

혼합그래핀/불화그래핀나노띠의 구조적 및 전자적성질에 대한 제1원리적연구

리남철, 위주혁, 리수일

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《기초과학부문을 발전시켜야 나라의 과학기술수준을 빨리 높일수 있고 인민경제 여러 분야에서 나서는 과학기술적문제들을 원만히 풀수 있으며 과학기술을 주체성있게 발전시키나갈수 있습니다.》(《김정일선집》 증보판 제10권 485페이지)

탄소원자들이 벌집모양의 단층구조를 이룬 준1차원그래핀나노띠는 독특한 전자적 및 수송성질을 가지고있는것으로 하여 나노척도전자소자개발에서 전망성있는 재료들중의 하나로 알려져있다.[1, 2] 특히 그래핀의 윗면은 수소원자들이, 아래면은 불소원자들이 흡착된 불화그래핀은 좁은 금지띠너비를 가진 그래핀과는 달리 넓은 금지띠너비를 가지는 그래핀이질재료로서 이에 대한 연구도 광범히 진행되고있다.[3-5] 그러나 그래핀나노띠의 량쪽 변두리가 H, F원자들로 기능화되고 불화그래핀나노띠가 중심에서 부분적으로 치환된 혼합계들의 구조적 및 전자적성질들은 고찰된것이 없다.

우리는 그래핀나노띠의 량쪽 변두리가 H, F원자들로 기능화되고 불화그래핀나노띠가 중심이 부분적으로 치환되고 나노띠폭이 11인 안락의자형 그래핀이질구조나노띠들의 구조를 제기하고 변두리기능화와 치환너비에 따르는 계들의 구조적 및 전자적성질들을 고찰하였다. 그림 1에 변두리가 F/F원자들로 기능화되고 불화그래핀나노띠가 중심치환되었으며 나노띠폭이 11인 안락의자형 혼합그래핀나노띠모형을 보여주었다. 량쪽 변두리가 H/H 혹은 H/F원자들로 기능화된 혼합계들도 이와 같은 구조를 가진다.

본문에서는 이상의 혼합나노띠들의 구조적 및 전자적성질을 밀도범함수이론에 기초한 제1원리계산프로그램 Quantum-Espresso를 리용하여 연구하였다. 매 원자에 대하여 USPP의포텐셜들을 리용하였으며 교환상관포텐셜은 PBE-GGA이고 평면파토포대의 운동에너지절단값은 40Ry로, 구조완화계산에서 이온사이힘의 수렴값은 2×10^{-4} Ry/Bohr로 설정하였다.

구조완화계산을 진행한 결과 불화그래핀나노띠가 치환된 중심부분의 탄소원자들은 평면의 우아래로 이동하며 따라서 탄소원자들의 평면벌집구조가 파괴되고 세로구

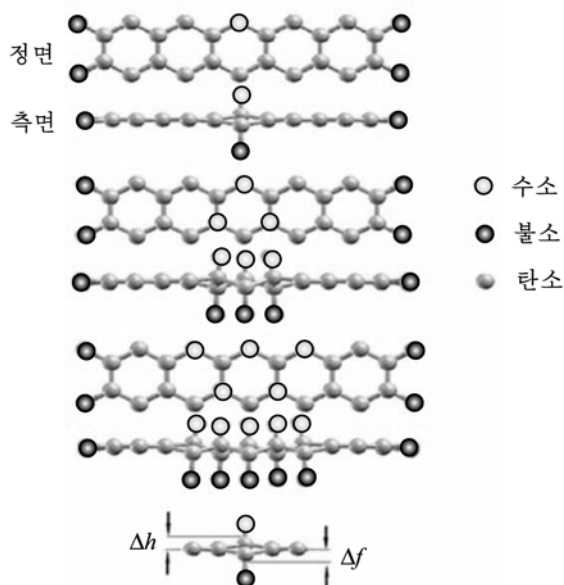


그림 1. F/F원자들로 변두리기능화되고 불화그래핀나노띠가 중심치환된 혼합그래핀나노띠모형

부림상태로 된다. 이때 그래펜나노띠구역에서 C원자들은 sp^2 혼성화를 이루면서 평면구조를 이루며 혼합그래펜이질구역에서는 sp^3 혼성화를 이룬다. 그림 1에서 보는것처럼 세로구부림의 높이를 $\Delta h(\Delta f)$ 로 표시하였는데 그 값은 변두리기능화에 관계없이 $0.156\text{\AA}(0.39\text{\AA})$ 이다.

변두리기능화와 치환너비에 따르는 혼합그래펜나노띠의 에너지띠구조변화특성을 그림 2에 보여주었다. 그림 2에서 Γ), Γ), Γ)는 각각 1-중심치환, 3-중심치환, 5-중심치환된 혼합계들을 나타낸다. 그림 2에서 보는것처럼 양쪽 변두리가 H/H원자들로 기능화된 혼합계들의 에너지띠가 치환너비에 따라 제일 큰 차이를 가진다. 특히 H/H원자들로 변두리기능화된 3-중심치환계의 금지띠너비는 2.09eV 로서 제일 크며 H/F원자들로 변두리기능화된 1-중심치환계의 금지띠너비는 0.128eV 로서 제일 작다. 비교를 위하여 변두리가 H/H원자들로 기능화되고 나노띠폭이 11인 그래펜나노띠의 금지띠도 계산하였는데 그 값은 0.184eV 로서 중심부분에서 1-치환된 혼합계들의 금지띠값들과 큰 차이를 가지지 않는다. 이로부터 중심부분에서 1-치환된 경우가 계의 금지띠변화에 큰 영향을 주지 않는다는것을 알수 있다. 이상에서 본바와 같이 모든 혼합계들은 변두리기능화와 치환너비에 따라서 Γ 점에서 서로 다른 금지띠값들을 가지는 반도체재료들이다.

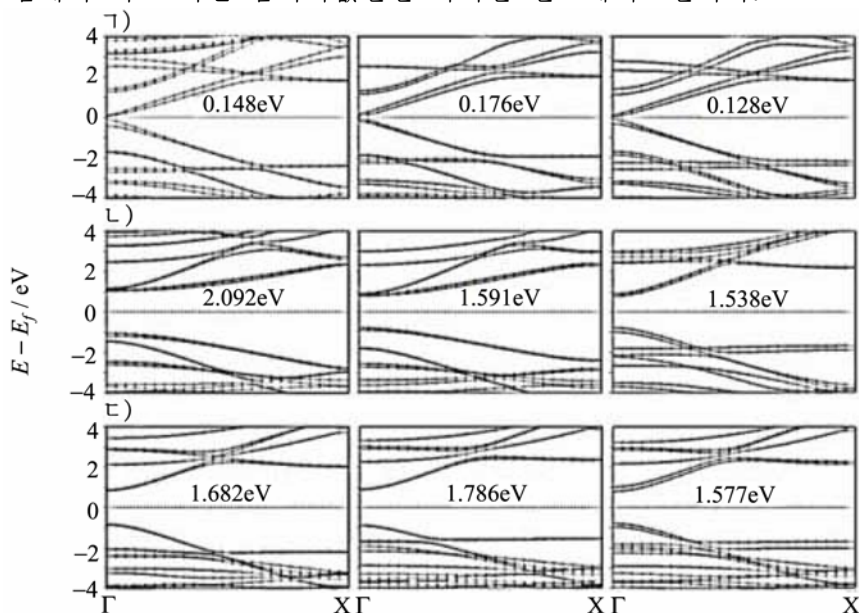


그림 2. 혼합그래펜나노띠의 에너지띠구조변화특성

혼합계들의 전자적성질들은 상태밀도계산을 통하여 더 구체적으로 고찰할수 있다. 전체 상태밀도는 주로 C원자의 기여몫으로 이루어져있다. 또한 F원자의 기여몫은 불화그래펜나노띠의 치환너비가 클수록 더 커진다.

궤도-사영상태밀도에서는 p 궤도의 상태밀도가 전체 상태밀도와 거의 일치하며 따라서 페르미준위근방에서 전자들의 상태는 p 궤도에 놓인다고 볼수 있다.

맺 는 말

불화그래펜나노띠가 그래펜나노띠의 중심에서 부분적으로 치환된 이질계들은 변두리

의 기능화와 치환너비에 따라 서로 다른 직접금지띠너비를 가지는 반도체재료들이다.

참 고 문 헌

- [1] S. Tang et al.; J. Phys. Chem., C **115**, 16644, 2011.
- [2] M. Gallouze et al.; Phys., E **52**, 127, 2013.
- [3] R. Paupitz et al.; Nanotechnology, **24**, 035706, 2013.
- [4] J. Zhou et al.; Appl. Phys. Lett., **95**, 103108, 2009.
- [5] A. IV et al.; J. Material Sci. Eng., **6**, 1000379, 2017.

주체107(2018)년 12월 5일 원고접수

First Principles Study on Structural and Electronic Properties of Hybrid Graphene/Fluoro-Graphane Nanoribbons

Ri Nam Chol, Wi Ju Hyok and Ri Su Il

In this paper, we presented the structural models of hybrid systems constructed by selectively substituting fluoro-graphane nanoribbons into center parts of armchair graphene nanoribbons, which are terminated by H and F atoms, and then calculated the electronic properties such as band gap and density of states, using first principles.

We revealed that all hybrid systems have the semiconductor behavior, which have direct band gaps(about 0.1~2.1eV).

Key words: graphene nanoribbon, hybrid graphane