



MoTe₂ および Ag_xMoTe₂ の結晶構造解析

藤岡 正弥¹, 岩崎 秀²

1 産業技術総合研究所, 2 東京理科大学

キーワード：MoTe₂, インターカレーション, HPDC

1. 背景と研究目的

固体中の化学組成を変化させることにより、様々な物性の発現・変調が期待される。我々のグループでは、物質中で弱結合している元素に着目し、この元素の除去・導入・交換を促す合成技術として、Proton Driven Ion Introduction^[1]や Anisotropic Diffusion Control^[2], High Pressure Diffusion Control (HPDC)^[3]等を開発した。これらの手法では、母相となる試料と特定元素を供給する物質、または吸収する物質の積層構造を作ること、化学ポテンシャル勾配を意図的に生み出すことや、電界を印可することで、特定元素のみを異方的に拡散させる。選定した物質に応じて様々な化学修飾が可能であり、構造の骨格を大きく変えずに化学組成が変調された多様な準安定物質の創出が期待される。一方で、このような新規合成手法の汎用性・物質の適用範囲を把握するには、更なる合成の実施例が必要である。本研究では、これまでインターカレーションが困難であるとされてきた MoTe₂ を母物質として選定し、大気中で安定で尚且つ拡散能力が高い一価カチオンの Ag を HPDC 法を用いて導入した。その結果 EDS 測定から、確かに試料中に Ag が確認され、さらに TEM 観察からは、高圧の印可により従来報告されていない新たな多形構造が確認された。現状ではこの相を単相で得ることはできておらず、実験室レベルの X 線では観測不可能であった。そこで、シンクロトロン光による解析を試みた。

2. 実験内容

本研究では、母相の MoTe₂、HPDC 法により得られた Ag_xMoTe₂ (0.1 < x < 0.15)、およびの HPDC 同様の高圧高温環境で処理された MoTe₂ の 3 つの試料について、結晶構造を調査した。測定波長は 0.72 Å、25° 間隔で配置された検出器(PILATUS100K)で 0° および 12.5° 回転位置の 2 点で測定し、測定時間は 1 測定角度当たり 5 分である。

3. 結果および考察

母相の MoTe₂ に対して、Ag_xMoTe₂(HPDC)および MoTe₂(HP)では強度が半分以下に減少したが、格子定数の明らかな変化は確認されず、TEM 観察によりみられた新規多形構造も確認されなかった。一方、Ag_xMoTe₂(HPDC)からは僅かに Ag₂Te の異相が検出されたが、Ag 全体の導入量に対して、この異相の検出量は 10% 以下であり、大半の Ag は何らかの状態の MoTe₂ 層内に広がっていると予想される。

また、TEM 観察から確認された新たな多形構造は、2H 構造と 1T' 構造の中間的な構造を示しており、この変化の過渡期に、新規相が形成されたと思われる。そのため、シンクロトロン測定で見られた高圧処理による強度の低下は、この過渡期に生じたアモルファス領域の増加によると考えられる。

4. 参考文献

1. M. Fujioka, C. Wu, N. Kubo, G. Zhao, A. Inoishi, S. Okada, S. Demura, H. Sakata, M. Ishimaru, H. Kaiju and J. Nishii, *J. Am. Chem. Soc.* 139, 17987–17993 (2017).
2. S. Iwasaki, H. Morito, T. Komine, K. Morita, T. Shibuya, J. Nishii and M. Fujioka, *Adv. Mater.* 34, 2106754 (1-11) (2022).
3. M. Fujioka, M. Hoshino, S. Iwasaki, H. Morito, M. Kumagai, Y. Katsura, K. Zagazusem, M. Ono, and J. Nishii, *Chem. Mater.*, 35, 3008-3014 (2023).