

Du cristal massif à la monocouche : évolution des propriétés optiques d'un empilement de N couches de MoTe_2

Guillaume Froehlicher¹, Etienne Lorchat¹, François Fernique¹ et Stéphane Berciaud¹

¹ Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg et LabEx NIE, UMR 7504, Université de Strasbourg et CNRS, 23 rue du Loess, BP43, 67034 Strasbourg Cedex 2, France

Email : guillaume.froehlicher@ipcms.unistra.fr

Les semi-conducteurs lamellaires de la famille des dichalcogénures de métaux de transition (MX_2 , où M est un métal de transition et X un chalcogène) sont une classe émergente de matériaux quasi-bidimensionnels très prometteurs pour des applications en optoélectronique [1]. Leurs propriétés électroniques, optiques et vibrationnelles dépendent fortement du nombre de couches N . L'illustration la plus flagrante de cette dépendance en N est la transition d'un gap indirect pour le cristal massif (3D) vers un gap direct dans la limite quasi 2D d'une monocouche [2]. Contrairement aux MX_2 à base de soufre (S) ou de sélénium (Se), les MX_2 à base de tellure (Te) n'ont été que très peu étudiés. De tels matériaux émettent dans le proche infrarouge, ce qui étend les applications optoélectroniques des MX_2 à un domaine de longueurs d'onde plus vaste.

Nous présentons ici une caractérisation optique complète de N couches de ditellurure de molybdène (MoTe_2), pour $N=1$ à $N=12$, par des mesures de micro-photoluminescence (PL) et de micro-spectroscopie Raman (voir figure). Comme pour les autres MX_2 à base de molybdène, une forte augmentation de l'intensité de PL accompagnée d'un décalage du spectre de PL vers le bleu sont observés pour les monocouches de MoTe_2 . Ces résultats suggèrent une transition d'un gap optique indirect ($E_{\text{ind}} \approx 0.94$ eV) dans le cristal massif vers un gap optique direct ($E_{\text{dir}} \approx 1.1$ eV) dans la limite d'une monocouche [3-5].

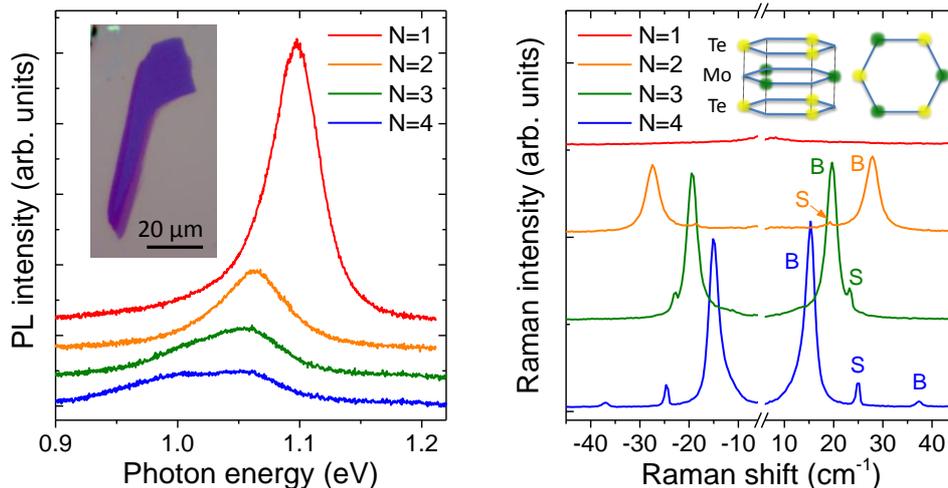


Figure : (g) Spectres de photoluminescence et, en insert, image optique d'un échantillon contenant 1 à 4 couches de MoTe_2 . (d) Spectres micro-Raman ultrabasse fréquence de N couches de MoTe_2 , de $N=1$ à 4. Les modes de respiration (B) et de cisaillement (S) sont indiqués. En insert, schéma d'un cristal de MoTe_2 en phase trigonale prismatique (2H) vue de côté et de dessus.

Par ailleurs, l'étude des modes Raman *intercouches*, à très basse fréquence (modes *intercouches* de respiration et de cisaillement, 5-40 cm^{-1}), et *intracouche*, à plus haute fréquence (100-300 cm^{-1}) [6], permet de déterminer très précisément N . En particulier, l'évolution des fréquences des modes de respiration et de cisaillement en fonction de N est en excellent accord avec un modèle simple de chaîne linéaire finie de N oscillateurs [5]. Cette analyse permet d'identifier les déplacements élémentaires et la symétrie des modes observés et d'extraire les constantes de force associées aux modes de respiration et de cisaillement.

[1] Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, et M. S. Strano, *Electronics and Optoelectronics of Two-dimensional Transition Metal Dichalcogenides*, Nature Nanotechnology **7**, 699 (2012)

[2] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan et T. F. Heinz, *Atomically Thin MoS_2 : A New Direct-Gap Semiconductor*, Phys. Rev. Lett. **105**, 136805 (2010)

[3] C. Ruppert, O. B. Aslan et T. F. Heinz, *Optical Properties and Band Gap of Single- and Few-Layer MoTe_2 Crystals*, Nano Letters **14**, 6231 (2014)

[4] I. G. Lezama, A. Arora, A. Ubaldini, C. Barreateau, E. Giannini, M. Potemski et A. F. Morpurgo, *Indirect-to-Direct Band Gap Crossover in Few-Layer MoTe_2* , Nano Letters **15**, 2336 (2015)

[5] G. Froehlicher, E. Lorchat, F. Fernique et S. Berciaud, *Ultralow Frequency Raman Spectroscopy and Hyperspectral Imaging of Interlayer Phonon Modes in N -layer MoTe_2* , Submitted (2015)

[6] M. Yamamoto, S. T. Wang, M. Ni, Y.-F. Lin, S.-L. Li, S. Aikawa, W.-B. Jian, K. Ueno, K. Wakabayashi et K. Tsukagoshi, *Strong Enhancement of Raman Scattering from a Bulk-Inactive Vibrational Mode in Few-Layer MoTe_2* , ACS Nano **8**, 3895 (2014)