Dependence of the Electronic Structure Dependence of Si Nanowires on the Diameter

양민영
숙명여자대학교 나노물리학과, 서울특별시 140-742, 대한민국
e-mail: ymy7542@naver.com

Si nanowire는 트랜지스터, 배터리 등 광범위한 응용이 가능한 물질로서 이의 효율적 활용을 위해서는 그 다양한 구조에 대한 물성 변화의 연구가 중요하다. 이 연구에서는 [110] 방향의 4×3, 6×4, 8×5 Si nanowire에 대하여 DFT 기반 제일원리적 계산을 수행함으로써, 6 ~ 14Å 범위에서 nanowire 지름의 변화에 따른 전자구조 의존성에 대하여 연구하였다. 그 결과, bulk와 비교하여 Si nanowire의 경우 bandwidth 감소 및 bandgap의 증가가 나타나며, 이러한 경향은 nanowire 지름이 커질수록 점진적으로 약화됨을 알 수 있었다.

INTRODUCTION

Si Nanowire(SiNW)는 차세대 각광받고 있는 물질 중 하나로, 현재 많은 관심을 받고 있는 물질이다. 다른 물질에 비해 공정이 용이하고, 기존의 IC공정으로도 가능하며, 합성과정을 통해 지름, 방향성 그리고 표면 특성까지 조절할 수 있다. 또한 탄소나노튜브와 같은 다른 1차원 나노시스템에 비해 SiNW는 물리적 특성들이 구조적 변화에 의해 크게 영향을 받지 않는다는 장점이 있다.

SiNW는 바이오센서, 화학센서, 트랜지스터, 태양전지 등 다양한 분야에 이용되는데[1-4], 이러한 device들을 효율적으로 사용하기 위해서는 환경에 따른 electronic properties가 중요한 요소가 된다. 따라서 이에 영향을 주는 요소인 성장 방향이나 지름과 같은 물리적인 환경, 시스템 변화에 따른 물리적 특성변화 연구는 중요한 부분이 될 수 있다.

이 연구에서는 환경변화에 따른 electronic properties의 변화를 알아보기 위해 다양한 변수 중에 지름을 채택하였고 그 범위는 6~14 Å으로 잡았다.

기존 연구에 의하면 SiNW의 지름이 3~10Å 사이일 경우에는 주로 [110] 방향으로 성장한다고 알려져 있다 [5].

이를 바탕으로 DFT를 이용하여 [110] 방향의 SiNW의 cell size에 따라 band gap과 Density of State(DOS)가 어떻게 변하는 지 알아보았다.

METHODS

SiNW의 전자구조를 Density functional theory (DFT)를 기반으로 LCAODFT Lab [6]에 구현된 Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms (SIESTA)를 이용하여 계산하였다. 이때 Perdew, Burke, Ernzerhof의 일반화된 기울기 근사(GGA) [7]와 Troullier와 Martins의 norm-conserving pseudopotentials [8]를 사용하였다.

시뮬레이션에 사용된 구조는 Si Bulk와 Si에 H를 passivation 시킨 구조로 나뉜다. Si

[100]방향의 supercell 구조를 활용하여 주변부를 잘라내 SiNW를 만든 후 H-passivation을 시킨 것이 Fig. 1. 이다.

Fig. 1. 에서의 x축은 $[1\bar{1}0]$ 방향을, y축은 [001] 방향을 나타낸다. 4x3 NW의 가로축은 5.942Å, 세로축은 7.620Å이고, 6x4 NW는 각각 9.864Å, 10. 472Å, 8x5 NW는 각각 13.857Å, 13.240Å이다.

Si의 in-plane lattice constant는 a=5.43Å [9]을 사용했고, GGA 근사를 이용하여 (4x3), (6x4), (8x5) 구조의 SiNW를 최적화했다. 이 때 k-points grid는 1x1x6를 사용하였고 12Å의 vacuum이 반복되도록 잡아주었다. 이후 각 구조의 band gap을 계산하고 DOS와 함께 가시화하여 관찰하였다.

RESULTS and DISCUSSION

Fig. 1. 의 SiNW의 band gap을 계산하여 수치화한 것이 Table. 1. 이다.

Table. 1. Si bulk 와 SiNW 의 Energy gap 비교

	BULK	**SINW**		
(EV)		4x3	6x4	8x5
ENERGY GAP	0.844	1.111	1.052	1.007

이를 그래프로 나타낸 것이 Fig. 2. 로, Cell size가 커질수록 band gap이 감소하는 경향을 보이는 것을 알 수 있다. 이러한 결과는 [100]방향으로 진행한 연구와 비슷한 경향을 보인다는 것을 알 수 있다 [10].

Bulk일때와 SiNW를 비교하였을 때, SiNW의 형태에서 gap이 약간 더 증가하는 모습을 보였다.

Fig. 3. 는 각 system의 DOS를 비교 한 것으로 NW의 경우, bulk와 비교하였을 때 지름이 작아질수록 Valence band의 bandwidth가 작아지는 것을 알 수 있었고, 이런 효과는 특히 SiNW의 지름이 가장 작은 4x3 cell 에서 뚜렷하게 나타나고 있음을 볼 수 있다.

CONCLUSION

이 연구에서는 SiNW의 size에 따른 band gap 특성을 연구하기 위하여 DFT를 이용해 [110] direction의 Si supercell을 다양하게 제작하여 H를 passivation 시킨 후, 각 구조의 band gap과 DOS를 계산하고 비교해보았다.

각 구조의 band gap은 NW의 지름이 커질수록 감소하는 경향을 보인다는 것과 지름이 작아질수록 Valence band의 bandwidth가 작아진다는 것을 알 수 있었다.

ACKNOWLEDGEMENT

연구 주제선정에 도움을 주신 김미영 교수님과 김한철 교수님, 그리고 논문 작성에 대해 여러가지 조언을 해주신 현정민 선배님께 감사드립니다. 또한 본 계산이 가능하도록 프로그램을 제공해주신 LCAODFT 프로그램 개발자 분과 EDISON Nanophysics 관계자 분께 감사드립니다.

REFERENCES

[1] Guo-Jun Zhang, Li Zhang, Min Joon Huang, Zhan Hong Henry Luo, Guang Kai Ignatius Tay, Eu-Jin Andy Lim, Tae Goo Kang and Yu Chen, *Sensors and Actuators B*, **146**, 138 (2010).

[2] X.T. Zhou, J.Q. Hu, C.P. Li, D.D.D. Ma, C.S. Lee and S.T. Lee, *Chemical Physics Letters*, **369**, 220 (2003).

[3] Kirsten Emilie Moselund, Mohammad Najmzadeh, Peter Dobrosz,Sarah H. Olsen, Didier Bouvet, Luca De Michielis, Vincent Pott and Adrian M. Ionescu, *IEEE Transactions on Electron Devices*, **57**, 866 (2010).

[4] Kui-Qing Peng and Shuit-Tong Lee, *Adv. Mater.* **23**, 198 (2011).

[5] Yue Wu, Yi Cui, Lynn Huynh, Carl J. Barrelet, David C. Bell and Charles M. Lieber, *Nano Letters*, **4**, 433 (2004).

[6] http://nano.edison.re.kr.

[7] J. P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).

[8] N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. Rev. B*, **43**, 1993 (1992).

[9] Stanley Wolf and Richard N Tauber, *Silicon Processing for the VLSI Era*, **1**, 647 (1986).

[10] Mehedhi Hasan, Md Fazlul Huq and Zahid Hasan Mahmood, *SpringerPlus*, **2**, 151 (2013).

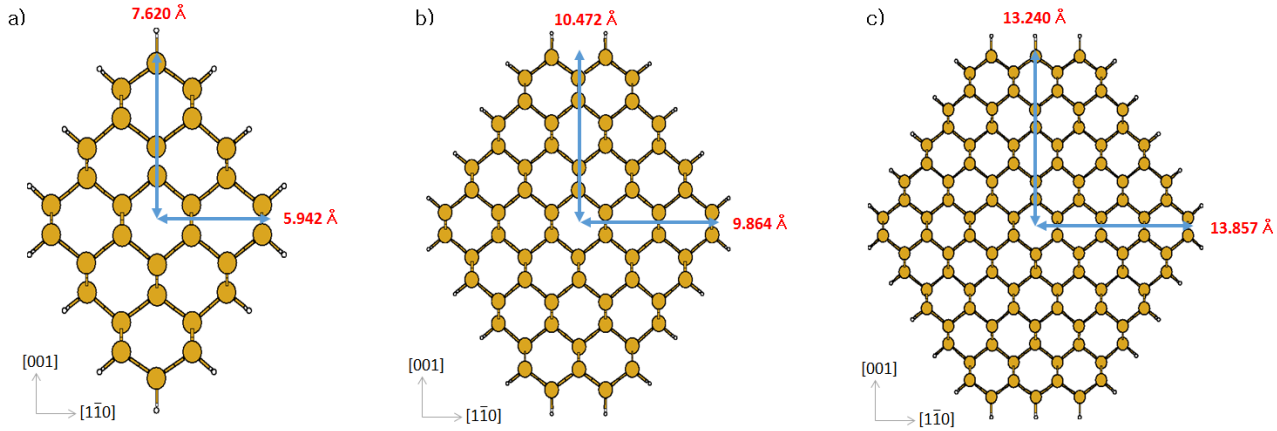

Fig. 1. a) 4x3, b) 6x4, c) 8x5 크기의 [110] 방향 H-passivated SiNWs. 노란색은 Si, 하얀색은 H 원자를 나타낸다. x 축은 [1$\bar{1}$0], y 축은 [001] 방향이다. a)의 가로축은 5.942Å, 세로축은 7.620Å 이고, b)는 각각 9.864Å, 10. 472Å, c)는 각각 13.857Å, 13.240Å 이다.

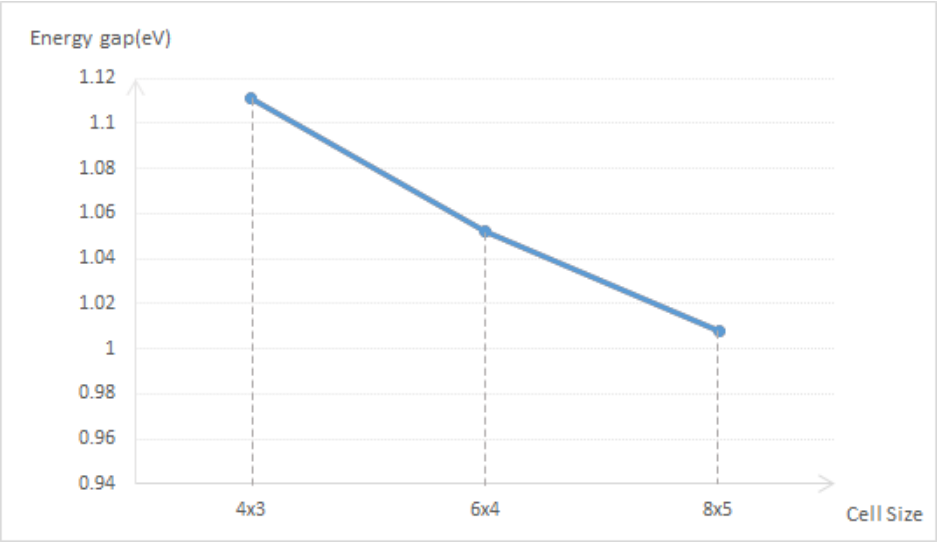

Fig. 2. [110] 방향 SiNW 의 크기에 따른 band gap 비교. 각 Cell 의 크기는 4x3, 6x4, 8x5 이다.

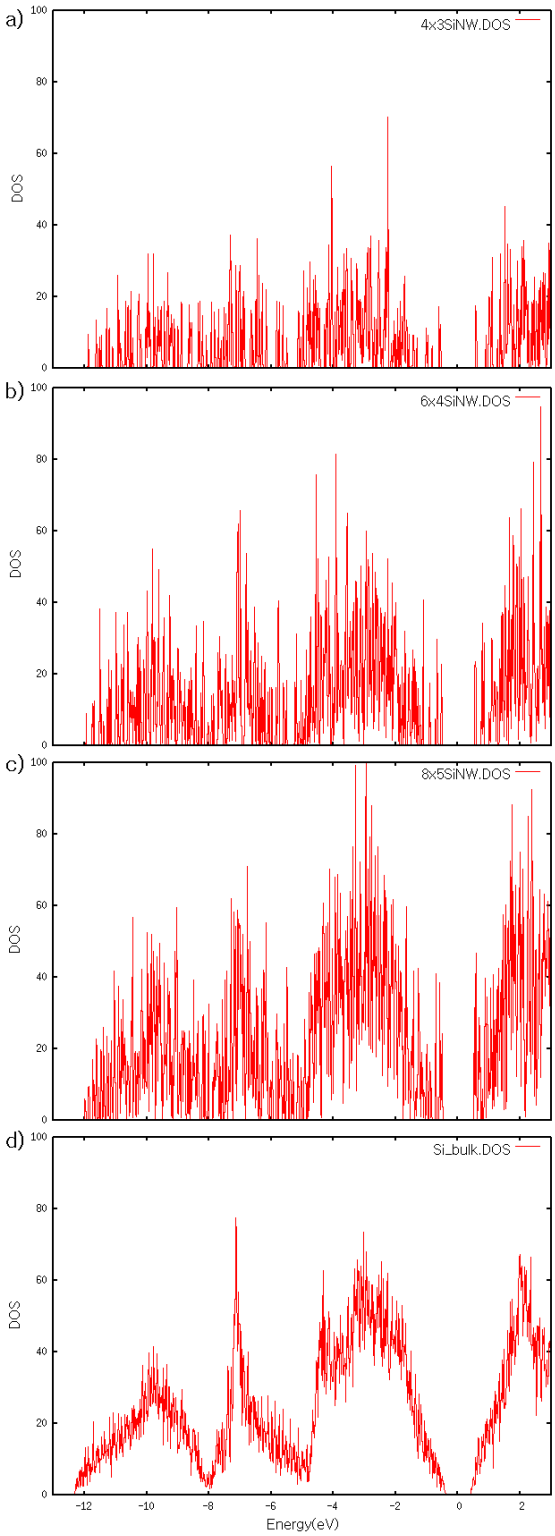

Fig. 3. a) 4x3, b) 6x4, c) 8x5 SiNW 와 d) Si bulk 의 DOS 비교. x 축은 Energy level, y 축은 DOS 를 나타낸다. x 축의 범위는 [-13:3], y 축의 범위는 [0:100]이다. 각각의 그래프는 Fermi energy 가 0 이라는 기준 하에 그렸다.