

# 제 1 원리 기반 양자 전하수송 계산에서 국지화된 원자 기저함수의 중요한 역할: 그래핀 기반 나노 튜에 대한 사례 연구

김한슬, 이한결\*

EEWS대학원, 한국과학기술원, 대전광역시 305-806, 대한민국.

E-mail: emong0508@kaist.ac.kr, alchemize@kaist.ac.kr

## INTRODUCTION

소자 응용을 위한 물질의 전기적 특성에 관한 연구를 위해, 제 1 원리 기반의 양자 전하 수송 계산에 대한 수요가 점점 늘어나고 있는 추세이다. 현재 양자 전하 수송 계산을 위해 사용 가능한 제1원리 계산 기반의 프로그램으로는 Wannier90 (평면파로 파동함수를 기술), seqQuest (가우시안 함수로 파동함수를 기술), SIESTA (수치적 원자 궤도 함수를 이용해 파동함수를 기술) 프로그램 등이 있다. 이중 가장 많은 사용자 층을 확보하고 있는 프로그램은 SIESTA [1-3] 인데, 강하게 국지화된 원자궤도함수를 사용함으로써 계산 비용의 부담이 적은 것이 특징이다.

하지만 SIESTA 방법 내에서 강하게 국지화된 원자궤도함수는 일정 거리 이상 떨어진 두 원자의 파동함수의 연결성을 기술할 수 없다. 따라서 이 방법 하에서 일정 거리 이상의 진공을 통과한 터널링 전류를 기술하는 것의 정확도에 대한 의문은 필연적이다. 특히 나노 튜를 통한 터널링 전류를 이용한 나노 센서, 주사형전자 터널링 현미경 (STM), 나노 전자기계 (NEMS) 스위치 등 나노스케일 전자소자에 관한 연구를 위해서는 적합한 기저함수를 사용하는 방법을 정립하는 것이 필수이다 [4-6].

본 연구에서는 기저 함수의 크기와 범위 라는 두 가지 관점에서 SIESTA방법 하에서 제시되는 기본 기저함수를 확장한 함수들을 만들고, 이러한 기저함수의 차이가 터널링 센서의 계산에 있어서 어떤 영향을 주는지 살펴보았다. 이러한 사례 연구로서, 우리는 케톤 (C=O)기를 갖는 그래핀 나노리본(O-

ZGNR) 기반 나노 튜를 만들고 이 튜를 통해 DNA 염기 분자의 터널링 전류를 측정하는 상황을 가정하여 계산을 수행하였다.

## MODELING & METHODOLOGY

기저함수가 물질시스템의 전자 구조와 진공을 통한 터널링 기술에 주는 영향을 살펴보기 위해, 본 연구에서는 SIESTA 프로그램[5]의 인터페이스를 제공하는 EDISON Nanophysics의 LCAODFTLab을 활용하여 밀도범함수이론(DFT; Density functional theory)을 적용한 제 1 원리 계산을 수행하였다. 전하수송 계산 시에는, LCAODFTLab의 결과파일로 나오는 해밀토니안(H)과 겹침 행렬(S)을 이용하여 TranSIESTA 계산을 수행하였다.

계산의 교환-상관 함수의 기술은 GGA, PBE 방법을 사용하였으며[7], 전하수송 특성은 비평형 그린함수 방법론[8]을 사용하여 기술하였다.

## RESULTS & DISCUSSION

### I. 기저 함수 생성

우선 우리는 H, C, N, O 네 종류의 원소들에 대해, 파동함수를 기술할 기저 함수를 형성하였다. Double-zeta polarization (DZP) 수준의 SIESTA 기본 기저 함수 (“Default”)에서 시작하여, 1) 함수의 범위를 크게 하여 “Extended” 기저세트를 만들고 2) 사용하는 함수의 개수를 많게 하여 “Diffuse” 기저 세트를 만들었다. “Extended” 기저에서는 함수 반경 제한을 ~6 Bohr (s 오비탈), ~8 Bohr (p

오비탈)로 하고, “ Diffuse” 기저 에서는 2s, 2p 오비탈의 기술을 위해 DZP 레벨에 3s (반경 제한 ~6 Bohr), 3p (반경 제한 ~8

Bohr) 함수를 적용하였다. 표 1에는 생성된 기저함수들의 반경이, 그림 1에는 함수의 모양들이 요약되어 있다.

s orbitals				
Species	All-electron	default DZP	Extended DZP	DZP+Diffuse orbitals - diffuse
H	29.2218	4.82	6.05	6.04
C	21.0252	4.19	6.1	6.099292615
N	18.0216	3.68	6.07	6.074086178
O	15.7689	3.31	5.87	6.022527442
p orbitals				
Species	All-electron	default DZP	Extended DZP	DZP+Diffuse orbitals - diffuse
H	41~			
C	31.7606	4.99	8.03	8.03003659
N	27.5658	4.38	8.2	7.996832861
O	24.4235	3.93	8.13	8.129670114

표 1 생성된 기저함수들의 반경 요약 표. (단위: Bohr)

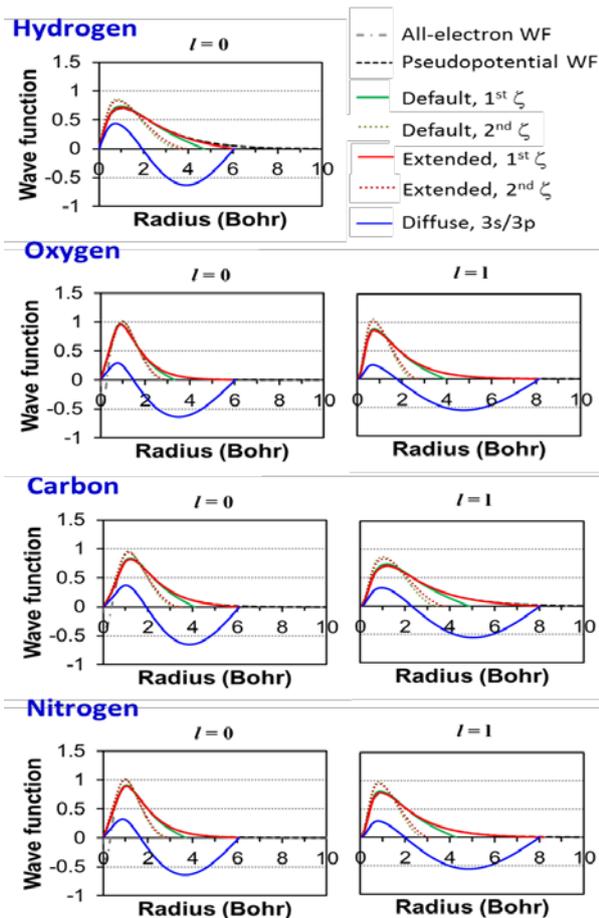


그림 1 생성된 기저함수들의 모양 요약 그래프.

## II. 무한대 시스템에서 기저함수의 전자구조에 대한 영향

다음으로 우리는 생성된 기저함수들을 그래핀 기반 시스템에 적용해 보았다. 기저함수의 나노 튜브 시스템에 대한 영향을 보기에 앞서, 무한대의 O-ZGNR 시스템을 만들고 밴드구조 (그림 2)와 전자상태밀도 (그림 3)을 살펴보았다. 두가지 모두에서 공통적으로 볼 수 있듯이, 새로운 기저함수의 도입은 무한대 시스템에서의 전자구조에 대한 기술을 바꾸지는 않는다.

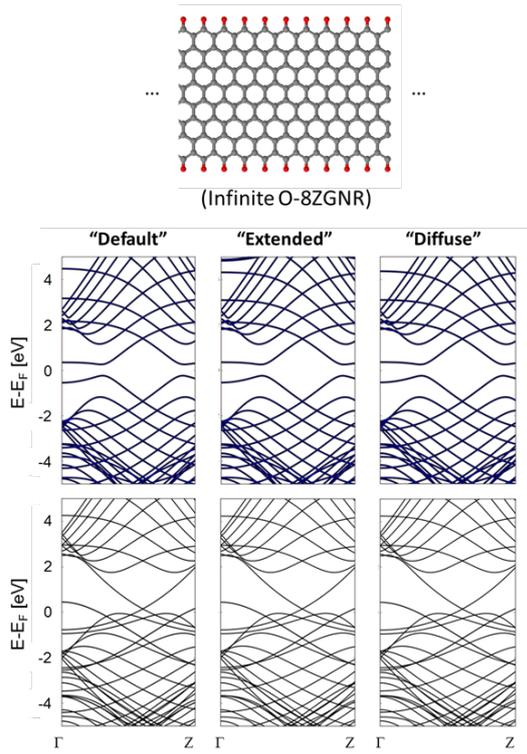


그림 2 기저함수에 따른 무한 O-ZGNR의 밴드 구조

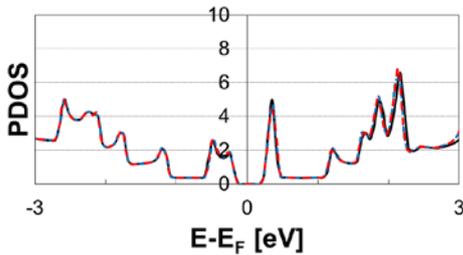


그림 3 기저함수에 따른 무한 O-ZGNR의 상태 밀도

### III. 나노 튜브 시스템에서 기저함수의 전하수송 특성에 대한 영향

다음으로 우리는 O-ZGNR 튜브 사이에 DNA 염기의 하나인 아데닌 분자가 있는 모델을 통해, 기저함수를 다르게 도입하는 것이 전하수송특성에 어떤 영향을 주는지 살펴보았다 (그림 4). 영역 3을 전극으로 삼아 무한대로 반복되도록 하였고, 전체 영역이 “Default”인 경우에서 시작하여 “Extended”, “Diffuse”까지 기저함수의 비용을 높여 보았다. “Diffuse” 기저 함수를 통해 수렴시킨 투과함수를 통해 볼 때, SIESTA “Default” 기저함수의 비용이 높아지자 진공 너머로의 원자간의 연결성이

향상되고 트랜스미션 값이 상승하는 것을 확인할 수 있다. 또한 0.5 eV ~ 1.8 eV 사이 영역에서 함수의 증감 효과와 -1.0 eV 이하 영역에서의 분자의 에너지 준위에 대한 기술이 기저함수에 의존한다는 것을 확인하였다.

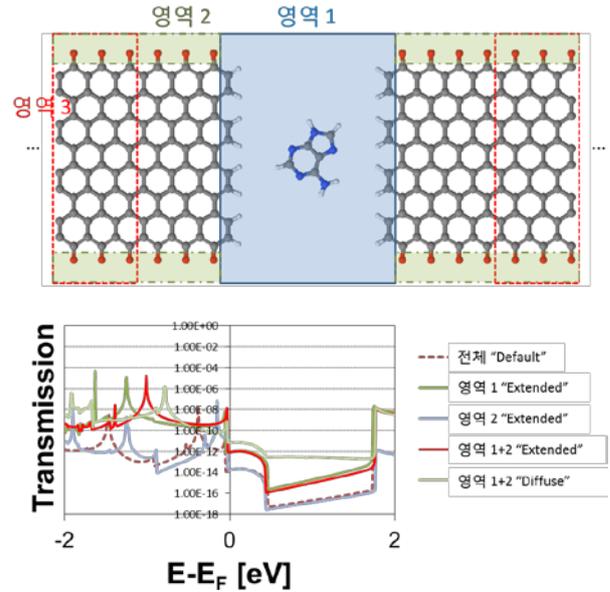


그림 4 아데닌 분자가 사이에 있는 O-ZGNR gap (12Å)

모델에서 기저함수에 따른 전하 수송 특성

### CONCLUSION

본 연구를 통해, 우리는 기저함수의 도입이 진공을 통한 전하수송의 기술에 전류값의 크기, 에너지레벨의 위치, 함수의 모양 등의 측면에서 큰 영향을 줄 수 알 수 있었다. 따라서 본 연구는 국지화된 기저함수를 이용해 진공에서의 전하수송을 기술하고 나노전자소자의 연구에 적용할 때에는 기저함수의 범위와 크기 측면에서 신중한 고려가 필요함을 시사한다.

### ACKNOWLEDGEMENT

한국 물리학회 봄 학술대회와 EDISON 사업을 위해 수고해 주신 모든 분들께 감사드립니다.

REFERENCES

- [1] J. Junquera *et al.* Phys. Rev. B **64**, 235111 (2001)
- [2] E. Artacho *et al.* Phys. Stat. Sol. (b) **215**, 809 (1999)
- [3] S. Garcia-Gil *et al.* Phys. Rev. B **79**, 075441 (2009)
- [4] G. F. Schneider, *et al.* Nano Lett. **10**, 3163 (2010)
- [5] V. Meunier *et al.* J. Chem. Phys. **128**, 041103 (2008)
- [6] H. W. C. Postma, Nano Lett. **10**, 420 (2010)
- [7] J. P. Perdew *et al.* M. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996)
- [8] S. Datta, Quantum Transport: Atom to Transistor; Cambridge University Press: Cambridge, UK, 2005.