

# 실리신(Silicene)의 치환형 전이금속에 대한 제 1 원리 계산: 구조적, 자기적 성질

유동선, 강기재\*

서울대학교 재료공학부, 서울특별시 관악구 관악로 1, 대한민국.  
e-mail: will1792@snu.ac.kr, rkdr1wo@snu.ac.kr

실리신의 single vacancy에 Sc부터 Zn까지 전이금속을 넣고 이에 따른 실리신의 자기 모멘트와 구조 변화를 density functional theory(DFT) 계산을 통해 알아보았다. 실리신은 그래핀(Graphene)과는 다소 다른 경향을 보였으며, 이는 실리신의 buckled 구조와 결합 길이의 차이로 인한 것으로 생각된다. 자기 모멘트는 전이금속 impurity에 큰 영향을 받았다.

## INTRODUCTION

그래핀은 그 특이한 성질로 인해 집중적으로 연구되고 있다. 현재의 Si 기반 전자산업에 그래핀을 활용하기는 어렵기 때문에 이와 비슷한 4족 원소인 Si, Ge의 그래핀과 비슷한 구조의 가능성에 대해서도 연구가 진행됐다. 그 중 실리신은 은의 (1 1 1) 표면 위에 합성하는 데 성공했다[1]. 또한 실험을 통해 은의 (1 1 1) 표면 위에 존재하는 실리신에 그래핀과 같은 Dirac Fermion이 존재함이 입증되었다[2]. 실리신은 field effect transistor(FET)에 응용될 수 있는 유망한 물질이며[3], 그래핀보다 강한 spin-orbit coupling으로 인한 Quantum spin Hall Effect가 실리신에서 발견되어 spintronics에도 중요한 물질이다[4]. 그래핀의 치환형 전이금속에 대한 제 1 원리 계산 연구가 수행되었으나[5,6], 실리신에 대해 이를 수행한 연구는 없다. 실리신과 전이금속과의 상호작용, impurity가 실리신의 성질에 미치는 영향을 알아보기 위해 실리신에 대해서도 비슷한 연구가 필요하다.

## METHODS

국소 기저 함수를 이용하는 SIESTA에 기반을 둔 EDISON Nanophysics의 LCAODFTLab과, 평면파 기저 함수를 이용하는 VASP으로 DFT 계산을 수행했다. 모든 계산은 Perdew-Burke-Ernzerhof GGA(PBE-GGA)를 사용했다. 계의 크기는  $4 \times 4$  수퍼셀로 충분한 것으로 알려져 있으므로[6], 모든 계산은 32개의 원자로 이루어진  $4 \times 4$  수퍼셀로 계산했으며 층간 상호작용의 효과를 배제하기 위해 층 사이에 15 Å의 진공을 두었다. 높은 k-point 수에

대해 에너지 수렴 정도를 판단하여 에너지가 충분히 수렴하는 크기의 gamma-centered Monkhorst-Pack  $9 \times 9$ 를 사용했으며, cutoff는 기본값이 충분한 것으로 판단하여 기본값을 사용했다. 최적화에는 conjugate-gradient 알고리즘으로 원자가 받는 힘이  $0.02 \text{ eV/\AA}$  이하가 될 때까지 구조를 안정화했다. 전자 구조를 계산할 때에는 에너지 변화가  $1 \times 10^{-4} \text{ eV}$  이하가 될 때까지 self-consistent 계산을 했다.

계산의 신뢰성을 얻기 위해 기존 계산 결과가 제시된 그래핀에 대해서도 계산을 수행했다. VASP을 사용해서 순수한 그래핀과 실리신의 격자길이를 변화시켜가며 에너지를 계산하여 격자길이를 구하고 한 원자를 전이금속으로 치환하여 M@SV를 만들었다. 다시 최적화할 때는 격자길이를 고정했다. 최적화 과정에서 스핀을 0으로 고정하여 Jahn-Teller 뒤틀림이 일어난 구조를 얻고, 스핀을 고정하지 않고 구조를 얻어 에너지가 더 낮은 구조를 최종 구조로 정했다. 최종 구조에 대해 자기 모멘트 계산을 수행했다. LCAODFTLab은 주로 VASP의 계산 결과를 확인하는 용도로 사용했다.

## RESULTS & DISCUSSION

가장 안정한 그래핀 단위셀의 격자길이는  $2.467 \text{ \AA}$ 로 계산되었으며, 전이금속들에 대해 M@SV의 자기 모멘트를 계산한 결과는 그림. 1과 같다. 기존 연구의 계산 결과[5,6]와 구조적 특성과 자기 모멘트가 잘 일치하는 것을 확인했다.

가장 안정한 실리신 단위셀의 격자길이는  $3.87 \text{ \AA}$ 로 계산되었으며, Sc, Ti, Mn, Co, Ni, Cu는 Jahn-Teller 뒤틀림이 일어난 구조가 더 안정했다.

대부분 전이금속이 위로 밀려 올라간 구조였지만 Cu와 Zn는 아래로 내려간 구조가 더 안정했다. M@SV의 자기 모멘트를 계산한 결과는 그림. 2와 같다. 실리신은 그래핀과 구조가 비슷하며 원자가 전자의 수가 같음에도 자기 모멘트의 양상이 전혀 다르게 나타났다.

이 차이는 실리신의 buckled 구조의 영향과 결합 길이 차이의 영향이 복합적으로 작용한 결과인 것으로 생각된다. Buckled 구조로 인해 결합 오비탈의 성분이 바뀌어 그래핀의 모델과 에너지 준위가 달라지게 된다. 또한 기존 연구[6]에서 0의 자기 모멘트를 보이는 Fe도 결합길이를 임의로 늘리면 에너지 준위의 위치가 바뀌면서 높은 자기 모멘트를 보여주는 것을 보여주었다. 전자의 배치가 exchange 에너지와 Coulomb interaction 에너지, 에너지 준위 차이로 인해 달라지고 이에 따라 자기 모멘트가 크게 달라질 수 있기 때문이다.

#### CONCLUSION

그래핀과의 유사성에도 불구하고 실리신은 치환형 전이금속에 대해 다른 자기모멘트와 구조적 특성을 보였다. 이는 실리신의 buckled 구조와 결합 길이의 차이 때문으로 생각된다. Nanoelectronics와 spintronics에 응용되기 위해서는 impurity를 포함한 defect가 실리신의 성질에 미치는 영향에 대한 더 심도 있는 연구가 이루어져야 할 것이다.

#### ACKNOWLEDGEMENT

도움주신 서울대학교 재료공학부 한승우 교수님과 서울대학교 전산재료 연구실, 그리고 EDISON 나노물리 전문센터와 EDISON에 도움주신 분들께 감사의 말씀 올립니다.

#### REFERENCES

- [1] B. Lalmi et al., Appl. Phys. Lett. **97**, 223109 (2010).
- [2] L. Chen et al., Phys. Rev. Lett. **109**, 056804 (2012).
- [3] S. Trivedi et al., J. Comput. Theor. Nanosci. **11**, 1-8 (2014).
- [4] C. C. Liu et al., Phys. Rev. Lett. **107**, 076802 (2011).
- [5] A. V. Krasheninnikov et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 126807 (2009).
- [6] E. J. G. Santos et al., New J. Phys. **12**, 053012 (2010).

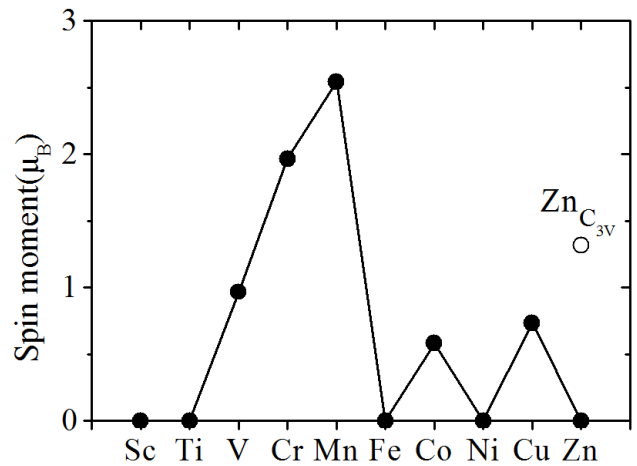


그림. 1. 그래핀의 자기 모멘트

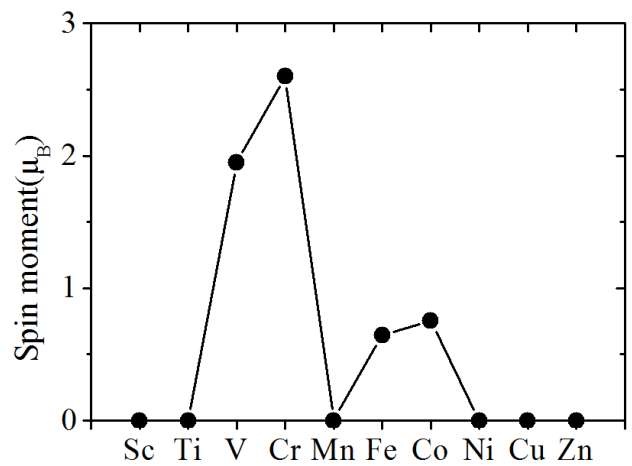


그림. 2. 실리신의 자기 모멘트