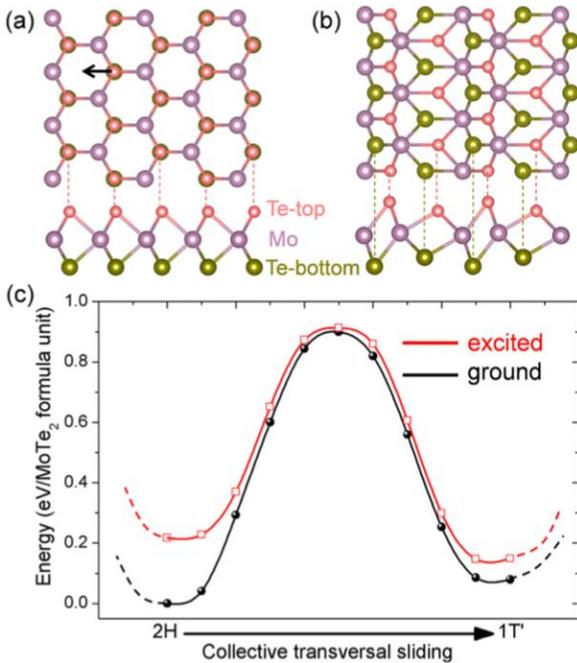


빛을 통해 반도체와 금속 상태를 오가는 2차원 물질의 특성 규명

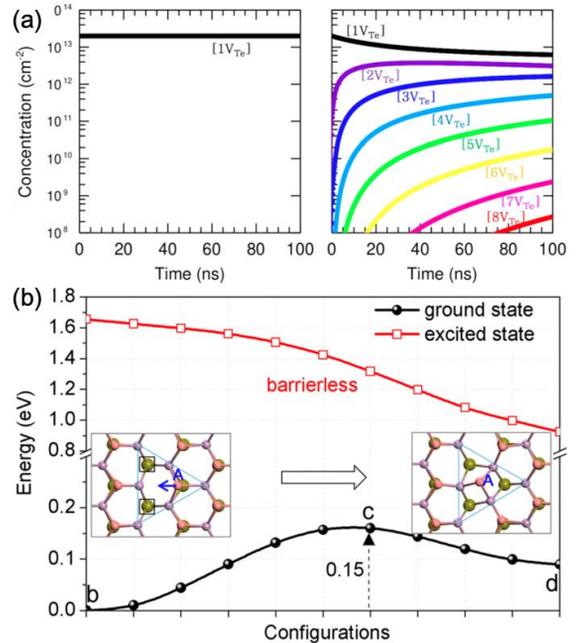
- 제1저자 : CHEN SI(BEIHANG UNIVERSITY)
- 교신저자 : 방준혁(스핀공학물리연구팀), SHENGBAI ZHANG(RENSSELAER POLYTECHNIC INSTITUTE)
- NANO LETT. / 2019.05. (DOI.ORG/10.1021/ACS.NANOLETT.9B00613)

연구내용

전이금속칼코젠 화합물의 빛의 의한 상변화, 즉, 반도체 특성을 가지는 2H 상태에서 도체의 특성일 때 나타나는 1T' 상태로의 변화를 계산과학을 통해 이론적으로 밝혀냄.
 빛에 의한 2H - 1T' 상태 변화는, 기존에 알고 있던 Te 원자의 집단적 움직임 [그림1]에 의한 결과가 아닌, Te 빈공간 결함의 뭉침 (clustering)에 의한 현상임.



[그림1] MoTe₂ 의 (a) 2H와 (b) 1T' 상태의 원자구조.
 (c) Te 원자의 집단적 움직임에 의한 2H - 1T' 상 변화 에너지 곡선 [검정: 바닥상태, 빨강: 들뜬 상태]



[그림2] (a) 바닥상태(좌)와 들뜬상태(우)에서의 Te 빈 공간 결함의 뭉침 (clustering) 비교.
 (b) Te 빈 공간 결함 뭉침에 의한 1T' 상전이 에너지 변화

기대효과

전이금속칼코젠 화합물 2H - 1T' 상전이 메커니즘을 이론적으로 정립함으로써 전이금속칼코젠 화합물의 반도체/도체 특성을 효율적으로 제어할 수 있게 되었으며, 이차원 물질 소자 제작 공정 기술을 크게 향상시키는데 기여함.