

# Geometry Optimization of Au Adsorption on MoS<sub>2</sub> Monolayer

홍유진

숙명여자대학교 나노물리학과, 서울특별시 140-742, 대한민국

e-mail : hyjk30@naver.com

MoS<sub>2</sub> monolayer에 Au 원자를 흡착시켰을 때 가장 안정한 위치를 찾아내기 위한 연구를 수행하였다. 이를 위하여 MoS<sub>2</sub> 1x1 unit cell 위의 on-top, bridge, hollow 위치에 Au 원자를 놓고 DFT 기반 제일원리 계산을 통하여 최적화된 구조에서의 에너지를 계산, 비교하였다. 그 결과 S 원자 위에 Au 원자가 흡착 되었을 때 가장 안정한 구조를 이루는 것을 알 수 있었다.

## 1. INTRODUCTION

일반적으로 MoS<sub>2</sub>는 Hexagonal 구조를 이루는 매우 안정적인 물질로 산화작용이 잘 일어나지 않는다. 또한 자연 상에서 n-type 도핑이 되어있고 [1], 전이금속 칼코겐화합물 (Transition metals chalcogenide)로 van der Waals 힘을 받고 있는 층상구조를 갖는다. on/off switching이 빠른 특징이 있으며 [2], 에너지 띠틈 (energy band gap)을 갖는 semiconductor의 특성을 보인다. 이러한 특성에 따라 현재 MoS<sub>2</sub> 연구 분야 중 transistor 응용을 위한 연구가 가장 활발히 진행 중에 있다. 최근 한 연구에서 Au에 Mo를 주입하고 S를 차례로 주입하여 MoS<sub>2</sub>가 생성되는 반응을 발견한 연구가 발표되면서 많은 주목을 받았다 [3]. 이에 따라 MoS<sub>2</sub>와 Au간의 반응에 관해 다시 한 번 관심이 집중되고 있다. MoS<sub>2</sub> transistor 연구 중 전극으로 Au를 이용하고 있는 연구가 과거에 많이 수행 중이었지만 잘 이루어지지 않았다. 또한 그 이유 역시 명확히 밝혀진 바가 없다.

이 연구에서는 MoS<sub>2</sub> 표면에 Au를 흡착시키는 방법을 시도해 보았다. MoS<sub>2</sub> monolayer의 1x1 unit cell 에 Au 원자 한 개가 흡착 될 경우 최적화 된 구조를 구하고 그 때의 에너지를 비교하여 가장 안정된 흡착 구조를 예측하고자 하였다.

## 2. METHODS

Density functional theory (DFT)를 기반으로 Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms (SIESTA)를 이용하여 Ab initio 계산을 수행할 수 있는 LCAODFT Lab을 사용하였다 [4]. 전자와 전자의 상호작용은 Perdew, Burke, Ernzerhof의 Generalized Gradient Approximation (GGA)을 이용하고 [5], 이온과 전자 사이의 상호작용은 Troullier-Martins의 pseudopotentials을 사용하였다 [6]. Au 원자의 흡착을 연구하기 위한 시뮬레이션 셀은 1x1 primitive unit cell을 갖는 MoS<sub>2</sub> monolayer와 12Å 두께의 진공이 반복되도록 잡았다. Brillouin zone에서의 운동량 공간 적분은 8x8x1 k-points grid를 사용

했다. MoS<sub>2</sub>의 in-plane lattice constant는 실험적으로 밝혀진 값인  $a=3.15\text{\AA}$ 을 사용했다 [7].

### 3. RESULTS and DISCUSSION

MoS<sub>2</sub> monolayer 1x1 Primitive unit cell의 구조는 Fig. 1.과 같이 Mo 1개 당 S가 2개 씩 결합되어 있고, 위에서 보았을 때 육각형 구조를 이루고 있다.

MoS<sub>2</sub> monolayer 1x1 unit cell에 Au 원자가 흡착 가능한 자리는 Fig. 1.에서 보이는 네 가지 경우이다. H는 hollow 위치, B는 bridge 위치, T<sub>S</sub>는 S 원소의 on-top 위치이고, 마찬가지로 T<sub>Mo</sub>는 Mo원소의 on-top 위치이다. 네 가지 서로 다른 흡착위치를 계산한 결과 B위치에 흡착된 Au 원자는 불안정하여 H위치로 이동하였다. 나머지 3가지 흡착위치는 안정한 구조를 형성하였고, 최적화된 원자구조는 Fig. 2.와 같다. Figure 2 (a)에서 S와 Au 사이의 거리는  $3.0895\text{\AA}$ 이고, Fig. 2. (b)에서 Mo와 Au 사이의 거리는  $4.6714\text{\AA}$ 이다. Fig. 2. (C)에서 S와 Au 사이의 거리는  $3.4945\text{\AA}$ 이고, Mo와 Au 사이의 거리는  $4.9891\text{\AA}$ 이다.

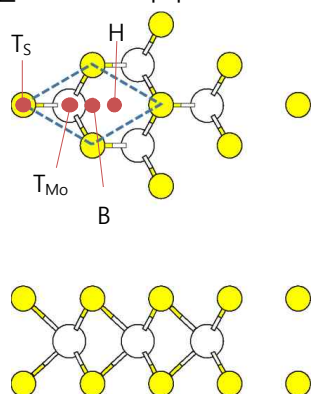


Fig. 1. 1x1 MoS<sub>2</sub> monolayer의 위에서 본 모양과 옆에서 본 모양. 흰색 원자는 Mo, 노란색 원자는 S이다. 파란색 점선의 마름모는 Primitive unit cell이다. H는 hollow 위치, B는 bridge 위치, T<sub>S</sub>는 S 원소의 on-top 위치이고, 마찬가지로 T<sub>Mo</sub>는 Mo원소의 on-top 위치이다.

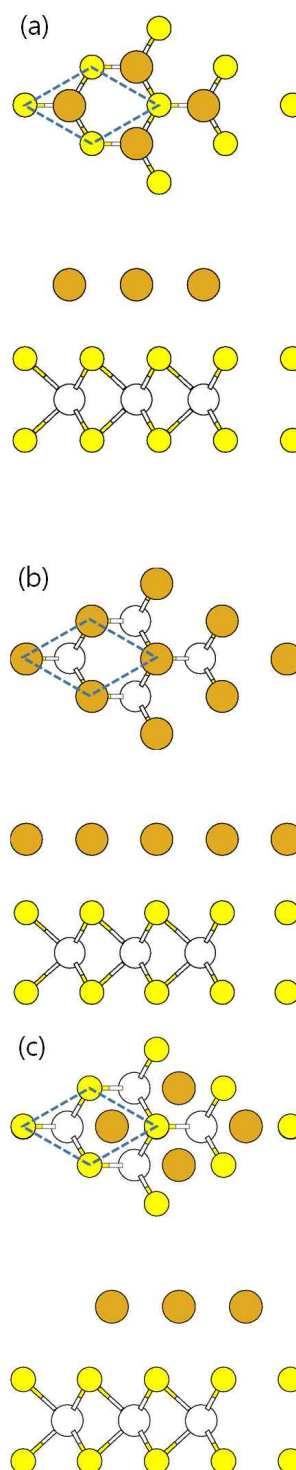


Fig. 2. 1x1 MoS<sub>2</sub>에 Au 원자 1개 흡착했을 때 위에서 본 모습과 옆에서 본 모습. (a) Au 원자가 T<sub>S</sub> 위치에 흡착시켰을 때의 모습이다. (b) Au 원자가 T<sub>Mo</sub> 위치에 흡착시켰을 때의 모습이다. (c) Au 원자가 H 위치에 흡착시켰을 때의 모습이다.

흡착 된 Au 원자의 가장 안정한 위치를 찾기 위해 다음 공식을 통해서 원자 당 binding energy ( $E_{Au}^b$ )를 계산하였다.

$$E_{Au}^b = (E_{MoS_2} + n\mu_{Au} - E_{total})/n$$

여기에서  $\mu_{Au}$ 는 Au 원자의 화학적 포텐셜 이고,  $E_{MoS_2}$ 은 MoS<sub>2</sub> monolayer의 가장 안정한 상태의 에너지이다. n은 Au 원자의 수,  $E_{total}$ 는 Au가 흡착 된 MoS<sub>2</sub>의 에너지이다. T<sub>S</sub>, T<sub>Mo</sub>, H 세 위치에서의 binding energy는 Table. 1.에 나타낸 바와 같고, T<sub>S</sub> 위치가 가장 안정한 위치로 밝혀졌다.

Table. 1. 1-Au binding energy 비교.

1-Au binding energy (eV)	
clean	-
T <sub>S</sub>	0.187
T <sub>Mo</sub>	0.174
H	0.185

추후 연구에서 2x2 MoS<sub>2</sub> unit cell을 잡고 Au 원자가 한 개 흡착하였을 때 최적화된 구조와 에너지를 계산하고, Au 원자가 하나 더 추가 될 경우 이 값이 어떻게 변화하는 지 비교하는 연구를 진행 할 예정이다.

#### 4. CONCLUSION

이 연구에서는 MoS<sub>2</sub> monolayer 1x1 Primitive unit cell에 Au를 흡착시키는 경우에 대하여 DFT를 기반으로 구조 최적화 계산을 수행함으로써, Au 가 S 원자 위에 3.0895Å의 원자간 거리를 가지고 흡착되는 구조가 가장 안정하다는 것을 알 수 있었다. 또한 Hollow 위치에 흡착된 Au도 S 위에 흡착된 Au에 비하여 약 2

meV 정도의 매우 작은 결합에너지 차이를 보임으로서 비교적 안정된 흡착 구조를 이룰 수 있을 것으로 예측되었다.

#### ACKNOWLEDGEMENT

이번 연구에 많은 도움을 주신 김한철 교수님과 김미영 교수님께 감사드립니다. 또한 연구관련 조언과 논문 작성에 도움을 주신 노지영 선배님과 현정민 선배님께 감사드립니다. SIESTA 계산이 가능하도록 프로그램을 제공해 주신 EDISON 관계자 분들 및 LCAODFT 프로그램 개발자분들께 감사드립니다.

#### REFERENCES

- [1] D. J. Kim, and J. W. Choi, *물리학과 첨단기술* **21**, 15 (2012).
- [2] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti and A. Kis, *Nat. Nanotech.* **6**, 147 (2011).
- [3] Intek Song, Chibeom Park, Misun Hong, Jaeyoon Baik, Hyun-Joon Shin and Hee Cheul Choi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53**, 1266 (2014)
- [4] <http://nano.edison.re.kr>.
- [5] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [6] N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 1993 (1992).
- [7] A. Molina-Sánchez and L. Wirtz, *Phys. Rev. B* **84**, 155413 (2011)