

혼합지그자그형 그라판/그라펜/불화그라판나노띠의 구조적 안정성과 전자적성질에 대한 제 1 원리적연구

리남철, 김철학, 리수일

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《새 재료부문을 발전시키지 않고서는 전자공업을 주체적으로 발전시킬수 없고 기계공업의 현대화를 실현할수 없으며 최신과학기술을 전반적으로 발전시킬수 없습니다.》

(《김정일선집》 증보판 제15권 487페이지)

그라펜을 일정한 나노띠폭으로 자른 준1차원그라펜나노띠는 순수한 그라펜과는 달리 금지띠너비를 가진 반도체재료이다.[1, 2] 특히 지그자그형그라펜나노띠는 변두리부분에 상대적으로 높은 전하밀도를 가지고있는것으로 하여 이 부분들을 화학적으로 기능화시키면 계의 전자적성질들을 효과적으로 변화시킬수 있다.[3] 또한 그라판(그라펜의 아래웃면들을 H원자들로 흡착시킨 계)과 불화그라판(그라펜의 한쪽면은 H원자로, 다른쪽면은 F원자로 흡착시킨 계)은 3eV이상의 넓은 금지띠너비를 가진 혼합계로서 나노척도의 전자소자개발에서 주목되는 재료로 되고있다.[1, 4]

우리는 지그자그형그라펜나노띠의 량쪽변두리를 그라판과 불화그라판으로 부분적으로 동시치환한 새로운 혼합계모형을 제기하고 치환너비에 따르는 전자적성질의 변화특성을 제1원리적방법으로 고찰하였다.

1. 계 산 방 법

계의 안정성을 위하여 혼합계들의 변두리 C원자들을 H원자들로 포화시키고 나노띠폭이 6, 7, 8인 혼합지그자그형 그라판/그라펜/불화그라판나노띠모형에 대하여서만 고찰을 진행하였다. 여기서 나노띠폭은 초세포의 가로축에 놓이는 C원자들의 개수로 정의한다. 이러한 혼합계의 구조적안정성과 전자적성질들은 밀도범함수이론에 기초한 제1원리계산 프로그램 Quantum-Espresso를 리용하여 고찰하였다. 매 원자에 대하여 USPP의포텐살들을 리용하였으며 교환상관포텐살은 PBE-GGA이고 평면파토대조의 운동에너지절단값은 45Ry로, 구조완화계산에서 이온사이 힘의 수렴값은 $2 \times 10^{-4} \text{ Ry}/a_0$ (a_0 은 보아반경)으로 설정하였다. 혼합계들의 치환너비에 따르는 구조적안정성을 평가하기 위하여 형성에너지를 계산하였다.

$$E_{\text{형}} = E_{\text{전}} - (\chi_C \mu_C + \chi_H \mu_H + \chi_F \mu_F)$$

여기서 $E_{\text{전}}$ 은 혼합계의 전에너지, μ_C 는 C원자의 화학포텐살, μ_H (μ_F)는 H_2 (F_2)분자들의 결합에너지의 절반값이다. 그리고 χ_C , χ_H , χ_F 는 각각 C, H, F원자들의 몰분률이다.

2. 계산결과와 해석

나노띠폭이 7인 혼합지그자그형 그라판/그라펜/불화그라판나노띠의 최량화된 구조모형을 그림 1에 보여주었다. 그림 1에서 1, 2, 3은 그라판과 불화그라판나노띠가 그라펜나노띠

의 랑쪽변두리에 1, 2, 3의 나노띠폭으로 치환된 너비를 나타내며 이것을 각각 1-치환, 2-치환, 3-치환이라고 부른다. 나노띠폭이 6, 8인 혼합계들도 이와 유사한 모형을 가진다.

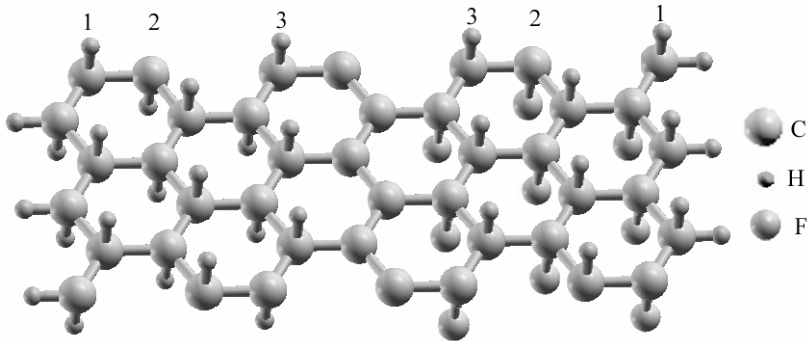


그림 1. 나노띠폭이 7인 혼합지그자그형 그래판/그래펜/불화그래판나노띠의 최량화된 구조모형

표. 형성에너지(Ry)			
치환너비	나노띠폭		
	6	7	8
1-치환	-0.038	-0.035	-0.031
2-치환	-0.042	-0.038	-0.033
3-치환	-0.045	-0.041	-0.037

형성에너지계산결과는 표와 같다. 표에서 보는바와 같이 모든 혼합계들은 부의 형성에너지를 가지며 따라서 구조적으로 안정하다. 또한 같은 나노띠폭을 가진 혼합계들에서는 치환너비가 증가할수록 구조적으로 더 안정해진다. 그것은 치환너비가 증가할수록 H와 F원자들에 의한 흡착면적이 증가하기 때문이다. 그러나 치환너비가 같다고 하여도 나노띠폭이 증가할수록 계들은 더 불안해진다.

스핀이 분극된 혼합계들의 에너지띠구조는 그림 2와 같다.

그림 2에서 보는바와 같이 나노띠폭이 6과 7인 혼합계들은 1-치환된 경우 스핀분극에

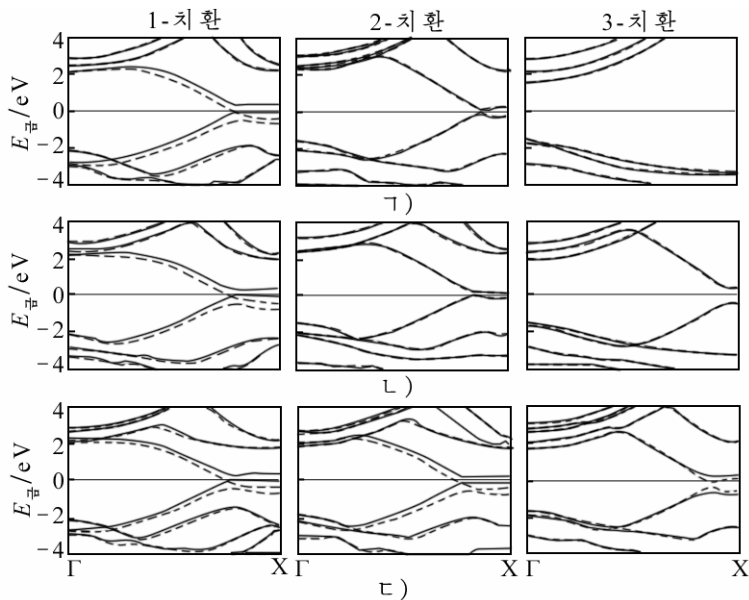


그림 2. 스핀이 분극된 혼합계들의 에너지띠구조
 a) - c)는 혼합계의 나노띠폭이 각각 6, 7, 8인 경우
 점선은 업스핀, 실선은 다운스핀

의하여 에너지를 띠구조가 서로 차이나는 특성을 가지지만 치환너비가 증가할수록 스핀분극에 의한 에너지를 띠구조의 차이가 거의 없는 축퇴현상이 일어난다. 이와 함께 2-치환된 경우 혼합계들은 약 $0.12 \sim 0.19 \text{ eV}$ 의 좁은 금지띠너비를 가진다. 특히 3-치환된 나노띠폭이 6인 혼합계는 1-, 2-치환의 경우와는 달리 페르미준위근방의 Γ 점에서 3.1 eV 이상의 넓은 직접금지띠를 가진다. 이것은 나노띠폭이 6인 불화그라판나노띠의 금지띠가 약 3.13 eV 라는 선행연구의 결과[3]와 거의 유사하다. 이로부터 그라판과 불화그라판이 작은 나노띠폭을 가진 지그자그형그라판나노띠에 치환될 때 서로 유사한 전자적성질들을 가진다는 것을 알 수 있다. 한편 나노띠폭이 8인 혼합계들에서는 스핀분극에 의한 에너지를 띠구조들이 서로 차이나는 특성을 가진다. 이와 같이 그라판과 불화그라판이 동시치환된 혼합계들은 치환너비와 나노띠폭에 따라 $0.12 \sim 3.1 \text{ eV}$ 의 금지띠너비를 가지는 반도체들이다.

개별적인 원자들이 계의 상태밀도에 미치는 영향을 고찰하기 위하여 치환너비에 따르는 혼합계들의 상태밀도를 계산하였다.(그림 3)

그림 3에서 보는바와 같이 1-치환된 혼합계의 상태밀도는 기본적으로 C원자들로 분포되는데 그것은 계를 구성하는 원자들이 대부분 C원자들이기 때문이다. 그러나 치환너비가 증가할수록 전기음성도가 큰 F원자의 기여분이 점점 증가하게 된다.

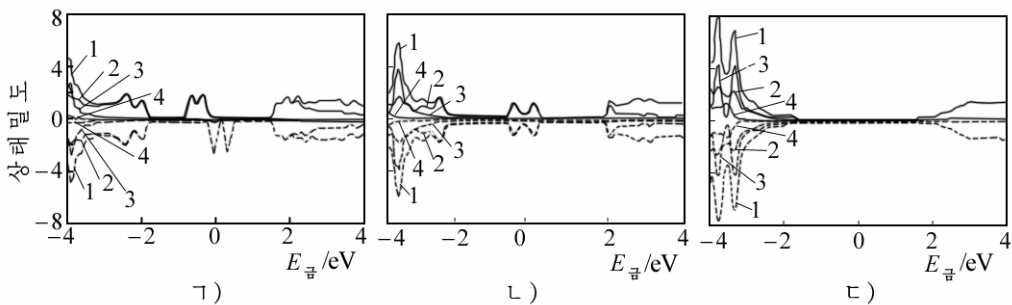


그림 3. 나노띠폭이 6인 혼합계들의 치환너비에 따르는 상태밀도

㉠) - ㉢)는 혼합계의 치환너비가 각각 1-치환, 2-치환, 3-치환인 경우

1-4는 혼합계와 C, F, H원자들의 상태밀도, 점선-웃스핀, 실선-아래스핀

맺는 말

그라판과 불화그라판의 치환너비가 증가할수록 혼합계들은 구조적으로 보다 더 안정해지며 모든 혼합계들은 치환너비와 나노띠폭에 따라 $0.12 \sim 3.1 \text{ eV}$ 의 서로 다른 금지띠너비를 가지는 반도체들이다.

참고 문헌

- [1] 김일성종합대학학보 물리학, 65, 2, 25, 주체108(2019).
- [2] S. Tang et al.; J. Phys. Chem., C 115, 16644, 2011.
- [3] M. Gallouze et al.; Phys., E 52, 127, 2013.
- [4] A. Iv et al.; J. Mater. Sci. Eng., 6, 1000379, 2017.

First Principles Study on the Structural Stability and Electronic Properties of Hybrid Zigzag Graphane/Graphene/Fluorographane Nanoribbons

Ri Nam Chol, Kim Chol Hak and Ri Su Il

We suggested the structural models of hybrid systems constructed by selectively substituting graphane and fluorographane nanoribbons into edge parts of Zigzag graphene nanoribbons at the same time, and then calculated the electronic properties such as band gap and density of states by using the first principles.

Keywords: graphene nanoribbon, fluorographane, first principles