

Band gap engineering of Hybrid Armchair Graphene and Boron Nitride Nanorribbons

정지훈

충남대학교 대전광역시; 305-806, 대한민국

E-mail: hemn4221@naver.com

ABSTRACT:

본 연구에서는 탄소로 이루어진 그래핀과 붕소와 질소의 합성물인 h-BN을 적절하게 섞어, 밴드갭(band gap)의 변화를 범밀도함수이론(DFT)을 통하여 설계하려고 한다. 본 연구에서 태양전지의 가장 높은 효율을 가지기 위한 밴드갭 1.2eV 가지는 모델을 설계하려고 한다. Armchair 방향으로 B와 N을 도핑을 하여 width에 따른 Nanorribbons 형태를 만들어 밴드갭(band gap)의 변화를 살펴 볼 것이다. 그래핀과 h-BN을 각각 고정시키며 다른 한쪽의 width를 늘리면서 밴드갭(band gap)의 변화도 살펴 볼 것이다. 그래핀과 h-BN의 비가 5:3일 때 1.14eV로 가장 1.2eV에 비슷하게 나왔고 3:5일 때 1.12eV로 그 다음으로 가장 가까운 결과를 얻을 수 있었다. 또한 비슷한 밴드갭을 가지더라도 그러한 원자 구조가 얼마나 안정적인지를 알기 위해 cohesive 에너지를 계산 할 것이다. 이러한 결과로 인해 태양에너지 연구에 큰 이바지를 할 수 있다.

INTRODUCTION

지속적인 화석 에너지 사용으로 인해 에너지 고갈, 지구온난화 등 심각한 환경오염을 발생시키고 있다. 그로인해 재생가능 에너지 사용 기술 개발을 위해 노력하고 있다. 재생가능 에너지 중 태양 에너지는 시설의 수명이 길고 환경오염도 없으면 어디에서나 활용 할 수 있는 장점이 있다. 태양 에너지의 구조인 태양 전지는 반도체의 성질을 가지고 있으며 흡수층에서 빛 에너지를 흡수하여 물질 내부에서 자유전자와 정공을 만들게 된다. 이 흡수층이 어떠한 밴드갭을 가지는 거에 따라 효율이 달라지게 된다. 본 연구에서 가장 높은 효율을 가지는 1.2eV의 밴드갭 일 때의 구조를 찾기 위해 Nanorribbons 형태에서

Amrchair 부분에 C,B 그리고 N의 비율을 달리해 width를 늘렸다. 총 원자 개수를 한정 시켜서 Graphene과 h-BN의 비율을 각각 고정 시키고 각각의 width를 늘리면서 밴드갭을 살펴 보았고 다른 한편으로는 총 원자 개수를 더 늘려봐서 Graphene와 h-BN의 비율을 달리해서 밴드갭을 살펴 봤다. 그 결과 1.2eV에 가까운 밴드갭을 가지는 구조를 찾았다. 이로인해 태양에너지 연구에 큰 이바지를 할 수 있다.

Modelling and METHODS

본 연구에서 Armchair 방향으로 Boron와 Nitride을 도핑을 하여 width에 따른 Nanorribbons 형태를 만들어 밴드갭의 변화를 EDISON Nanophysics으로 계산하였다. 특히 (LDA - CA)을 이용한 Density Functional Theory (DFT) 계산을 할

수 있는 LCAODFTLab으로 계산 하였다. 본 연구에서 Graphene과 BN을 각각 고정시킨 후 다른 하나의 width를 늘리면서 최고의 효율을 가지는 band gap 1.2eV이 되는 구조를 모델링 했다. 본 연구에서 Fig 1(a)은 pristine BN에서의 lattice constant가 $x=2.4852 \text{ \AA}$, $y=4.3045 \text{ \AA}$ 로 실제 결과 값 $x=2.5040 \text{ \AA}$ 와 비교를 했을 때 0.0188 \AA 정도 밖에 차이가 안나는 것을 확인 했다. Fig 1(b)에서 optimized lattice parameter가 2.4940 \AA 임을 찾았다. Fig 2(a) h-BN와 Graphene의 1:1 비율이며 lattice constant $x=2.4852 \text{ \AA}$, $y=4.3045 \text{ \AA}$ 인 모델을 unit cell 했다. Fig 2(b)에서는 h-BN와 Graphene의 3:5 비율이고 lattice constant $x=9.9408 \text{ \AA}$, $y=4.3045 \text{ \AA}$ 인 모델이다. Fig 2(c)에서는 h-BN와 Graphene의 5:3 비율이며 lattice constant $x=9.9408 \text{ \AA}$, $y=4.3045 \text{ \AA}$ 인 모델이다. Fig 2(d)에서는 h-BN와 Graphene의 6:6 비율이며 lattice constant $x=14.9112 \text{ \AA}$, $y=4.3045 \text{ \AA}$ 인 모델이다. Fig 3(a)와 Fig 4(a)에서는 총 원자개수를 18개 이내로 한정지어 Graphene의 개수를 고정하고 h-BN의 width를 늘리며 band gap의 변화와 h-BN의 개수를 고정하고 Graphene의 width를 늘리며 band gap의 변화를 살펴 봤다. 그 결과 특정한 주기성이 없어서 Fig 3(b)와 Fig 4(b)에서는 총 원자개수의 제한 없이 h-BN와 Graphene의 width에 따른 band gap의 변화를 봤다. 비슷한 band gap에서 원자구조에 따른 안정성을 보기 위해 $E_{\text{cohesive}} = (-E_{\text{CBN}} + N_{\text{C}}E_{\text{C}} + N_{\text{B}}E_{\text{B}} + N_{\text{N}}E_{\text{N}}) / N_{\text{at}}$ 을 이용해서 cohesive에너지를 계산했다.

RESULTS AND DISCUSSION

본 연구에서 먼저 Graphene과 h-BN의 width에 따른 band gap의 변화를 살펴 봤다. 총 원자개수를 제한 한 경우 Graphene과 h-BN이 3:5, 5:3 비율을 가지는 모델일 때 1.12eV, 1.14eV로 band gap을 가졌고 그 외에 특정한 주기성을 찾지 못

해 총 원자개수의 제한 없이 band gap을 확인한 결과 Graphene과 h-BN이 6:6 비율을 가지는 모델일 경우 1.22eV로 본 연구에서 찾고자 하는 모델에 가장 유사했다. 이러한 비슷한 band gap을 가지는 원자구조의 원자당 cohesive energy를 계산 결과 3:5 구조에서는 7.34eV이고 5:3 구조에서는 7.24eV이고 6:6 구조에서는 8.01eV이었다. 3개의 구조 모두 cohesive energy가 양수임에 따라 설계 가능한 모델이며 안정성을 두고 상대적으로 비교했을때 거의 차이가 안나는 것을 확인 했다. 또한 Graphene의 개수를 고정 시키고 h-BN의 width를 늘릴때 어느 특정한 width이상에서는 band gap의 변화가 아주 작게 나타났다. 반면 h-BN의 개수를 고정 시키고 Graphene의 width를 늘릴때에는 급격히 band gap이 감소하다가 서서히 증가하는 결과를 확인 했다. 따라서 Graphene과 h-BN을 3:5, 5:3, 6:6 비율로 모델링을 해야 최고 효율을 나타내는 태양전지를 만들 수 있을 것이다.

CONCLUSION

본 연구에서 재생 에너지 중 시설의 수명이 길고 환경오염도 없으며 어디에서나 활용도가 높은 태양에너지의 효율을 최대화 하기위해 밴드갭 1.2eV를 가지는 모델을 찾고자 했다. 먼저 총 원자개수의 제한을 두고 계산을 하고 계산 결과가 부족해서 원자개수를 자유롭게 해서 Graphene과 h-BN을 각각 고정을 시킨 후 다른 한쪽의 width를 변화시켜 Nanoribbons형태를 만들어 band gap의 변화를 살펴 봤다. 그 결과 본 대회에서 총 원자개수를 18개로 제한을 했을 경우 Graphene과 h-BN의 비가 3:5, 5:3 일 때 찾고자 하는 모델과 유사했고 제한을 안 했을 경우 6:6 비율이 가장 최대효율 모델에 적합한 모델이었다. 또한 3개의 모델에서 cohesive energy가 양수여서 제작이 가능하고 상대적으로 비슷한 수치를

가져 안정성에는 큰 차이가 없었다.

ACKNOWLEDGEMENT

한국 물리학회 봄 학술대회와 EDISON 사업을 위해 수고해 주신 모든 분들께 감사드립니다. 본 논문은 2015년도 정부(미래창조과학부)의 재원으로 한국연구재단 첨단 사이언스·교육 허브 개발 사업의 지원을 받아 수행된 연구임(No. NRF-2012-M3C1A6035302)

REFERENCES

- [1]J. Chem. Phys. **44** (1966) 181
- [2]J.Phys. Chem. C (2011), 115, 10836–10841

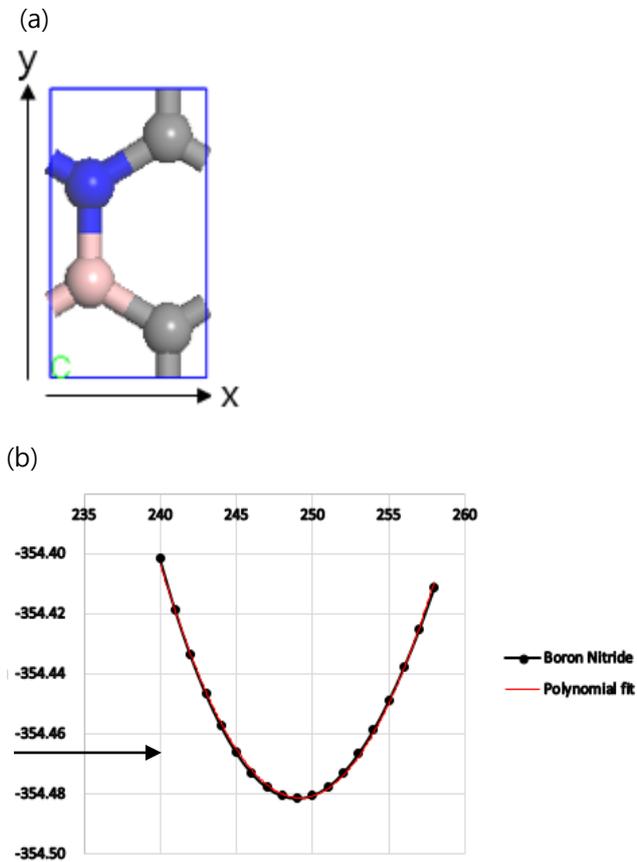


Fig .48 (a) Boron Nitride unit cell (b) Cell test, the total energy with changing lattice constant.

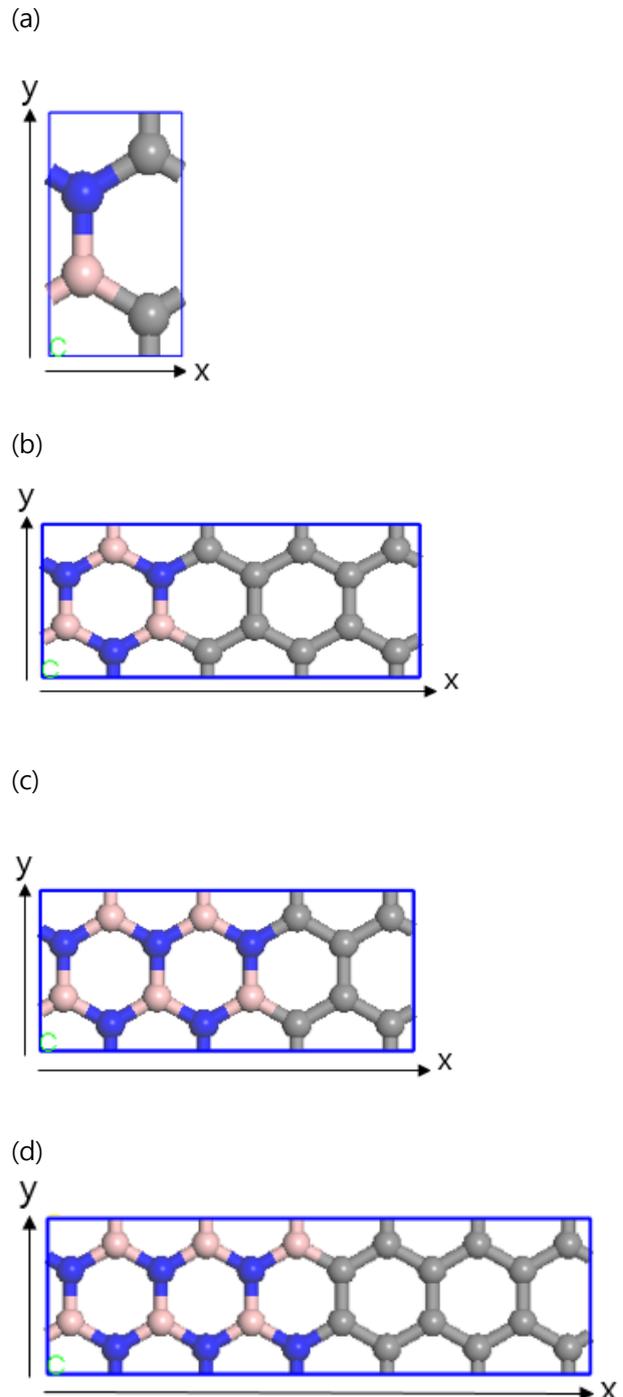


Fig .49 (a)h-BN:Graphene = 1:1 (b) h-BN:Graphene = 3:5 (c)h-BN:Graphene = 5:3 (d)h-BN:Graphene = 6:6

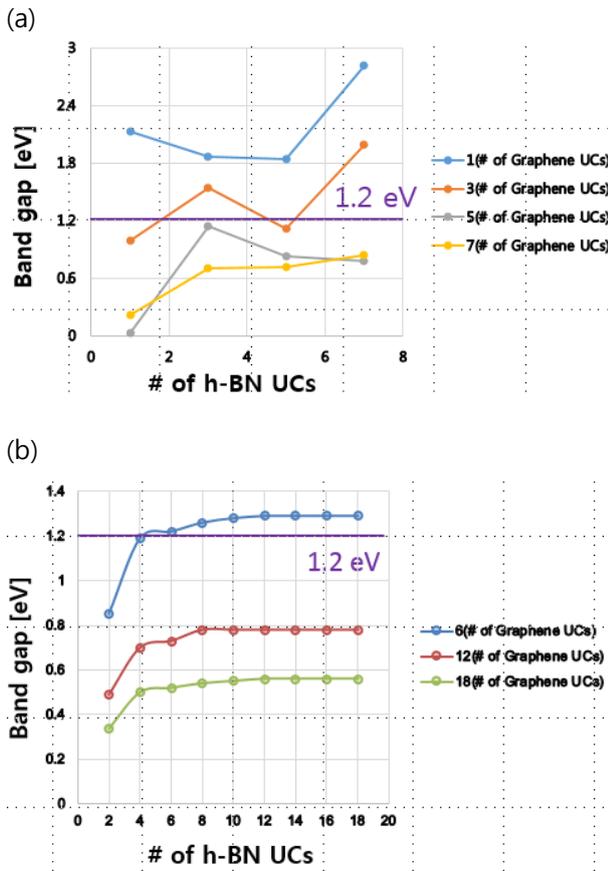


Fig. 3 (a)총 원자개수를 18 개 이내로 잡았을 때 Graphene 의 개수를 고정하고 h-BN 의 width 에 따른 band gap 변화. (b)원자개수를 제한하지 않고 Graphene 의 개수를 고정하고 h-BN 의 width 에 따른 band gap 변화.

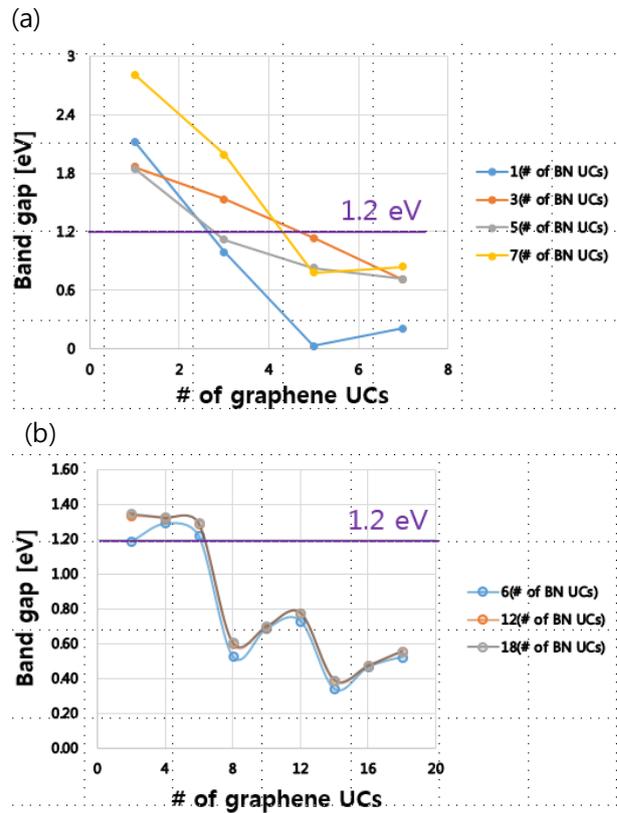


Fig. 4 (a)총 원자개수를 18 개 이내로 잡았을 때 h-BN 의 개수를 고정하고 graphene 의 width 에 따른 band gap 변화. (b)원자개수를 제한하지 않고 h-BN 의 개수를 고정하고 graphene 의 width 에 따른 band gap 변화.