

# 기계적 변형을 통한 실리센의 자가 도핑 : 제일원리 전산모사

이재윤, 박기영

충남대학교 재료공학과, 대전광역시 유성구 대학로 99, 대한민국..

e-mail: dlwodbs1112@gmail.com, rldud2020@naver.com

## MANUSCRIPT SUBMISSION

최근 각광을 받았던 그래핀이 상용화 되기도 전에, 기존의 반도체 기술로도 처리 가능하고 그래핀보다 기존의 전자 장치들에 더 쉽게 집적될 수 있는 실리센이 발견되었다. 그래핀과 실리센은 벌집 격자구조로 구성되어 있는 점은 같지만 2 차원 평면구조로 된 그래핀과 다르게 실리센은 bulk 를 가진 3 차원 구조로 나타난다. [1,2] 이러한 구조로 인하여 실리센은 구조 변경이 어려웠던 그래핀의 단점을 보완하고 그래핀에서는 불가능했던 작업들을 가능하게 만들었다. 본 논문에서는 EDISON 시뮬레이션을 이용하여 안정한 실리센의 기계적, 전기적 특징과 기계적 변형을 주었을 때 실리센이 자가도핑 되는 것에 대해 연구하였다.

## INTRODUCTION

실리센은 최근에 발견 된 그래핀과 유사한 구조를 가지고 있지만, bulk 를 가진 3 차원 구조라는 점에서 차이를 보인다. 그래핀의 경우 그래파이트에서 분리해 낸 이후로 급속도로 연구가 진행되어 가고 있다. 그래핀은 2 차원 구조이며 탄소 원자 1 개의 두께를 가지고 있다.[1] 탄소원자는  $sp^3$  혼성화 결합보다  $sp^2$  혼성화 결합이 더 안정하여 2 차원의 벌집구조를 가진다. 반면에 Si 원자로 구성된 실리센의 경우  $sp^2$  보다  $sp^3$  혼성화 결합이 더 안정하여 bulk 를 가진 3 차원의 구조를 가지게 된다.[2,3] 우리는 실리센의 구조를 더 자세하게 파악하기 위하여 EDISON 의 LCAODFTLab 을 이용하여 밀도범함수이

론(DFT; Density functional theory)이 적용된 제일원리 전산모사 계산을 수행하였다.[3-5] 격자간격을 줄이거나 늘리는 방법을 이용, 시뮬레이션을 통해 실리센에 기계적 변형을 주었을 때 자가 도핑되는 모습을 밴드구조와 DOS(Density Of State) 를 통해 관찰하였고, PDOS(Partial Density Of State)를 토대로 실리센의 자가 도핑 현상을 오비탈의 변화(결합) 측면에서 살펴보았다.[7]

## METHODS

우선 실리센의 안정한 구조를 구조를 구하기 위하여 EDISON 시스템의 Linear Combination Theory 전자구조계산 SW 시뮬레이션을 이용하였다. Cell parameter 의 크기는 문헌상에 나와있는 3.868 을 이용하였고, [2-3,5] 층 간의 상호작용을 피하여 정확한 값을 구하기 위해 각 층간의 사이에 25Å 의 거리를 두고 k-sampling 을 통하여 안정한 k-point 를 구하였다.[4] 수행할 계산 방법으로 Singlepoint 를 설정, XC 함수 값으로 GGA-PBE 를 이용하여 k 값을 1~25 까지 변화시켜 에너지를 구하였다. 이 결과를 토대로 에너지 함수를 구하여 실험에 필요한 k 값을 얻어냈다.[6] 이에 따른 Cell parameter 를 얻었으며 새롭게 얻어낸 Cell parameter 를 0.05 씩 변화시키며 기계적 변형을 주었다고 가정하고 실험을 진행하였다. 기계적 변형을 주었을 때 수행한 계산 종류로는 Optimization 을 설정[5], XC 함수 값으로 GGA-PBE 를 이용하여 기계적 변형이 주어졌을 때 자가도핑 되는 원자들의 움직임을 파악하였고 계속하여 변형을 주었을 때 구조적 결함이 일어나는 부분을 찾아냈다.[6] 시뮬레이션이 추가적으로 제

공해주는 밴드 구조 도출을 이용하여 실리콘의 k-space 에서의 밴드 구조를 구하고 Cell parameter 에 따라 결합에 참여하는 오비탈의 PDOS(Partial Density Of State)를 통하여 압축 또는 인장 응력을 가했을 때 결합이 변형되는 것을 확인하고 그 이유를 추측해 보았다.

## RESULTS

### 1. 안정한 실리콘 특성 도출

시뮬레이션에 적합한 k-point 를 구하기 위하여 k-sampling 을 실시하였으며 그 결과 k 값이 16 이후부터 에너지 값이 소수점 셋째 자리부터 일정한 것이 확인 되었다. 따라서 시뮬레이션 시 오차를 줄이고 계산의 편의성을 위하여 k-point 값으로 16 을 사용, k-sampling 을 16x16x1 으로 적용하였다. (Fig. 1.) 시뮬레이션을 사용하여 얻어진 안정한 실리콘의 Cell parameter 와 bulk 길이, Si-Si 사이 거리는 각각 3.868Å, 0.70615Å, 2.34078Å 으로 산출되었다. 이때의 에너지 값은 -254.58574eV 으로 산출되

었다. (Fig. 2.)

2. 기계적 변형을 주었을 때 구조 파악  
 시뮬레이션에서 Cell parameter 를 조절하여 원자구조의 거동을 optimization 하였다. Cell parameter 를 줄여 압축 응력이 가해지도록 했을 때 bulk 길이는 점점 증가하는 것으로 나타났고, Si-Si 사이 거리는 줄어들다가 Cell parameter 값이 3.568 이후에서 증가기 시작하는 것을 확인 할 수 있었다. 이 구간을 통하여 구조적인 변화가 생긴 것으로 보여진다. 또한 3.468 보다 작은 parameter 에서 Si-Si 사이 거리와 bulk 길이가 급격하게 증가한 것을 확인할 수 있었다. 이때 실리콘 내부의 Si 원자의 결합이 sp<sup>2</sup> 혼성화 결합에서 sp<sup>3</sup> 혼성화 결합으로 구조적 변경이 일어난 것으로 보인다. 반대로 Cell parameter 를 늘려 인장 응력이 가해지도록 했을 때 Si-Si 사이 거리는 점점 증가하고, bulk 길이는 점점 줄어드는 것으로 나타났다. (Table. 1.)

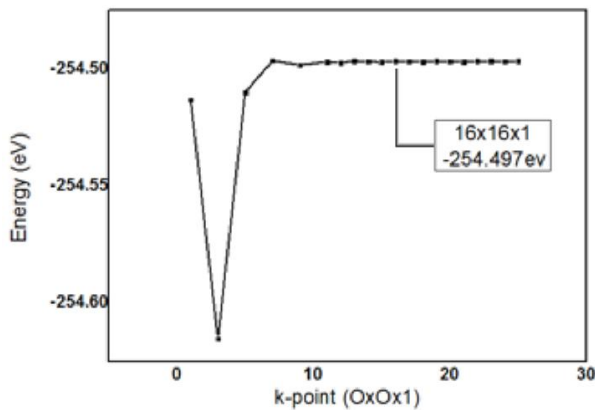


Fig. 1. K-sampling

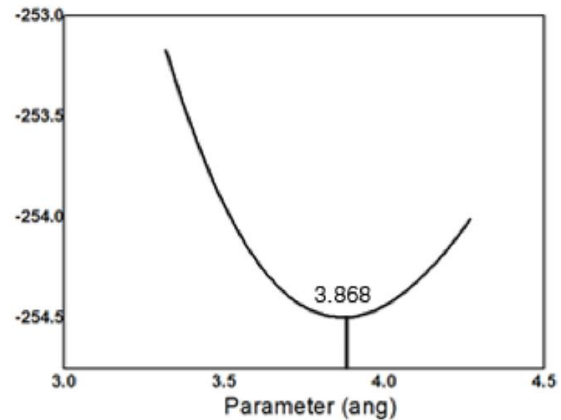


Fig. 2. 격자길이 별 에너지 그래프

Parameter	3.318	3.368	3.418	3.468	3.518	3.568	3.618	3.668	3.718	3.768	
Distance	2.84368	2.84158	2.81366	2.38591	2.35367	2.31085	2.29906	2.29506	2.30563	2.31461	
Z-axis (bulk)	2.09728	2.07119	1.99034	1.30365	1.18686	1.04536	0.95061	0.8888	0.84077	0.79231	
Parameter	3.818	3.868	3.891336	3.918	3.968	4.018	4.068	4.118	4.168	4.218	4.268
Distance	2.32662	2.34078	2.35002	2.35775	2.37486	2.39722	2.41536	2.43754	2.46226	2.48726	2.50858
Z-axis (bulk)	0.74353	0.70615	0.68827	0.6623	0.62772	0.59994	0.56465	0.53858	0.51708	0.50376	0.48129

Table. 1. Optimization of Silicene (Parameter, Distance, Energy, Z-axis (bulk))

3. 압축 또는 인장 응력에 따른 전자구조와 전기적 특성의 변화

3.868 Cell parameter 의 밴드구조(Fig. 3.1)를 보았을 때 semi-metallic 특성을 보였다. 반면에 Cell parameter 를 변화시켜 기계적인 변형을 주었을 때 밴드구조가 바뀌는 것이 확인되었다. 안정한 상태의 parameter 3.868 을  $a_0$ , 변경된 상태의 parameter 를  $a$  라 할 때  $\epsilon(\text{연신율}) = \frac{a-a_0}{a_0}$  이다. 압축 변형 시에는 페르미 레벨 아래쪽으로 움직여 n-type 의 반도체 특성을 나타내며, 반대로 인장 변형 시에 p-type 반도체 특성을 나타낸다. 시뮬레이션을 통해 DOS(Density Of State)와 결합에 참여하는 오비탈의 PDOS(Partial Density Of State)의 결과 값(Fig. 4.)을 그래프로 산출해낸 값을 보면 p-z 오비탈이 움직이면서 구조적 변형이 나타나는 것으로 보인다. 따라서 기계적 변형이 주어졌을 때, 실리콘 내부 오비탈의 움직임으로 인하여 n-type 또는 p-type 으로 자가 도핑이 된 것을 확인 할 수 있다. (Fig. 4.)

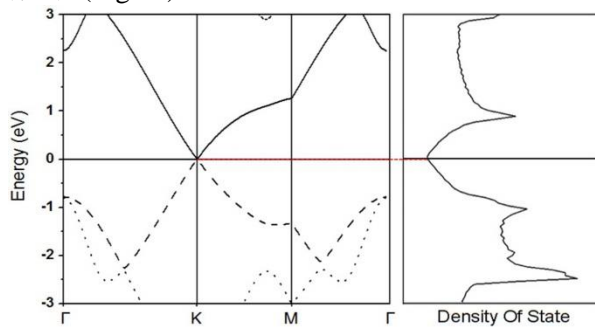


Fig. 3.1 3.868, ( $\epsilon=0$ )  
밴드구조 (semi-metallic)

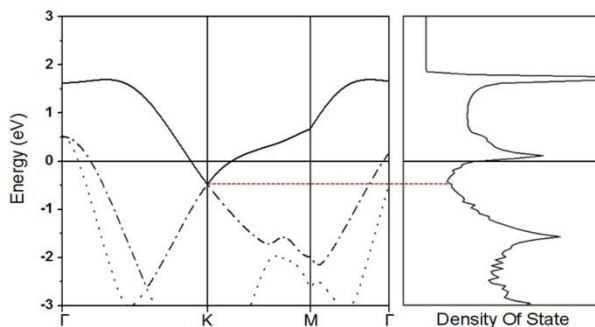


Fig. 3.2 3.568, ( $\epsilon=-0.0775$ )  
밴드구조 (n-type)

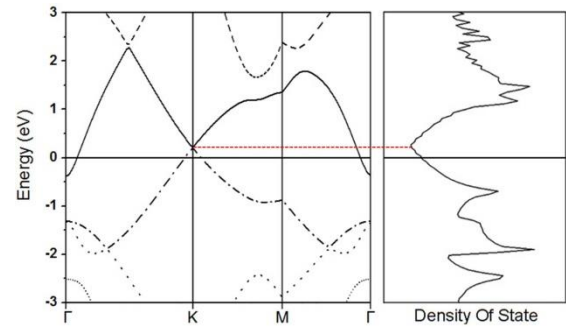


Fig. 3.3 4.268, ( $\epsilon=0.103$ )  
밴드구조 (p-type)

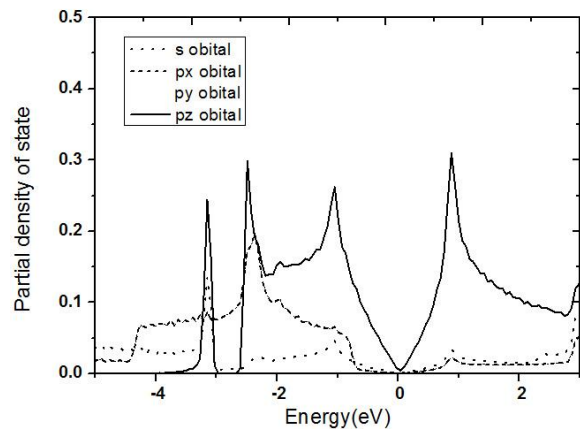


Fig. 4 (a) 3.868, ( $\epsilon=0$ )  
PDOS (semi-metallic)

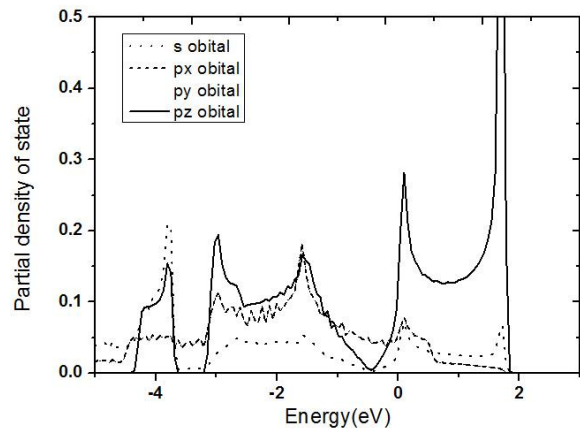


Fig. 4 (b) 3.568, ( $\epsilon=-0.0775$ )  
PDOS (n-type)

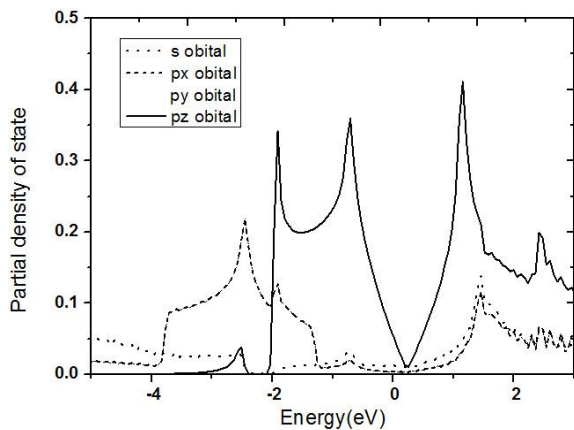


Fig. 4 (c) 4.268, ( $\epsilon=0.103$ )  
PDOS (p-type)

### CONCLUSION

본 논문에서는 실리콘에 기계적 변형을 주었을 때 자가 도핑되는 현상에 대해 알아보았다. 압축 또는 인장 응력을 많이 가했을 경우 실리콘에 구조적 결함이 생기는 점도 관찰 할 수 있었다. 압축 응력을 가했을 경우 n-type 으로 자가 도핑되는 것을 발견 할 수 있었다. 반면에 인장 응력을 가했을 경우 p-type 으로 자가 도핑되는 것을 발견 할 수 있었다. 실리콘의 경우 도핑이 될 때 원자나 분자의 흡수가 따로 필요 없기 때문에 밴드구조에서 불순물 밴드가 보이지 않는다. 또한 밴드갭이 semi-metallic 특성을 가지고 있다는 것을 알 수 있다.

최근 화두로 떠오른 그래핀의 경우 안전성이라는 장점이 있지만 2 차원 평면구조로 인하여 구부리거나 접을 때 원자적 측면에서의 구조 변경이 어려웠다. 반면에 실리콘의 경우 그래핀과 같은 벌집구조를 가지고 있지만 bulk 가 존재하여 그래핀보다 더 유연하다는 장점이 있다. 이러한 이유로 그래핀에서는 불가능했던 작업들이 실리콘에서는 가능해진 경우가 많다. 현재 실리콘은 이미 반도체의 트랜지스터 재료로 쓰이기 때문에 기존의 기술로 처리할 수 있고, 그래핀보다 기존의 전자장치에 더 쉽게 집적될 수 있다. 따라서 실리콘은 연구 초기단계이지만 앞으로 미래에 다양한 분야에서 개발 가능한 무한한 가능성을 가지고 있다고 볼 수 있다.

### ACKNOWLEDGEMENT

본 논문은 EDISON 중앙센터와 한국과학기술원 EEWs 의 지원을 받아 수행된 연구임

### REFERENCES

- [1] A. Geim, Science 324 (2009) 1530.
- [2] Yanli Wang, Yi Ding, Solid State Communications 155 (2013) 6-11
- [3] Lan Chen, Kehui Wu, Nano Lett, 2012, 12, 3507-3511
- [4] N. D.Drummond, V.Zolyomi, V.I.Fal'ko, Physical review B85, 075423 (2012).
- [5] Chang-wen Zhang, and Shi-shen Yan, J. Phys. Chem. C 2012, 116, 4163-4166
- [6] Zeyuan Ni, Qihang Liu, Kechao Tang, Jiaxin Zheng, Jing Zhou, Rui Qin, Zhengxiang Gao, Dapeng Yu, and Jing Lu, Nano Lett. 2012, 12, 113-118
- [7] Abdelkader Kara, Hanna Enriquez, Ari P. Seitsonen, L.C. Lew Yan Voone, Sébastien Vizzini, Bernard Aufray, Hamid Oughaddou, Surface Science Reports 67 (2012) 1-18