

SM-P014

Optical Phonon Mixing in ABC Trilayer Graphene with a Chemically Broken Inversion Symmetry

박광희, 류순민

경희대학교 응용화학과

이중층 그래핀(graphene)의 한쪽 표면에 전하를 주입하면 반전 대칭(inversion symmetry)이 깨지며 라만-비활성 진동모드가 활성화되면서 라만 G-봉우리 부근에 새로운 봉우리가 나타난다고 알려져 있다. 삼중층 그래핀은 그래핀이 적층되는 방식에 따라 ABA (Bernal), ABC (rhombohedral) 그래핀으로 나뉘며, ABC 그래핀은 ABA와는 달리 반전 대칭성을 가지고 있다. 본 연구에서는 화학적인 방법을 이용하여 ABC 그래핀의 반전 대칭을 제어하고 그에 따른 라만 스펙트럼의 변화를 탐구하였다. ABA 그래핀과는 달리 이중층 그래핀과 ABC 그래핀에서는 저진공 열처리 또는 요오드 흡착반응을 한 후에 G-봉우리 부근에서 새로운 봉우리가 나타나는 것을 관찰하였고, 전하밀도 정도가 증가 할수록 G-봉우리와 새로운 봉우리의 위치 차이는 증가하는 것을 관찰하였다. 물과 메탄올에 의한 세척 반응으로부터 열처리는 복층 그래핀과 기판 계면에 그리고 요오드 흡착은 그래핀의 상단표면에 잉여 전하를 유발하여 반전 대칭을 깨트린다는 사실을 확인하였다. 또한 G-봉우리와 새로운 봉우리의 진동수 차이가 반전 대칭을 유발한 전하밀도의 그래디언트에 대한 척도가 될 가능성을 제시하였다.

Keywords: 삼중층 그래핀, 라만, 반전 대칭

SM-P015

Charge Transport Properties of Boron/Nitrogen Binary Doped Graphene Nanoribbons: An ab Initio Study

Seong Sik Kim¹, Han Seul Kim¹, Hyo Seok Kim¹, and Yong Hoon Kim^{1,2,*}

¹Graduate School of EEWS, KAIST, 291 Daehak-ro, Yuseong-gu, Daejeon 305-701, Korea,

²KI for the NanoCentury, KAIST, 291 Daehak-ro, Yuseong-gu, Daejeon 305-701, Korea

Opening a bandgap by forming graphene nanoribbons (GNRs) and tailoring their properties via doping is a promising direction to achieve graphene-based advanced electronic devices. Applying a first-principles computational approach combining density functional theory (DFT) and DFT-based non-equilibrium Green's function (NEGF) calculation, we herein study the structural, electronic, and charge transport properties of boron-nitrogen binary edge doped GNRs and show that it can achieve novel doping effects that are absent for the single B or N doping. For the armchair GNRs, we find that the B-N edge co-doping almost perfectly recovers the conductance of pristine GNRs. For the zigzag GNRs, it is found to support spatially and energetically spin-polarized currents in the absence of magnetic electrodes or external gate fields: The spin-up (spin-down) currents along the B-N undoped edge and in the valence (conduction) band edge region. This may lead to a novel scheme of graphene band engineering and benefit the design of graphene-based spintronic devices.

Keywords: Graphene nanoribbons, GNRs, co-doping, transport, spin polarization, first-principles calculations