

Electronic structure of 2D SiC sheet

강기재

서울대학교 재료공학부, 서울특별시 151-744, 대한민국

e-mail: rkdrwo@snu.ac.kr

탄화규소(SiC)는 물리적 성질이 뛰어나 여러 전자기기에 다양한 활용 가능성이 제시되고 있다. 이 논문에서는 2D 구조의 탄화규소 벌집 구조에 대하여 전자 구조 계산을 수행하고 탄소와 규소의 2D 구조체와 전자구조적 차이점을 논의했다. 단원자 2D 구조와는 달리 탄화규소의 합성 구조는 반도체의 성질을 띠는 것으로 나타났고, 이는 두 원자 간의 전기음성도 차이로 인한 전자의 국소화 현상 때문인 것으로 분석되었다.

INTRODUCTION

탄화규소(SiC)는 독특한 물리적 성질을 가지고 있는 물질로서 현재까지도 이론과 실험 양측면에서 활발한 연구가 진행되고 있다. SiC는 원자 간에 강한 화학적 결합을 가지고 있어 높은 화학적 안정성과 열적 안정성을 나타내며, 이러한 성질들로 인해 SiC는 고온, 고출력, 고주파수 전자기기의 핵심 소자로서 다양하게 응용될 수 있다^[1]. 덧붙여 SiC는 폴리모프, 즉 장범위에서 여러 개의 안정한 상을 가지고 있는 물질로서^[2], 이는 일반적으로 단일 원자의 결정상에서는 나타나지 않는 흥미로운 현상이다.

탄소 또는 규소의 단원자로 이루어진 저차원 구조에 대한 연구는 오랜 시간에 걸쳐 활발히 이루어져왔다. 잘 알려진 3차원 구조의 그래파이트(Graphite)를 이용해 실험적으로 그래핀(Graphene) 2차원 구조를 분리해낸 이래로^[3], 그래핀(Graphene)은 이미 재료과학 분야에서 가장 많은 연구가 이루어진 물질 중 하나로 알려져 있다. 그래핀은 1개의 탄소 원자 두께를 가지며 sp^2 결합을 가지고 있는 벌집 모양의 구조체이다. 이 구조는 고유의 기하학적 특성과 그로 인해 생기는 기계적 또는 전자구조적 특성을 가지고 있으며, 이러한 성질들은 수많은 이론적, 응용적 개발의 잠재성을 가지고 있다.

규소 원자의 2차원 구조인 실리신(Silicene)은 그래핀에 비해 상대적으로 적은 연구가 이루어져 있다. 이는 탄소 원자의 경우 sp^2 혼성화가 sp^3 혼성화보다 더 안정하여 2차원 판상 구조를 더 선호하는 반면, 규소 원자는 sp^3 혼성화 구조가 더 안정하기 때문이다^[4]. 그러나 실리신에 대한 이론적, 계산적 연구는 꾸준히 지속되어왔으며, 밀접결합근사법(Tight binding approximation)^[5] 혹은 밀도범함수이론(Density functional theory)^[6] 등에 의해 실리신이 그래핀과

마찬가지로 운동량 공간에서 k 포인트가 $K(1/3,1/3,0)$ 인 지점에서 디랙 콘(Dirac cone)을 형성한다는 것이 밝혀져 있다.

이 연구에서는 SiC 2D 벌집 구조의 전자 구조를 그래핀과 실리신의 전자 구조와 비교하여 분석하였다. 계산 결과, 그래핀과 실리신이 가지고 있는 전자 구조적 유사성에도 불구하고 둘의 합성 구조는 그래핀이나 실리신과는 크게 다른 전자 구조를 가지고 있는 것으로 밝혀졌으며, 이는 두 원자 사이에 존재하는 전기음성도의 차이로 인한 것으로 분석되었다.

METHODS

에디슨 나노물리 계산 도구 중 하나인 LCAODFTLab과 상용 제일원리계산(First principle calculation) 코드인 VASP^[7]을 사용했다. 국소밀도근사법(Local density approximation)을 통해 원자 8개로 이루어진 그래핀, 실리신, SiC 벌집 구조의 unit cell 구조를 최적화했으며, 이때 $11 \times 11 \times 1$ 의 k 포인트를 샘플링했다. 이후 대칭성이 높은 k 포인트에 대하여 밴드 구조 계산을 수행하여 각 구조의 밴드 분산(band dispersion)과 밴드 갭 등을 계산했으며, 밸런스 밴드 최고점(Valence band top)의 전하밀도 또한 가시화하여 관찰했다.

RESULTS

계산 결과 얻어진 밴드갭과 격자상수를 Table. 1에 나타냈다. 최적화된 구조의 격자상수는 그래핀, SiC 벌집 구조, 실리신의 순서대로 커진다.

각각의 물질에서 얻어진 밴드 구조를 Fig. 1에 나타내었다. 그래핀과 실리신의 경우는 $K(1/3,1/3,0)$ 지점에서 디랙 콘을 형성하여 밴드 갭이 없는 준금속(Semi-metal)의 전자구조를 가지는 것으로 나타났다. SiC 벌집 구조에서는 그래핀이나 실리신과는 달리 약 2.5 eV의 간접

밴드갭(Indirect band gap)이 존재한다. 이는 SiC 벌집 구조에서 나타나는 π 결합 오비탈 사이의 오버랩이 적어 전자 간의 전이가 더 어렵기 때문인데, 이에 대한 분석은 아래 Discussion에서 보다 자세히 논한다.

DISCUSSION

Fig.2 는 각각의 구조에 대해 밸런스 밴드 최고점의 전하 밀도를 시각화하여 나타낸 것이다. 그래핀과 실리콘에서는 π 결합을 이루고 있는 p-오비탈이 모든 원자에 분산적(Dispersible)으로 분포되어 있어 전하가 xy 평면으로 펼쳐진 p-오비탈의 터널을 따라 자유롭게 이동할 수 있다. 그러나 SiC 벌집 구조의 경우 전자의 파동함수가 탄소 원자의 p-오비탈에 국소화(Localized)되어 결과적으로 전자가 오비탈 사이를 전이하는데 있어 더 큰 에너지를 필요로 하게 된다. 이는 결과적으로 전자의 거동이 반도체 혹은 부도체와 유사하게 변하는 것으로, 이러한 작용으로 인해 결과적으로 밴드갭이 형성됨을 알 수 있다. 이러한 결과는 두 원자 사이의 전기음성도 차이로 인한 것으로 생각할 수 있는데, 탄소 원자의 전기음성도는 약 2.55인 반면 규소 원자의 전기음성도는 약 1.90으로 탄소에 비해 더 약하게 전자를 끌어당기는 것을 알 수 있다. 본 연구에서는 SiC 벌집 구조만을 분석했지만, 2D 구조에서는 3D 구조보다 전자의 국소화 현상이 더 크게 나타나므로 전기음성도의 차이가 큰 두 개의 원자로 2D 합성 구조를 제작할 경우 이러한 밴드갭 오픈링(Gap opening) 현상이 일반적으로 나타나리라 예측할 수 있다.

CONCLUSION

이 연구에서는 SiC 의 2D 벌집 구조와 그에 상응되는 그래핀, 실리콘의 전자 구조를 비교, 분석하였다. SiC 벌집 구조는 준금속의 성질을 나타내는 그래핀, 실리콘과는 달리 2.5 eV 가량의 밴드갭을 나타내는 반도체로 계산되었으며, 이는 탄소와 규소 간의 전기음성도 차이에 의한 것으로 여겨진다.

REFERENCES

[1] M. Sabisch et al., Phys. Rev. B **53**, 13121 (1996).
 [2] K. Karch et al., International Journal of Quantum Chemistry **56**, 801 (1995).
 [3] K. S. Novoselov et al., Science **306**, 666 (2004).

[4] A. Kara et al., Surface Science Reports **67**, 1 (2012).
 [5] G.G. Guzmán-Verri et al., Phys. Rev. B **76** 075131 (2007).
 [6] S. Lebègue et al., Phys. Rev. B **79**, 115409 (2009).
 [7] G.Kresse et al., Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
 [8] W.kohn et al., Phys. Rev. **140**, A1134 (1965).

	격자상수 (Å)	밴드갭 (eV)
그래핀	4.90	-
SiC 구조	6.14	2.52
실리콘	7.73	-

Table. 1. 그래핀, SiC 구조, 실리콘의 격자상수와 밴드갭.

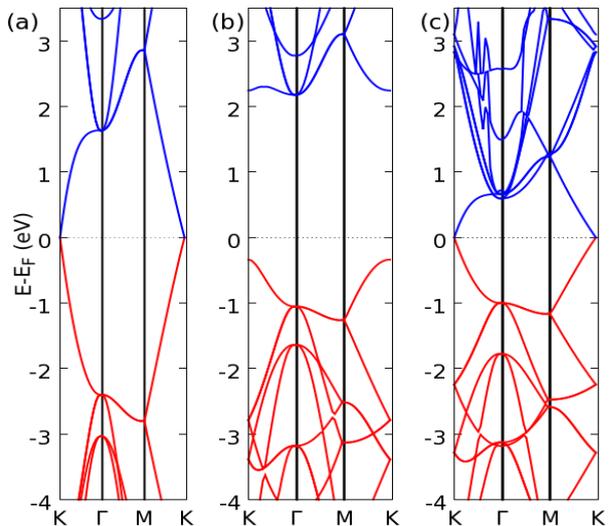


Fig. 1. (a) 그래핀, (b) SiC 구조, (c) 실리콘의 밴드 구조.

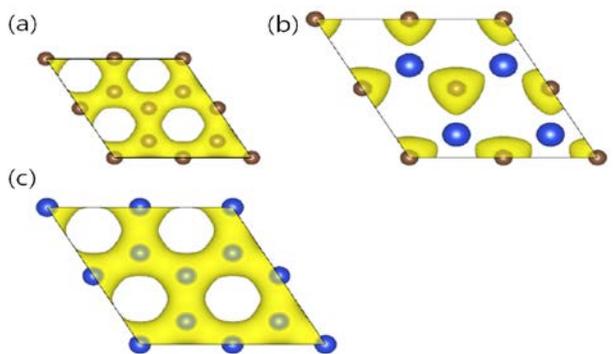


Fig. 2. (a) 그래핀, (b) SiC 구조, (c) 실리콘의 격자 구조와 전하 밀도. 갈색 원자는 탄소, 파란색 원자는 규소를 나타낸다.