

## Electronic properties of uniaxially-strained MoS<sub>2</sub> monolayer

박주하, 임예찬, 채병태

서울대학교 재료공학부, 서울특별시 관악구 관악로1, 대한민국

E-mail: park\_jooha@naver.com

MoS<sub>2</sub> 단일층에 단축 방향으로 스트레인을 가해 Mo와 S 사이의 거리를 변화시키면서 밴드 구조의 변화를 밀도 범함수 이론에 기반해 계산했다. MoS<sub>2</sub> 단일층의 전자 구조는 스트레인에 민감하게 변화하여 밴드갭의 감소와 직접 밴드갭에서 간접 밴드갭으로 밴드갭의 특성이 변화함을 확인했다. 이러한 전자 구조의 변화는 스트레인에 의한 전하 분포의 변화와 로컬 오비탈의 상호작용에 의한 영향으로 해석된다.

### INTRODUCTION

최근 재료 공학에서는 그래핀과 같은 저차원 재료들이 우수한 기계적 성질과 전기 전도성 등으로 인해 각광받고 있다. 단일 층 구조의 MoS<sub>2</sub>는 대표적인 2D 재료 중 하나로서, 준금속적 (Semi-metallic) 특성을 띠는 그래핀과는 달리 약 1.8 eV의 직접 밴드갭(Direct band gap)을 가지고 있는 반도체이다. 최근에는 이러한 단일 층 MoS<sub>2</sub>의 특성을 광학소자, 또는 논리소자의 트랜지스터 등에 활용하고자 하는 연구가 활발히 진행되고 있다.<sup>1</sup>

2D 재료에 스트레인(Strain)을 가해 전기적 특성의 변화를 꾀하는 연구는 이전부터 활발히 진행되어 왔으나, 탄소 원자 사이에 파이 결합을 형성하고 있는 그래핀의 경우 상당한 스트레인을 가해도 밴드갭이 형성되지 않는 것으로 알려져 있다.<sup>2</sup> 반면 MoS<sub>2</sub>의 경우, 원자 간 결합이 상대적으로 낮은 대칭성을 가지고 있기 때문에 strain을 가했을 때 밴드갭이 큰 변화를 보인다.

벌크 MoS<sub>2</sub>의 스트레인에 의한 전자 구조 변화는 Ref. 1 에서 연구된 바 있으며, 벌크 MoS<sub>2</sub>에 대해 단축(Uniaxial) 스트레인과 양축(Biaxial) 스트레인이 가해졌을 때의 밴드갭을 관찰했다.

본 연구에서는 MoS<sub>2</sub> 단일 층 구조에 단축 스트레인을 주어 Mo 원자와 S 원자들 간의 거리를 변화시킬 때 나타나는 전기적 물성의 변화를 제일원리계산으로 관찰하고 그 원인을 분석하였다.

### CALCULATION METHODS

국소 기저 함수를 이용하는 SIESTA에 기반을 둔 EDISON Nanophysics의 LCAODFTLab을 통해 밀도 범함수 이론(Density functional theory) 계산을 수행하고 밴드갭과 밴드 구조를 관찰했다. 모든 계산에는 Perdew-Burke-Ernzerhof GGA(PBE-GGA)가 사용되었다. 유닛 셀에서는 주기 경계 조건에 의한 층 사이의 상호작용을 배제하기 위해 층 사이에 17 Å 가량의 진공을 두었다. 역격자 공간에서의 **k**-point는  $\Gamma(0,0,0)$ 를 중심으로 균등하게 분포된 5X5X1의 점들을 샘플링했다.

전자 밀도는 평면파 기저 함수를 이용하는 VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)를 통해 계산했다.

### RESULTS AND DISCUSSION

MoS<sub>2</sub> 단일 층에서 단축 방향에 대해서 압축 또는 인장 스트레인이 가해졌을 때의 밴드 구조를 각각 Fig. 1, 2에 나타내었다. 그리고 스트레인

에 따른 밴드갭의 변화를 Table. 1, 2 에 정리하여 나타내었다.

압축 스트레인의 경우 스트레인이 0 %에서 5 % 까지 증가함에 따라 밴드갭이 1.68 eV에서 1.16 eV로 점차 감소하여 약 -30.7% 작아졌으며, K 포인트에서 직접 밴드갭을 가지던 밴드 구조는 VBM이 K에서  $\Gamma$ 로 변하면서 간접 밴드갭(Indirect band gap) 특성을 가지게 되었다. 이는 Fig. 1 에서 보이는 바와 같이 스트레인이 없을 때 VBM(Valance band maximum)이었던 K가 스트레인이 증가함에 따라  $\Gamma$ 에 비해 크게 안정화되는 현상임을 알 수 있다.

인장 스트레인을 가했을 때의 변화량은 압축을 스트레인을 가했을 때의 변화량보다 작았으며, 주어진 스트레인 범위에서 밴드갭이 소량 증가하다가 감소하는 경향을 보였다. 스트레인이 가해짐에 따라 CBM이 K에서  $\Lambda_{min}$  ( $\Lambda$  line에서 conduction band의 최소점)으로 이동하고, 이에 따라 밴드갭 또한 직접 밴드갭에서 간접 밴드갭으로 바뀌게 된다. 관찰되는 밴드 구조의 변화로 미루어 보았을 때, 더 큰 인장 스트레인이 가해질 경우  $\Lambda_{min}$ 가 더욱 안정화되면서 밴드갭이 감소할 것으로 예상할 수 있다. 이러한 밴드 구조의 변화는 압축 스트레인을 가했을 때와 유사한 경향으로, 스트레인이 가해짐에 따라  $\Lambda_{min}$ 가 다른 포인트에 비해 상대적으로 안정화된 결과로 해석된다.

스트레인에 따라 밴드 구조가 변화하는 원인을 해석하기 위해 압축 스트레인을 가했을 때의 시스템의 전체 전하 밀도 변화와 각각의 경우에 따라 VBM을 이루는 두 지점(K,  $\Gamma$ )의 전하 밀도를 각각 Fig. 3와 Fig. 4에 나타내었다.

Fig. 3은 스트레인이 0%에서 5%로 증가했을 때 시스템의 전체 전하 밀도 변화를 나타낸 것이다. 압축 스트레인이 걸릴 경우 두 개의 S 원자

사이의 전하 분포가 더 증가하는 것을 알 수 있다.

K 포인트와  $\Gamma$  포인트에서 각각의 VBM에 해당하는 오비탈의 전하 분포를 Fig. 4에 나타내었다.  $\Gamma$  포인트에서는 Mo의  $d_z^2$  오비탈의 모양이 뚜렷한 반면 K 포인트에서는 x-y 평면에 평행한  $d_x^2-y^2$  오비탈이 더욱 지배적으로 나타나는 것을 알 수 있다.

이러한 시스템 전체의 전하 밀도 변화와 오비탈의 특성을 관찰함으로써 밴드 구조의 변화를 설명할 수 있다. K 포인트에서의 오비탈의 경우, 스트레인에 의해 두 S 원자 사이에 전하 밀도가 증가함에 따라 시스템 전체의 가전자들과 Mo 원자의  $d_x^2-y^2$  오비탈이 혼성결합(Hybridization)하게 되어 해당 오비탈의 에너지가 상대적으로 안정해지게 된다. 반면  $\Gamma$  포인트에서는 전체적인 전하 밀도의 변화와 상호작용이 적은  $d_z^2$  오비탈이 지배적이므로 스트레인에 의한 에너지 변화가 적다. 인장 스트레인의 경우도 이와 같은 전하 밀도의 변화를 통해 유사한 해석이 가능하다.

## CONCLUSION

본 연구에서는 단일층의 MoS<sub>2</sub>에 0 %에서 5 % 까지 단축 스트레인을 가하여 그에 따른 전자 구조의 변화를 관찰하였다. 그 결과 5%의 압축 스트레인에서 MoS<sub>2</sub>의 밴드갭이 30.7% 감소했으며, 압축과 인장 모두 직접 밴드갭에서 간접 밴드갭으로의 밴드갭 전이가 나타났다. 스트레인에 의한 밴드갭의 변화는 구조적 변화에 따른 전하 분포의 변화와 해당 오비탈의 상호작용으로 설명된다. 본 연구의 결과는 가변 광학 소자(Tunable photonic device) 또는 태양전지 등의 광학적 소자 및 소재 연구에 다양하게 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

## ACKNOWLEDGEMENT

본 논문은 2015년도 정부(미래창조과학부)의 재원으로 한국연구재단 첨단 사이언스·교육 허브 개발 사업의 지원을 받아 수행된 연구임(No. NRF-2012-M3C1A6035302). 도움주신 서울대학교 재료공학부 한승우 교수님과 서울대학교 전산 재료 연구실, 그리고 EDISON 나노물리 전문센터와 EDISON에 도움주신 분들께 감사의 말씀을 올립니다.

REFERENCES

- [1] M.J.Allen et al., *Honeycomb Carbon: A Review of Graphene*, Chem. Rev., **110**, 132 (2009).
- [2] H.J.Conley et al., *Bandgap Engineering of Strained Monolayer and Bilayer MoS<sub>2</sub>*, Nano Letters **13**, 3626 (2013).
- [3] R.E.Hummel, *Electronic Properties of Materials*, 4<sup>th</sup> ed., New York: Springer (2011).
- [4] H.Peelaers and C. G. Van der Walle, *Effects of strain on band structure and effective masses in MoS<sub>2</sub>*, Phys. Rev. B **86**, 241401(R) (2012).
- [5] B.Radisavljevic et al., *Single-layer MoS<sub>2</sub> transistors*, Nat. Nanotechnol. **279**, 147 (2011).

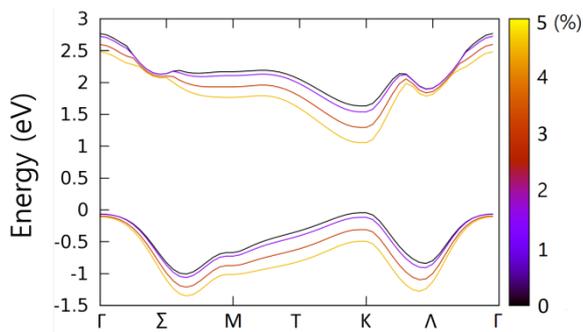


Fig. 1. Uniaxial 방향으로 Compressive strain 을 가했을 때의 밴드 구조.

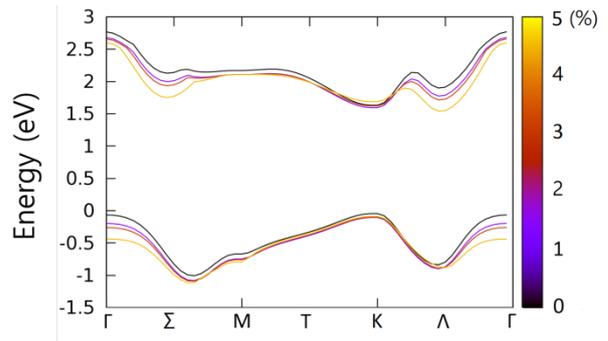


Fig. 2. Uniaxial 방향으로 Tensile strain 을 가했을 때의 밴드 구조.

Strain(%)	CBM	VBM	Band Gap(eV)	Band Gap의 변화율(%)
0	K	K	1.68	
1	K	Γ	1.60	-4.61
2	K	Γ	1.50	-10.74
3	K	Γ	1.39	-17.13
4	K	Γ	1.28	-23.80
5	K	Γ	1.16	-30.72

Table 1. Uniaxial compressive strain 을 가해주었을 때의 CBM, VBM, Band Gap, Band Gap 의 변화율

Strain(%)	CBM	VBM	Band Gap(eV)	Band Gap의 변화율(%)
0	K	K	1.68	
1	K	K	1.70	1.33
2	Λ	K	1.72	2.58
3	Λ	K	1.72	2.58
4	Λ	K	1.69	0.74
5	Λ	K	1.63	-2.84

Table 2. Uniaxial Tensile strain 을 가해주었을 때의 CBM, VBM, Band Gap, Band Gap 의 변화율

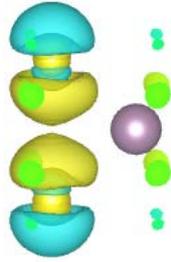


Fig. 3. Compressive strain(5%)이 가해졌을 때 MoS<sub>2</sub>의 전체 전하 분포 변화. 노란(파란) 부분은 전하 밀도가 증가(감소)한 영역을 의미한다.

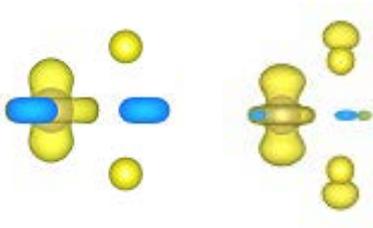


Fig. 4. MoS<sub>2</sub>의 K에서의 전하분포(왼쪽)와 Γ에서의 전하 분포 변화(오른쪽).