흑린의 전자 구조와 디랙 준금속성

DOI: 10.3938/PhiT.26.017

최 형 준

Electronic Structures and Dirac-semimetal Properties of Black Phosphorus

Hyoung Joon CHOI

Black phosphorus, an allotrope of phosphorus, is a semiconductor composed of puckered honeycomb layers of P atoms combined with van der Waals interaction. The puckered honeycomb layers are easily cleaved by mechanical exfoliation and can be applied to electronic devices of nanometer-scale thickness. The electronic band gap depends sensitively on the film thickness and external perturbations such as pressure and electric field. Black phosphorus has Dirac-semimetal properties potentially, which appear when the band gap is closed. This article briefly reviews atomic and electronic structures, band-gap control, and Dirac-semimetal properties of black phosphorus.

들어가는 글

흑연에서 그래핀을 기계적으로 박리하는 방법을 알아낸 후 2차원 물질에 대한 관심이 계속 커지고 있다.^[1-5] 흑연에서 박리된 그래핀은 띠틈폭(band gap)이 없는 금속성 물질이었고, 곧이어 연구된 육방정계 질화붕소(hexagonal BN) 층은 띠틈폭이 5 eV보다 큰 절연체이었다.^[3,4] 화학적으로 다양한 성분을 가지는 전이금속 칼코겐 화합물들을 박리하면서 띠틈폭이 1~2 eV 내외인 반도체적 2차원 결정체를 다양하게 만들게 되었으며 이 물질들은 전자 소자의 후보 물질로 많이 연구되었다.^[3]

저자약력

최형준 교수는 서울대학교 이학박사(2000년)로서 2000년부터 3년간 미국 버클리 캘리포니아 대학교 밀러연구원으로 재직하였고, 2003년부터 2년간 고등과학원 계산과학부 교수로 재직하였으며, 2005년부터 연세대학교 물리학과 교수로 재직 중이다.
(h.j.choi@yonsei.ac.kr, 홈페이지: <http://web.yonsei.ac.kr/choi>)

인의 동소체인 흑린은 1914년 P. W. Bridgman이 미국화학 회지에 Two new modifications of phosphorus라는 논문을 발표하여 세계 최초로 학계에 보고하였다.^[6] 이 논문은 새로운 인(P) 동소체를 두 종류 보고하였는데 그 중 하나를 흑린(black phosphorus)이라고 명명하였다. 그 후 1950년대에 전기전도도를 온도의 함수로 측정하여 띠틈폭이 0.33 eV임을 알게 되었으며,^[7] 1980년대에 팍묶음(tight-binding) 방법에 의한 전자 구조 계산 연구를 통해 직접 띠틈폭(direct band gap)을 가짐을 알게 되었다.^[8]

흑린은 2012년에 반데르발스 결합 물질임이 다시금 부각되었고,^[9] 2013년과 2014년에 나노미터 두께의 박막으로 스위칭 전자소자 제작에 성공함으로써 2차원 물질 분야의 집중적인 관심을 받게 되었다.^[10-12] 흑린은 띠틈폭이 두께에 따라 0.3 eV부터 1.8 eV까지 바뀌는 특성이 있어서 금속성을 가지는 그래

REFERENCES

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004); K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos and A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005); Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer and P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [2] Y.-W. Son, *Phys. High Technol.* **17**(10), 40 (2008); Y.-W. Son, *Phys. High Technol.* **18**(7/8), 2 (2009).
- [3] S. Hong, *Phys. High Technol.* **25**(7/8), 2 (2016).
- [4] C. Hyun, S. Hong, G. Kim, A.-R. Jang and H. S. Shin, *Phys. High Technol.* **25**(7/8), 9 (2016).
- [5] K. S. Kim, *Phys. High Technol.* **25**(7/8), 31 (2016).
- [6] P. W. Bridgman, *J. Am. Chem. Soc.* **36**, 1344 (1914).
- [7] R. W. Keyes, *Phys. Rev.* **92**, 580 (1953).
- [8] Y. Takao, H. Asahina and A. Morita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **50**, 3362 (1981).
- [9] S. Appalakondaiah, G. Vaitheeswaran, S. Lebegue, N. E. Christensen and A. Svane, *Phys. Rev. B* **86**, 035105 (2012).
- [10] L. K. Li, Y. J. Yu, G. J. Ye, Q. Q. Ge, X. D. Ou, H. Wu, D. L. Feng, X. H. Chen and Y. B. Zhang, *Nat. Nanotechnol.* **9**, 372 (2014).
- [11] F. N. Xia, H. Wang and Y. C. Jia, *Nat. Commun.* **5**, 4458 (2014).
- [12] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. F. Xu, D. Tomanek and P. D. D. Ye, *ACS Nano* **8**, 4033 (2014).

Fig. 1. Atomic structure of bulk black phosphorus. Dashed lines represent the orthorhombic unit cell containing eight P atoms.

핀과 반도체성을 가지는 전이금속 칼코겐 화합물의 중간 영역에 놓이는 물질이다. 한편 흑린은 띠틈간격을 외부적 요인으로 조절가능하며,^[7,13] 띠틈간격을 없애는 것도 가능하고 이 경우에는 디랙 준금속(Dirac semimetal)의 특성이 나타난다.^[13-18] 본 글에서는 흑린의 원자 구조와 전자 구조, 띠틈간격 조절 및 디랙 준금속성에 대해 간략히 기술한다.

흑린의 원자 구조

흑린은 흑연과 전체적으로 비슷한 원자구조를 가지고 있다. 흑연의 경우에는 탄소 원자들이 평평한 층을 이루고 이 층들이 쌓여 벌크를 이루는데, 흑린의 경우에도 그림 1과 같이 인(P) 원자들이 층을 이루고 이 층들이 쌓여 벌크를 이룬다. 흑연의 경우에 개개의 층이 완전히 평면인 것과 달리 흑린의 경우에는 인 원자가 한쪽 방향으로 오르내리락하여 주름진 구조(puckered structure)를 만든다.^[19] 이 주름진 구조를 무시하면 각각의 층에서 하나의 인(P) 원자가 다른 3개의 인 원자와 인접하고 있는 벌집형(honeycomb) 격자를 이루는데 이는 흑연의 경우와 같다. 그림 1과 같이 흑린에서 주름과 나란한 방향으로 인 원자가 지그재그(zigzag) 사슬 모양으로 배열되기 때문에 이 방향을 흑린의 지그재그 방향이라고 부르고, 지그재그 방향에 수직인 방향을 그래핀에서와 마찬가지로 안락의자(armchair) 방향이라고 부른다. 지그재그 방향의 격자 상수는 3.31 Å이고, 안락의자 방향의 격자 상수는 4.38 Å이며, 주름의 깊이는 2.06 Å이다.^[19] 이웃한 원자 사이의 거리를 살펴보면, 지그재그 사슬에서는 이웃한 인 원자 사이의 거리가 2.17 Å이고, 안락의자 방향으로 이웃한 인 원자 사이의 거리가 2.20 Å이다.^[19] 그래핀의 경우에는 층에 수직인 축에 대해 60° 회전 대칭성이 있지만, 흑린 단일층(monolayer)의 경우에는 주름진 구조로 인하여 층에 수직인 축에 대해 180° 회전 대칭성만 존재한다.

층이 쌓여 벌크가 되는 구조를 살펴보면, 흑연의 경우에 각 층이 쌓일 때 한 층 위에 다른 층이 똑바로 올라가는 것이 아니라 옆으로 어긋나는 ABAB 쌓기 구조를 가지는데, 흑린의 경우에도 지그재그 방향으로 어긋나는 ABAB 쌓기 구조를 가지고 있다. 흑연의 경우에는 단위 격자에 반드시 2개 층이 들어가야 하지만, 흑린의 경우에는 가장 작은 단위격자에 인 원자 층이 1층만 들어가며, 이 경우에 단위 격자는 인 원자를 4개 포함하는 단사정계(monoclinic) 구조가 된다. 한편, 단위 격자를 2배로 하여 원자 층이 2개 들어가도록 하면, 단위 격자가 그림 1에서와 같이 격자 벡터들이 모두 서로 수직을 이루며 격자 벡터들의 크기가 세 방향으로 모두 다른 값을 가지는 사방정계(orthorhombic) 구조가 된다. 사방정계 단위 격자에는 인 원자가 8개 들어가며 인 원자 층에 수직인 격자 상수가 10.50 Å이다.^[19]

흑린의 전자 구조

1950년대에 R. W. Keyes는 흑린 벌크의 전기전도도를 온도의 함수로 측정하여 흑린이 띠틈간격 0.33 eV를 가지는 반도체임을 밝혔으며,^[7] 1980년대에 Y. Takao와 H. Asahina와 A. Morita는 광학음 방법을 사용하여 에너지 띠틈 구조를 이론적으로 연구하였다.^[8]

인 원자가 4개 들어가는 단사정계 단위 격자를 사용하여 흑린 벌크의 결정 구조를 표시하면 브릴루앙 구역(Brillouin zone)이 그림 2와 같이 8면체가 되며, 이러한 브릴루앙 구역을 사용하여 흑린 벌크의 에너지 띠틈 구조를 표시하면, 그림 3과 같이 전자가 채워진 가전자 띠틈(valence band)의 에너지 최고점이 브릴루앙 구역의 Z점에 있고 전자가 채워지지 않은 전도 띠틈(conduction band)의 에너지 최저점도 Z점에 있는 직접 띠틈간격을 가진다. 한편, 흑린 벌크의 결정 구조를 인 원자 층이 2개 들어가는 사방정계 단위 격자로 표시하면, 브릴루앙 구역이 직육면체가 되어 사용하기 편리한데, 이 경우에는 가전자 띠틈의 에너지 최고점과 전도 띠틈의 에너지 최저점이 모두 브릴루앙 구역의 Γ 점으로 옮겨진 직접 띠틈간격을 가진다.

REFERENCES

- [13] J. Kim, S. S. Baik, S. H. Ryu, Y. Sohn, S. Park, B.-G. Park, J. Denlinger, Y. Yi, H. J. Choi and K. S. Kim, *Science* **349**, 723 (2015).
- [14] S. S. Baik, K. S. Kim, Y. Yi and H. J. Choi, *Nano Lett.* **15**, 7788 (2015).
- [15] H. Doh and H. J. Choi, *2D Mater.* **4**, 025071 (2017).
- [16] R. Fei, V. Tran and L. Yang, *Phys. Rev. B* **91**, 195319 (2015).
- [17] Q. Liu, X. Zhang, L. B. Abdalla, A. Fazio and A. Zunger, *Nano Lett.* **15**, 1222 (2015).
- [18] K. Dolui and S. Y. Quek, *Sci. Rep.* **5**, 11699 (2015).
- [19] R. W. G. Wyckoff, *Crystal Structures*, 2nd ed. (John Wiley & Sons, New York, 1963), Vol. 2, p. 30.

Fig. 2. The Brillouin zone of bulk black phosphorus corresponding to the monoclinic primitive unit cell. The rectangle $\Gamma XM'Y$ on the k_x - k_y plane is the two-dimensional Brillouin zone of thin films of black phosphorus. Reprinted with permission from Ref. 8.

가전자 띠의 에너지 최고점과 전도 띠의 에너지 최저점에서 전자의 파동 함수를 살펴보면, 전자의 파동함수가 주로 흑린 층에 수직인 p 궤도 함수(orbital)로 이루어져 있다. 이러한 p 궤도 함수 사이의 결합 구조를 살펴보면, 가전자 띠의 에너지 최고점에서는 인 원자의 p 궤도 함수가 지그재그 방향으로 π -반결합(antibonding)을 하고 안락의자 방향으로 σ -결합을 한다. 이와 반대로 전도 띠의 에너지 최저점에서는 인 원자의 p 궤도 함수가 지그재그 방향으로 π -결합을 하고 안락의자 방향으로 σ -반결합을 한다. 이렇게 결합 방식이 다르기 때문에 층에 수직하면서 지그재그 방향 P-P 결합의 중점을 지나는 축에 대해 파동함수를 180° 회전시키면, 가전자 띠의 에너지 최고점 부근 상태들은 파동 함수의 부호가 바뀌지만, 전도 띠의 에너지 최저점 부근 상태들은 파동함수의 부호가 바뀌지 않는다.

앞에서 언급한 바와 같이 안락의자 방향으로 이웃한 인(P) 원자 사이의 거리가 지그재그 사슬에 있는 인(P) 원자 사이의 거리보다 약간 크지만 띠간격 부근의 전자 상태를 만드는 p 궤도 함수들이 안락의자 방향으로 σ -결합 또는 반결합을 하고 지그재그 방향으로 π -결합 또는 반결합을 하기 때문에 안락의자 방향의 강충뛰기 에너지(hopping energy)가 지그재그 방향보다 크다. 이로 인하여 전자의 유효 질량(effective mass)이 안락의자 방향으로 전자의 진공 중 질량의 약 10% 수준이고, 지그재그 방향으로 오히려 진공 중 질량보다 크다. 정리하면, 흑린은 안락의자 방향의 강충뛰기가 지그재그 방향보다 상당히 강하기 때문에 안락의자 방향의 전자 유효 질량이 지그재그 방향보다 매우 작게 되는 비등방성을 가진다.

흑린은 층의 개수에 따라 띠간격이 매우 민감하게 변하며, 층의 개수가 줄어들면 띠간격이 증가하여 흑린 단일층의 경우에는 그림 4와 같이 2차원 브릴루앙 구역의 Γ 점에서 약 1.8 eV의 직접 띠간격을 가진다.^[8] 흑린에서 층들이 반데르발스 결합을 하고 있고 층 사이의 간격이 크지만 층에 수직인 방향으로 전자의 강충뛰기가 상당히 유효하게 발생하기 때문에 흑린

Fig. 3. Electronic band structure of bulk black phosphorus obtained by tight-binding method.^[8] The bulk Brillouin zone is shown in Fig. 2. The hatched area represents the energy gap between the valence and conduction bands. Reprinted with permission from Ref. 8.

Fig. 4. Electronic structure of monolayer black phosphorus obtained by tight-binding method.^[8] The two-dimensional Brillouin zone is shown in Fig. 2. The hatched area represents the energy gap between the valence and conduction bands. Reprinted with permission from Ref. 8.

벌크의 경우에 층에 수직인 방향으로 상당히 큰 에너지 띠폭 (band width)을 가지며, 이로 인하여 흑린 다층의 경우에 층의 개수에 따라 띠간격의 크기가 달라진다.

그림 3과 그림 4는 실험 결과를 참고한 꺾임곡선 방법으로 계산한 에너지 띠 구조이다. 이와 달리 밀도범함수 이론(density functional theory, DFT)의 일반화된 기울기 근사(generalized gradient approximation, GGA)를 이용하여 실험 결과를 참고하지 않는 제일원리적 전자구조 계산을 수행하면 띠간격이 저평가되어 흑린 벌크의 경우에는 아예 띠간격이 없어지는 금속성 에너지 띠 구조가 산출되고, GW 방법을 사용하여 띠간격 계산의 정확도를 높이면 0.1 eV 정도의 띠간격이 계산된

다.^[20] 한편, GW 계산 결과를 이용하여 꺾음 방법의 꺾기 에너지 산출하면 안락의자 방향의 꺾기 에너지가 지그재그 방향의 약 2.5배이며 서로 다른 부호를 가지는데,^[21] 이는 σ -결합과 π -결합의 차이를 반영하는 것이다.

흑린의 띵간격 조절

흑린의 띵간격은 외적 요인에 의해 조절이 가능하다. 흑린 벌크에 압력을 가하여 부피를 약 0.15% 감소시키면 띵간격이 약 0.2 eV로 줄어들어 실험으로 측정되었다.^[7] 한편, 이론적 계산 결과로는 흑린 나노 리본 또는 나노 박막에 전기장을 걸면 띵간격이 줄어들고 아주 강한 전기장에서 띵간격이 아예 없어진다.^[17,18,22] 흑린 나노 리본의 경우에 리본의 가장자리에 수직하면서 리본 면에 나란한 방향으로 강한 전기장을 가하면 띵간격이 줄어들어 사라지는 것이 이론적으로 예측되었고,^[22] 흑린 나노 박막의 경우에도 두께가 두 층 이상인 경우에 층에 수직한 방향으로 강한 전기장을 가하면 띵간격이 줄어들어 사라지는 것이 이론적으로 예측되었다.^[17,18,22]

전기장을 걸어서 흑린 나노 리본 또는 나노 박막의 에너지 띵간격을 없애는 실험 결과는 아직 보고되지 않았지만, 전기장을 거는 효과를 화학적으로 구현하는 것은 실험적으로 가능하였다.^[13] 흑린 표면에 칼륨 원자를 뿌리면 칼륨이 이온화하면서 칼륨 이온이 흑린 표면에 강한 전기장을 만들게 되는데, 이것은 실험으로 구현할 수 있다.^[13] 그림 5와 같이, 흑린 표면에 칼륨 원자를 뿌리는 실험을 하면 처음에는 칼륨이 흑린의 전도 띵에 전자를 공급하면서 흑린의 에너지 띵 구조가 전체적으로 아래로 내려가다가 칼륨의 양이 특정한 값을 초과하면 가전자 띵의 에너지 최고점이 오히려 올라와서 전도 띵의 에너지 최저점과 만나 띵간격이 사라진다.^[13,14]

위와 같이 흑린의 에너지 띵간격은 압력에 의한 방법과 칼륨 뿌리기에 의한 방법으로 실험적으로 조절 가능하였다. 이러한 띵간격 조절은 그래핀이나 기존의 2차원 결정체에서 좀처럼 보지 못했던 정도로 큰 폭으로 구현되었으며 흑린에 대한 학문적 호기심을 일으키고 새로운 응용 가능성을 열었다.

흑린의 디랙 준금속성

흑린을 이루는 개개의 층은 앞에서 언급한 바와 같이 인(P) 원자 1개가 주위의 3개 원자와 공유결합을 한 벌집구조이며 이는 그래핀의 경우와 같다. 그래핀의 경우에는 페르미 에너지에 디랙 콘(Dirac cone)이 존재하는 특이한 전자구조를 가지고 있는데, 이를 페르미 에너지에서 상태 밀도가 0인 도체로 묘사하기도 하고 띵간격이 0인 반도체로 묘사하기도 한다. 흑린의

Fig. 5. Tuning of the band gap in the surface of black phosphorus by potassium adsorption. From Ref. 13. Reprinted with permission from AAAS.

경우에는 에너지 띵간격이 없어지면 그래핀과 유사한 전자 구조가 발생한다.

흑린 박막에 칼륨 원자를 뿌리면 가전자 띵과 전도 띵이 Γ 점에서 만나 띵간격이 사라지게 되는데, 띵간격이 막 사라지는 경우에 안락의자 방향으로의 에너지 띵 구조가 직선 모양이 되고 지그재그 방향으로의 포물선 모양이 된다.^[13,14] 이 경우에 Γ 점을 반-디랙 점(half-Dirac point)이라고 할 수 있다.^[15] 한편, 칼륨 원자를 더 뿌리면 가전자 띵의 에너지 최고점이 전도 띵의 에너지 최저점보다 높게 되는 역전이 일어나며, 이 경우에는 그림 6의 a와 같이 2차원 브릴루앙 구역에서 전도 띵과 가전자 띵이 오직 2개의 점에서만 만난다.^[14] 이때 만나는 점 부근의 에너지 띵 구조가 모든 운동량 방향으로 직선 모양이 되므로 이 점들을 디랙 점이라고 할 수 있다. 디랙 점 부근의 전자 상태는 일반적으로 수도 스핀(pseudo spin)으로 표시할 수 있으며, 칼륨 원자가 뿌려진 흑린 박막에서는 그림 6의 b와 같이 칼륨 이온 쪽으로 당겨진 전도 띵 상태(그림 6의 b에서 왼쪽으로부터 첫 번째 파동함수)와 칼륨 이온 쪽으로부터 밀려난 가전자 띵 상태(그림 6의 b에서 왼쪽으로부터 세 번째 파동함수)가 수도 스핀의 기저(basis)가 된다. 그래핀과 마찬가지로 흑린의 디랙 점에서 수도 스핀이 나선성(chirality)을 가지므로 베리 위상(Berry phase)이 발생한다.

그래핀의 경우에는 스핀-궤도 상호작용을 고려하면 디랙 점에서 띵간격이 발생하였는데, 이와 달리 칼륨 원자가 뿌려진

REFERENCES

- [20] A. N. Rudenko and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **89**, 201408 (2014).
- [21] A. N. Rudenko, S. Yuan and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **92**, 085419 (2015).
- [22] H. Guo, N. Lu, J. Dai, X. Wu and X. C. Zeng, J. Phys. Chem. C **118**, 14051 (2014).

Fig. 6. Dirac points and chiral pseudospin behaviors in two-dimensional black phosphorus when the energy gap is closed by potassium adsorption. Reprinted with permission from Ref. 14. Copyright 2015 American Chemical Society.

흑린 박막은 스핀-궤도 상호작용을 고려하면 전도 띠와 가전자 띠가 만나는 디랙 점이 운동량 공간에서 그림 7과 같이 2개로 갈라져서 2차원 브릴루앙 구역 안의 총 4개 점에서 전도 띠와 가전자 띠가 만나게 된다.^[14] 이 4개의 점은 흑린의 결정 구조가 가지는 대칭성에 의해 보호되며 2차원 바일 점(Weyl point)에 해당한다고 할 수 있다.^[23]

최소 모형

마지막으로, 흑린의 에너지 띠간격 근처의 전자구조를 효과적으로 기술할 수 있는 최소 모형(minimal model)을 살펴보자. 우선 그래핀의 경우와 유사하게, 흑린 층에 수직인 방향의 p 궤도 함수를 인(P) 원자마다 한 개씩 고려한다. 이 p 궤도 함수들이 흑린의 지그재그 사슬에서 이웃한 인(P) 원자 사이와 안락의자 방향으로 이웃한 인(P) 원자 사이에서 강충뛰기를 하므로 지그재그 방향의 강충뛰기 에너지와 안락의자 방향의 강충뛰기 에너지가 필요하며, 이외에도 흑린 벌크의 경우에는 서로 이웃한 층의 가장 가까운 인(P) 원자 사이에서도 강충뛰기를 하므로 층간 강충뛰기 에너지가 필요하다. 만약 흑린이 전기장 안에 놓이게 되면 서로 다른 층 사이에 전기적 위치에너지의 차이가 생기며, 하나의 층 안에서도 주름진 구조로 인하여 전기적 위치에너지의 차이가 생긴다. 이러한 전기적 위치에너지 차이를 고려하기 위하여 해밀토니안(Hamiltonian)에 에너지 대각 성분들(diagonal elements)이 필요하다.^[15]

우선 위와 같이 최소 모형으로 흑린 단일층을 고려하면 에너지 띠 구조를 손으로 계산할 수 있다. 흑린 단일층에서는 안락의자 방향의 강충뛰기 에너지 절대값이 지그재그 방향의 강충뛰기 에너지 절대값의 2배 이하이면 에너지 띠간격이 없어지게 되는데, 본래의 흑린 단일층은 안락의자 방향의 강충뛰기 에너지 절대값이 지그재그 방향의 강충뛰기 에너지 절대값의 2배를 초과하기 때문에 에너지 띠간격이 존재한다.^[15] 만약, 압력이나 변형으로 흑린의 비등방성을 줄여서 안락의자 방향의 강충뛰기

Fig. 7. Spin-orbit induced splitting of Dirac points of two-dimensional black phosphorus when the energy gap is closed by potassium adsorption. Reprinted with permission from Ref. 14. Copyright 2015 American Chemical Society.

에너지 절대값과 지그재그 방향의 강충뛰기 에너지 절대값의 차이를 줄일 수 있으면 흑린 단일층의 에너지 띠간격을 줄여서 닫을 수 있다. 한편, 최소 모형에 의하면 흑린 단일층의 경우에는 수직인 전기장에 의해 에너지 띠간격을 줄이지 못하며^[15] 이는 밀도범함수 계산 결과에서도 마찬가지이다.^[22]

흑린이 여러 층 있는 경우에는 층간 강충뛰기 에너지를 증가시키면 에너지 띠간격을 닫을 수 있는데, 흑린에 압력을 가하여 층간 간격을 줄이면 층간 강충뛰기 에너지를 증가시킬 수 있다. 또한, 층에 수직인 방향으로 전기장을 걸어서 층에 따라 전기적 위치에너지가 달라지게 하면 에너지 띠간격이 줄어들며 이를 이용하여 에너지 띠간격을 닫을 수 있다.^[15,22]

위와 같이 흑린 단일층 또는 다층의 에너지 띠간격을 닫는 경우에 에너지 띠간격을 닫는 방법에 따라 흑린의 에너지 띠 구조는 세밀한 부분에서 차이가 있을 수 있지만, 에너지 띠간격을 닫는 방법에 상관없이 에너지 띠간격이 일단 닫히면 디랙 점을 가지는 디랙 준금속 특성이 공통적으로 나타난다.^[15]

나오는 글

본 글에서는 흑린의 원자구조, 전자구조, 띠간격 조절 및 디랙 준금속 특성에 대해 간략히 서술하였다. 흑린은 반데르발스 힘으로 결합된 층상 구조 물질이며, 박막의 경우에 층의 개수에 따라 에너지 띠간격이 많이 달라지고 압력과 전기장 등 외부적 요인으로 에너지 띠간격을 많이 조절할 수 있는 특성이 있다. 뿐만 아니라 에너지 띠간격이 없어지면 디랙 점이 나타나는 디랙 준금속 특성을 가지고 있다. 이와 같이 흑린은 그래핀이 가지는 특성과 전이금속 칼코겐 화합물이 가지는 특성을 동시에 가지고 있어서, 향후 기초 과학 연구와 소자 응용 연구의 양 측면에서 매우 흥미로운 물질이다.

REFERENCES

- [23] J. Ahn and B.-J. Yang, Phys. Rev. Lett. **118**, 156401 (2017).