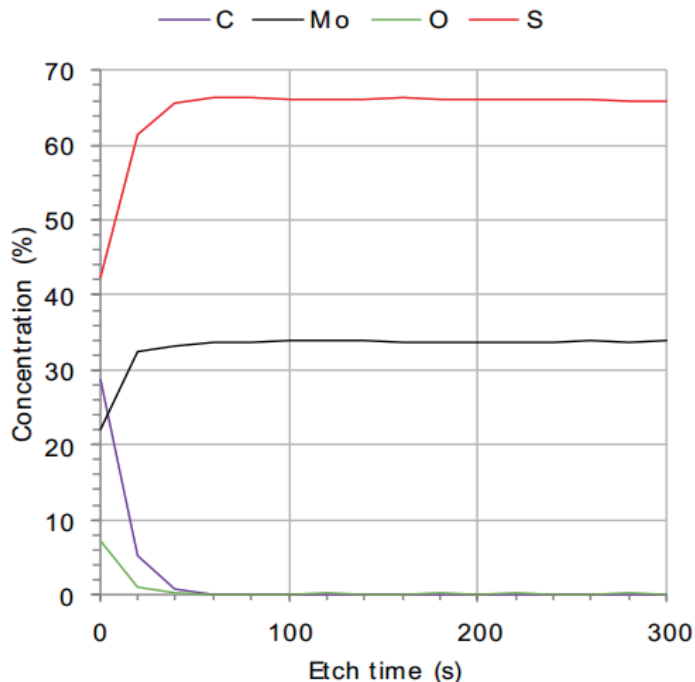


图3 MoS₂ 的深度剖析结果

为了探测表面污染是否对结果有影响，样品表面通过 Ar 团簇离子枪进行了刻蚀清洁，刻蚀电压 5kV，团簇大小 2000 (图 3)。经过刻蚀，精细谱显示 C 含量低于 1%。没有观测到 Mo 3d 峰形的变化，说明溅射过程中没有发生择优溅射与元素还原。

XPS 与 UPS 谱可以在一个自动采集程序中一起采集。从图 4 中可以看出，经过第一次 20s 刻蚀后，He II UPS 谱有明显变化，这说明表面污染对 UPS 价带谱有较大影响，表面污染去除后，UPS 价带谱不再变化。XPS 价带谱在刻蚀前后变动不大，说明表面污染对 XPS 价带谱影响较小。对比 UPS 与 XPS 谱图，在刻蚀前 UPS 价带谱与 XPS 价带谱差异较大，这主要是由于表面污染与两者取样深度不同所导致的。在刻蚀后，两者价带谱较为类似，各个价带峰的峰位基本相同，峰高不同，峰高差异的原因主要是两个光源光电子的电离截面不同所导致的。

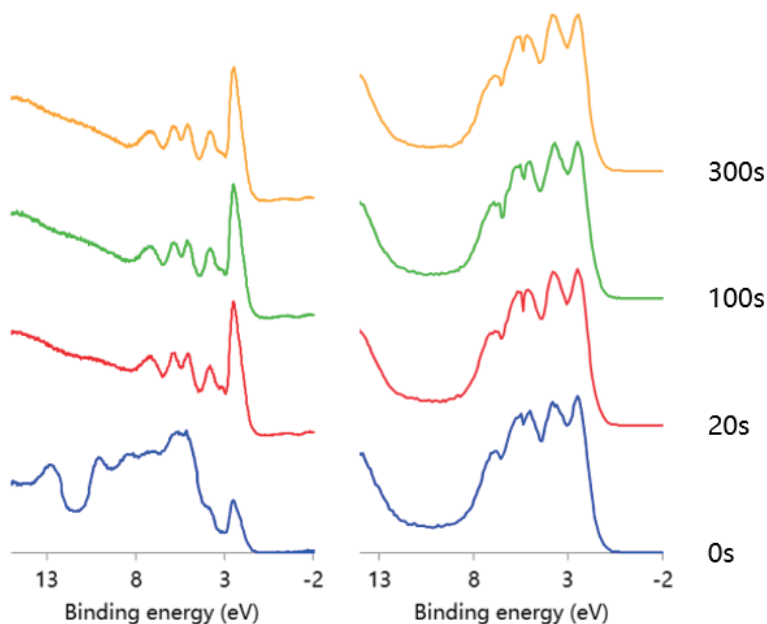


图4 MoS₂ 样品刻蚀不同时间后的 He II UPS (左) 与 XPS (右) 价带谱

■ 结论

本文通过 He II 光源与 Al K α X 光源对 MoS₂ 样品价带谱进行了分析。结果表明，在存在表面污染时，UPS 结果与 XPS 结果存在较大区别，主要原因在于 UPS 更加具有表面敏感性。通过团簇离子枪对样品表面清洁后，两者结果区别减小，主要差异来源于电离截面导致的峰高差异。

< 参考文献 >

[1] P. J. Cumpson, [https://doi.org/10.1002/1096-9918\(200006\)29:6<403::AID-SIA884>3.0.CO;2-8](https://doi.org/10.1002/1096-9918(200006)29:6<403::AID-SIA884>3.0.CO;2-8)

岛津应用云

