

단층 이황 몰리브덴(MoS₂)의 밴드갭 조절연구

박민우

건국대학교 양자상 및 소자전공, 서울특별시 143-701, 대한민국
e-mail: dkruru@gmail.com

초록

소개

단층 MoS₂는 현재 트랜지스터나 LED등에 활용을 연구중인 물질이다. 단층 MoS₂의 밴드구조는 약 1.8eV의 직접 밴드갭을 보이는 반도체로 알려져있다. 이 물질을 소자에 활용할 때 고유의 1.8 eV 직접 밴드갭을 이용한다. 다양한 분야에 소자로 응용되기 위해서는 밴드갭을 조절이 필요하다. 그래서 MoS₂의 밴드갭을 조절하는 연구가 행해져 왔는데 그 중 하나가 수소흡착 방법이다. 수소를 단층 MoS₂에 흡착시키면 금속 밴드구조를 보인다고 알려져 있다. 본 연구에서는 DFT (Density Functional Theory) 계산을 통하여 밴드갭을 조절하는 다른 방법 중에 하나인 역학적인 힘에 의해 전기적인 특성의 변화에 대한 기초연구를 진행하였다. 단층 MoS₂에 in-plane 방향으로 isotropic strain을 주었을 때 밴드갭이 0.68 eV 에서 1.89 eV까지 변하는 것을 확인했다. 우리는 단층 MoS₂는 약간의 strain에도 밴드갭크기가 다소 많이 변할 뿐만 아니라 직접 밴드갭이 간접 밴드갭으로 변하는 것을 보였다. 심지어 10%정도 strain을 주면 금속으로 변할 것으로 예상된다. 밴드갭이 변하는 성질을 이용하여 센서등 여러 어플리케이션에 단층 MoS₂를 활용할 수 있을 것으로 예상된다.

이황 몰리브덴(Molybdenum disulfide, MoS₂)은 전이금속 디칼코겐나이드중 하나이다. MoS₂는 고체 윤활제로 알려져 있으며, 단층 MoS₂를 만들어 활용하는 연구도 활발히 진행되고 있다. 단층 MoS₂를 만드는 방법은 현재 구리판 위에서 키우는 방법 등이 고안되었다.⁵ 단층 MoS₂는 약 1.8 eV 직접(direct) 밴드갭 (band gap)을 갖는 반도체물질이고 트랜지스터나 LED, solar cell 등에 사용할 수 있는 것으로 알려져 있다.^{1,4, 6-9} 많은 소자에 적용되고는 있지만 만약 밴드갭을 조절되면 소자의 성능을 원하는 만큼 끌어 올릴 수 있다. 그래서 최근에 수소화(hydrogenation)등을 이용한 functionalization을 통해 전자구조를 변형시켜 밴드갭을 조절하는 방법등이 연구되고 있다.¹⁰

본 논문에서는 단층 MoS₂를 일정하게 힘을 가해 늘리고 줄였을 때 밴드갭이 어떻게 변하는지를 제 1 원리계산을 통해서 조사했다. 그래서 우리는 직접 밴드갭을 갖는 물질이 strain에 의해 쉽게 간접(indirect) 밴드갭이 될 수 있음을 알아냈고 밴드갭의 크기 또한 크게 변할 수 있음을 확인했다.

본 연구에서는 EDISON 나노-물리센터에서 제공하는 DFT에 근거한 SIESTA코드를

사용하였고¹¹ 교환상관함수(Exchange correlation functional)는 Generalized Gradient Approximation(GGA)을 사용하였다.¹² 운동에너지 Cutoff는 400eV를 사용했고, K-point grid는 $10 \times 10 \times 1$ 의 Monkhorst-Pack 방법을 이용하였다. 밴드구조계산을 할 때에는 $20 \times 20 \times 1$ 의 Monkhorst-Pack을 이용하였다.¹³ 주기적인 계산 방법을 이용하여 단층의 2차원 구조를 묘사하기 위해 평면 간에 거리를 12 Å 이상 놓고 계산하였다.

결과 및 고찰

힘을 줘서 잡아당기거나 누르는 효과를 구현하기 위해 격자 상수를 $-5\% \sim 5\%$ 바꿔가며 cell optimization을 한 뒤에 밴드구조를 계산했다. 격자 상수를 바꾼 정도를 $s(\text{strain})$ 로 다음과 같이 정의하겠다. $s = \Delta \text{격자상수} / 3.17 \times 100$. 여기서 사용한 s 는 $-5\% \sim 5\%$ 이다. 격자 상수는 $s = 0\%$ 일 때 3.17 Å을 이용했다. 만약 $s = 5\%$ 면 격자 상수는 약 3.33 Å 이다. 그림 1(a)와 1(b)는 단층 MoS₂의 구조를 보여주고 있다.

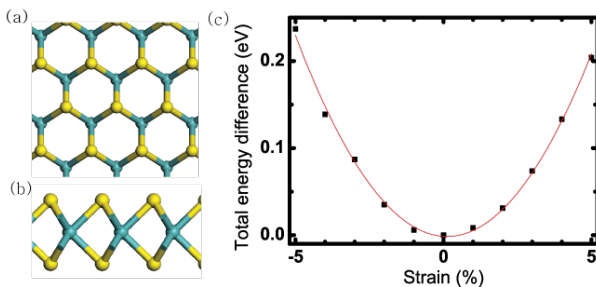


그림 1. (a), (b) 는 단층 MoS₂의 구조이다. (a)는 위에서 바라본 모습이고, (b)는 옆에서 바라본 모습이다. (c)는 Strain 에 따른 전체에너지의 변화그래프이다. $s(\text{strain}) =$

0% 일때 전체에너지를 0 으로 맞췄다. 선은 점들을 2 차함수로 피팅한 것이다.

그림 1(a)는 위에서 본 구조이고, 그림 1(b)는 옆에서 본 구조이다. 단층 MoS₂ 그래핀에서 탄소 하나를 Mo로 바꾸고 또 다른 탄소자리에 황(S) 원소 두 개가 그림 1(b) 처럼 위아래로 위치한 구조이다. 옆에서 보면 황 layer 2개 사이에 Mo layer가 들어가있는 모양이다. 그림 1(c)에는 s 대 전체에너지의 관계가 나와있다. 아무런 힘을 주지 않은 $s = 0$ 일 때 전체 에너지를 0 eV 라고 하면 $s = -5\%$ 이면 0.24 eV, $s = 5\%$ 이면 0.20 eV이다. 그림 1(c)에서 보다시피 거의 완벽한 2차함수를 따른다.

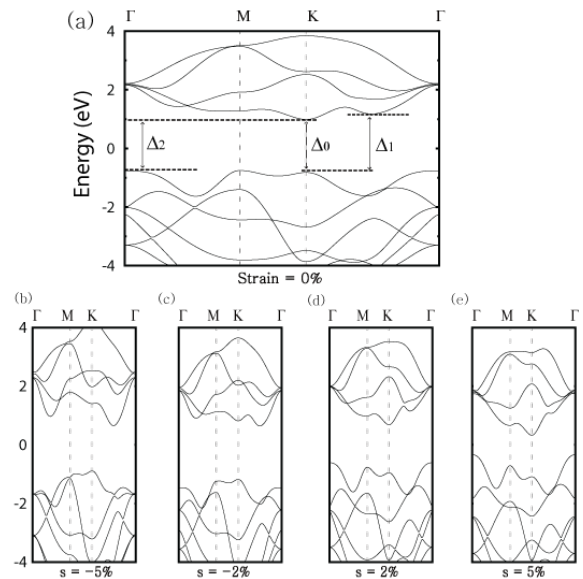


그림 2. (a)는 $s = 0\%$ 일 때의 밴드구조이다. 밴드갭에 영향을 미치는 3 가지 패스를 각각 Δ_0 , Δ_1 , Δ_2 로 표시를 했다. (b)~(e)는 각각 $s = -5, -2, 2, 5\%$ 일 때의 밴드구조이다.

그림 2에는 s 에 따른 각각의 밴드구조가 나와있다. Strain에 따라 밴드갭에 영향을 미치는 패스 3가지를 각각 Δ_0 , Δ_1 , Δ_2 이라

하겠다. Δ_0 은 K점에서 직접패스이고 Δ_1 과 Δ_2 는 그림 2(a)와 같다. s 가 줄어들면 Δ_1 을 따라 밴드갭이 형성되고, s 가 늘어나면 Δ_2 를 따라 밴드갭이 형성된다. $s = -5 \sim 5\%$ 에서 1%간격으로 계산하고 분석하여 대표적인 경우만 선별하여 그림 2(b~e)에 넣었다.

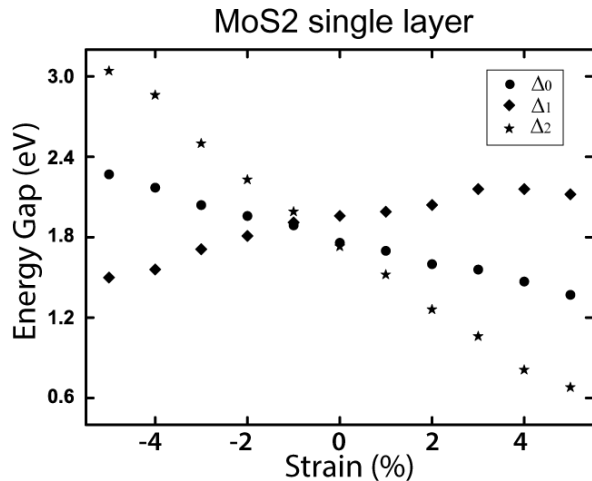


그림 3. Strain 에 따른 각각 패스의 에너지이다. 밴드갭은 각 strain 에서 가장 낮은 에너지갭이 밴드갭이다.

그림 3은 strain에 따른 각 패스의 에너지차이를 나타낸 것이다. 밴드갭에 영향을 미치는 패스는 $s = -5 \sim -2\%$ 까지는 Δ_1 이고, -1% 에선 Δ_0 , $0 \sim 5\%$ 까지는 Δ_2 이다. Δ_0 은 직접패스이고 $\Delta_{1,2}$ 는 간접패스이다. 또 보통 직접패스와 간접패스의 차이가 매우 작으면 준직접(semi-direct)이라고 하므로 $s = 0\%$ 에서는 준직접 밴드갭이다. 그림에서 보듯이 단층 MoS₂는 s 가 증가하도록 strain을 가하는 것이 s 가 감소하도록 strain을 가하는 것보다 밴드갭이 더 쉽게 변한다. $s = 10\%$ 이상 키우면 밴드갭이 없어져서 금속이 됨을 확인 했다.

결론

단층 MoS₂의 밴드갭은 strain에 민감하게 변한다. $s = -1\%$ 일 때 밴드갭이 최대로 1.9 eV가 되고 strain을 주면 갭이 줄어든다. s 를 늘릴 때 밴드갭의 변화가 더 급속히 일어난다. 특히 $s = 10\%$ 이상 이면 금속의 특성을 보일 것으로 예상된다. 또한 이 변화는 밴드갭 크기뿐만 아니라 직접 밴드갭이 간접 밴드갭으로 변하기도 한다. 직접 밴드갭은 $s = -1\%$ 일 때 잠깐 관찰되고 다른 s 에서는 간접 밴드갭이 관찰될 것으로 예측된다. 이 특성을 활용하면 트랜지스터나 LED등의 기능이나 성능을 원하는 대로 조절 할 수 있고 센서 등 여러 전자소자에 응용될 가능성이 있다.

참고문헌

- [1] Youngki Yoon et al., Nano. Lett. **11**(9), 3768 (2011).
- [2] Th. Böker et al., Phys. Rev. B **64**, 235305 (2001).
- [3] B. Radisavljevic et al., Nat. Nanotechnol. **6**, 147(2011).
- [4] Yijin Zhang et al., Nano. Lett. **12**, 437 (1982).
- [5] D. Kim et al., Langmuir **27**, 11650 (2011).
- [6] K. F. Mak et al., Phys. Rev. Lett. **105**, 136805 (2010).
- [7] Y. Ma et al., Nanoscale **3**, 3883 (2011).
- [8] S. W. Han et al., Phys. Rev. B **84**, 045409 (2011).
- [9] D. Le et al., Phys. Rev. B **85**, 075429 (2012).
- [10] Engene Wai Keong Koh et al., Hydrogen Energy **37**, 14323 (2012).
- [11] Hohenberg H. et al., Phys. Rev. B **136**(3B):B864-71(1964).
- [12] Perdew JP et al., Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [13] Monkhorst Hj et al., Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).