



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0126125  
(43) 공개일자 2016년11월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C01G 39/00 (2006.01) C01G 39/06 (2006.01)  
C01G 41/00 (2006.01)  
(52) CPC특허분류  
C01G 39/00 (2013.01)  
C01G 39/006 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2015-0056436  
(22) 출원일자 2015년04월22일  
심사청구일자 2015년04월22일

(71) 출원인  
울산과학기술원  
울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50  
(72) 발명자  
박영신  
경상남도 진주시 천수로 30 101동 1101호  
한상욱  
경상남도 함천군 가야면 산촌2길 6  
윤원석  
울산광역시 동구 화진4길 54 (방어동)  
(74) 대리인  
특허법인 대아

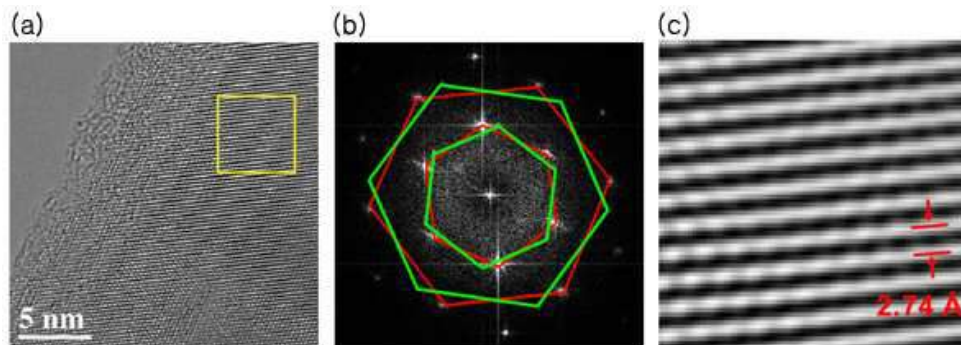
전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 원자선이 형성된 단결정 복합체 및 단결정 복합체의 금속화방법

### (57) 요약

본 발명은 원자선이 형성된 단결정 복합체 및 단결정 복합체의 금속화방법에 관한 것으로, 더욱 구체적으로 단결정 복합체의 표면에 수소가 상기 단결정 복합체의 칼코겐족 원소와 결합되어 원자선이 형성된 것을 특징으로 하는 원자선이 형성된 단결정 복합체 및 이의 제조방법에 관한 것이다.

대표도 - 도2



(52) CPC특허분류

**C01G 39/06** (2013.01)

**C01G 41/006** (2013.01)

**C01P 2002/01** (2013.01)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1345227412 [2013R1A1A2011426]

부처명 교육부

연구관리전문기관 한국연구재단

연구사업명 일반연구자지원

연구과제명 III족 질화물 반도체 나노구조의 편광 및 그의 소자 응용

기 여 율 1/1

주관기관 국립대학법인 울산과학기술대학교 산학협력단

연구기간 2014.06.01 ~ 2015.05.31

---

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

단결정 복합체의 표면에 수소가 상기 단결정 복합체의 칼코겐족 원소와 결합되어 원자선이 형성된 것을 특징으로 하는 원자선이 형성된 단결정 복합체.

#### 청구항 2

제1항에 있어서,

상기 단결정 복합체는  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{MoTe}_2$ ,  $\text{WS}_2$  및  $\text{WSe}_2$ 로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종인 것을 특징으로 하는 원자선이 형성된 단결정 복합체.

#### 청구항 3

제2항에 있어서,

상기 단결정 복합체가  $\text{MoS}_2$  또는  $\text{WS}_2$ 인 경우 수소는 황(S)과 결합되어 원자선이 형성되는 것을 특징으로 하는 원자선이 형성된 단결정 복합체.

#### 청구항 4

제2항에 있어서,

상기 단결정 복합체가  $\text{MoSe}_2$  또는  $\text{WSe}_2$ 인 경우 수소는 셀레늄(Se)과 결합되어 원자선이 형성되는 것을 특징으로 하는 원자선이 형성된 단결정 복합체.

#### 청구항 5

제2항에 있어서,

상기 단결정 복합체가  $\text{MoTe}_2$ 인 경우 수소는 텔루륨(Te)과 결합되어 원자선이 형성되는 것을 특징으로 하는 원자선이 형성된 단결정 복합체.

#### 청구항 6

제1항에 있어서,

상기 단결정 복합체는 표면에 수소가 결합되어 금속 특성을 나타내는 것을 특징으로 하는 원자선이 형성된 단결정 복합체.

#### 청구항 7

단결정 복합체의 표면을 절개한 후 수소를 공급하고 열처리하는 것을 특징으로 하는 단결정 복합체의 금속화방법.

## 청구항 8

제7항에 있어서,

상기 절개는  $1 \times 10^{-10} \sim 9 \times 10^{-10}$  Torr에서 수행되는 것을 특징으로 하는 단결정 복합체의 금속화방법.

## 청구항 9

제7항에 있어서,

상기 수소는  $1 \times 10^{-3} \sim 1 \times 10^{-1}$  Torr로 공급되는 것을 특징으로 하는 단결정 복합체의 금속화방법.

## 청구항 10

제7항에 있어서,

상기 열처리온도는 200 ~ 400 °C에서 1시간 동안 수행되는 것을 특징으로 하는 단결정 복합체의 금속화방법.

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 단결정 복합체의 칼코겐화 원소에 수소가 결합되어 원자선이 형성된 단결정 복합체 및 단결정 복합체에 원자선을 형성시켜 단결정 복합체를 금속화하는 방법에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002] 반도체 소자는 반도체 결정을 사용하여 발진, 증폭, 정류, 광전 변환, 자전 변환 등의 동작을 일으키게 하는 소자의 총칭으로, 트랜지스터, 다이오드, 정류 소자, 광전효과 소자, 반도체 저항소자, 자전효과 소자, 열전효과 소자, 집적회로(IC) 등이 있다. 현재 반도체 소자는 전자의 전기적 성질(전하, Charge)과 전자가 갖는 스핀(Spin)을 동시에 이용하기 위해 다양한 구조와 물질들이 활발히 연구되고 있다.

[0003] 한편, 이황화몰리브덴( $\text{MoS}_2$ )은 자연에 풍부하게 존재하고 있으며, 오래전부터 탈황 소재와 합금강 또는 윤활유의 첨가제로 이용되고 있다. 이황화몰리브덴은 흑연과 비슷하게 구조적으로 적층된 층상 구조를 가지며, 층간 반데르발스(van der Waals) 결합으로 약하게 결합되어 있다. 이황화몰리브덴 단결정은 몰리브덴(Mo)과 황(S)이 육각형의 구조를 이루며 단면은 몰리브덴 원자로 구성된 한 층에 황으로 구성된 원자 층들이 양쪽으로 샌드위치 형태를 이루고 있다. 2차원 층상구조 물질은 xy-평면에서는 매우 강한 공유결합(covalent bonding)을 형성하고 z축으로는 약한 반데르발스 결합을 가져 층과 층 사이의 공간에 원자나 분자 그리고 이온들의 삽입이 가능하다. 여러 기능성 물질들을 고정된 층 사이의 특정 자리에 위치시킴으로 독특한 화학적/물리적 성질을 갖는 신물질을 고안하는 등의 무기물의 성질과 유기물의 성질을 상호 보완할 수 있는 층상 화합물을 만들 수 있다.

[0004] 전술한 바와 같이, 반도체 물질인 이황화몰리브덴은 트랜지스터, 다이오드, 정류 소자, 광전효과 소자, 반도체 저항소자, 자전효과 소자, 열전효과 소자, 집적회로 등의 다양한 분야에 사용되고 있으나, 반도체의 이황화몰리브덴을 도체로 변환시킬 수 있다면 소자 및 전자장치에서의 전자의 이동을 원활히 하기 위한 구리, 은과 같은 전도성 금속의 증착이 필요하지 않아 공정을 단순화할 수 있고, 이를 이용하여 다양한 분야의 전자기기에 다양한 용도로 응용할 수 있을 것이다.

[0005] 이와 관련된 선행문헌으로는 대한민국 공개특허 제10-2000-0075549호(2000.12.15. 공개)에 개시되어 있는 도전체 제조용 조성물 및 이를 이용하여 기판 상에 도체를 제조하는 방법이 있다.

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

- [0006] 따라서, 본 발명은 반도체의 단결정 복합체 표면에 수소를 결합시켜 원자선을 형성시킴으로써 도체 특성을 나타내는 단결정 복합체 및 단결정 복합체의 금속화방법을 제공하는데 있다.
- [0007] 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 이상에서 언급한 과제(들)로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 과제(들)는 이하의 기재로부터 당업자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

### 과제의 해결 수단

- [0008] 상기 과제를 해결하기 위해, 본 발명은 단결정 복합체의 표면에 수소가 상기 단결정 복합체의 칼코겐족 원소와 결합되어 원자선이 형성된 것을 특징으로 하는 원자선이 형성된 단결정 복합체를 제공한다.
- [0009] 또한, 본 발명은 단결정 복합체의 표면을 절개한 후 수소를 공급하고 열처리하는 것을 특징으로 하는 단결정 복합체의 금속화방법을 제공한다.

### 발명의 효과

- [0010] 본 발명에 따르면, 단결정 복합체의 칼코겐족 원소에 수소가 결합되어 원자선이 형성됨으로써 반도체 특성을 갖는 단결정 복합체가 도체 특성을 갖는 원자선을 단결정 복합체 표면에 생성시킬 수 있어 단결정 복합체가 사용되는 전자기기에 다양한 용도로 이용될 수 있다.
- [0011] 또한, 간단한 공정으로 원자선을 형성시킬 수 있어 나노 스케일의 가공 기술을 바탕으로 나노 전자기기에 적용할 수 있을 뿐 아니라, 표면 절개 및 수소 분위기에서의 열처리를 통해 단결정 복합체의 표면에 원자선을 형성시켜 단결정 복합체를 금속화시킬 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

- [0012] 도 1의 (a)는 원료물질인  $\text{MoS}_2$ 의 고분해능 투과전자현미경(HRTEM) 사진이고, (b)는 (a) 사진의 고속 푸리에 변환(Fast Fourier transformation)한 사진이며, (c)는 (a)의 특정영역(노란색 박스) 사진의 역변환 고속 푸리에 변환(Inverse Fast Fourier transformation) 사진이다.
- 도 2의 (a)는 원료물질인  $\text{MoS}_2$ 을 저진공에서 수소를 채운 후 열처리하여 원자선이 형성된  $\text{MoS}_2$ 의 투과전자현미경 사진이며, (b)는 (a) 사진의 고속 푸리에 변환 사진이고, (c)는 (a)의 특정영역(노란색 박스) 사진의 역변환 고속 푸리에 변환 사진이다.
- 도 3은 본 발명에 따른 원자선 형성(도 2)의 메커니즘을 규명하기 위해, 초고진공(UHV)에서  $\text{MoS}_2$ 를 절개하여 수소를 고진공까지 채운 후 열처리 전후의  $\text{MoS}_2$  표면을 방사광 가속기(Synchrotron)기반의 광전자 분광법(Photoelectron spectroscopy)을 이용하여 측정한 스펙트럼을 나타낸다. 구체적으로, 도 3의 (a) ~ (c)는 각각 탄소(C) 1s, 몰리브덴(Mo) 3d, 그리고 황(S) 2p의 내각준위(core-level) 스펙트럼을 나타내고, (d)는 가전자대(valence band)의 변화를 나타낸 것이다.
- 도 4는 수소와  $\text{MoS}_2$  표면의 열처리 반응성을 비교하기 위하여, 초고진공에서  $\text{MoS}_2$ 를 절개하여 질소를 고진공까지 채운 후 열처리 전후의  $\text{MoS}_2$  표면을 광전자분광으로 분석한 것으로, 도 4의 (a) ~ (c)는 각각 탄소(C) 1s, 몰리브덴(Mo) 3d, 그리고 황(S) 2p의 내각준위(core-level) 스펙트럼을 나타내고, (d)는 가전자대의 변화를 나타낸 것이다.
- 도 5의 (a)와 (b)는  $\text{MoS}_2$  표면과 질소의 반응성을 확인하기 위하여 광전자분광법으로 측정한 몰리브덴(Mo) 3p와

질소(N) 1s (결합에너지(binding energy) = 400 eV) 내각준위 스펙트럼을 나타낸 것이다.

도 6의 (a)는 도 4에서 수소를 고진공으로 채운 뒤 열처리한 MoS<sub>2</sub>의 TEM 사진이고, (b)는 도 5에서 질소를 고진공으로 채운 뒤 열처리한 MoS<sub>2</sub>의 TEM 사진이며, (c)는 각각의 TEM 사진으로부터 얻어진 선(line) 분석 결과이며, (d)는 단일층 1L-MoS<sub>2</sub>의 S 층의 양면에 대한 H-S 결합 형태를 나타낸 것이고, (e)는 두 층 2L-MoS<sub>2</sub>의 상부층의 S 층의 양면에 대한 H-S 결합 형태를 나타낸 것이다.

도 7의 (a)와 (b)는 도 6의 (d)와 (e) 구조에서 단결정 복합체에서 수소가 결합된 1L-MoS<sub>2</sub>와 2L-MoS<sub>2</sub>의 띠 구조(band structure)를 나타내며, (c)는 (b)의 띠 구조를 상태밀도(density of state)를 나타내고, (d)는 초고진공에서 MoS<sub>2</sub> 표면을 절개하여 고진공으로 수소를 채운 뒤 열처리를 하는 각 과정의 MoS<sub>2</sub> 표면에서의 변화를 각분해 광전자분광법(Angle-resolved photoelectron spectroscopy)을 이용하여 측정한 실험적인 띠 구조 결과이며, (e)는 (d)의 실험적인 띠 구조를 (c)의 계산을 이용하여 얻은 상태밀도와 비교하기 위하여, 가전자 대들로 나타낸 결과이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0013] 이하 첨부된 도면을 참조하면서 본 발명에 따른 바람직한 실시예를 상세히 설명하기로 한다.
- [0014] 본 발명의 이점 및 특징, 그리고 그것을 달성하는 방법은 첨부된 도면과 함께 상세하게 후술되어 있는 실시예들을 참조하면 명확해질 것이다.
- [0015] 그러나 본 발명은 이하에 개시되는 실시예들에 의해 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 구현될 것이며, 단지 본 실시예들은 본 발명의 개시가 완전하도록 하며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자에게 발명의 범주를 완전하게 알려주기 위해 제공되는 것이며, 본 발명은 청구항의 범주에 의해 정의될 뿐이다.
- [0016] 또한, 본 발명을 설명함에 있어 관련된 공지 기술 등이 본 발명의 요지를 흐리게 할 수 있다고 판단되는 경우 그에 관한 자세한 설명은 생략하기로 한다.
- [0017] 본 발명은 단결정 복합체의 표면에 수소가 상기 단결정 복합체의 칼코젠족 원소와 결합되어 원자선이 형성된 것을 특징으로 하는 원자선이 형성된 단결정 복합체를 제공한다.
- [0018] 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체는 단결정 복합체의 칼코젠족 원소에 수소가 결합되어 원자선이 형성되어 반도체 특성을 갖는 단결정 복합체가 금속 특성(도체 특성)을 갖는 원자선으로 변환시킬 수 있어 단결정 복합체가 사용되는 전자기기에 다양한 용도로 이용될 수 있다. 또한, 간단한 공정으로 원자선을 형성시킬 수 있어 나노 스케일의 가공 기술을 바탕으로 나노 전자기기에 적용할 수 있을 뿐 아니라, 표면 절개 및 수소 분위기에서의 열처리를 통해 단결정 복합체의 표면에 원자선이 형성시켜 단결정 복합체를 금속화시킬 수 있다.
- [0019] 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체에서 상기 단결정 복합체는 MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, MoTe<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub> 및 WSe<sub>2</sub>로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종을 사용할 수 있다. 이때, 상기 단결정 복합체가 MoS<sub>2</sub> 또는 WS<sub>2</sub>인 경우 수소는 황(S)과 결합되어 원자선이 형성되고, 상기 단결정 복합체가 MoSe<sub>2</sub> 또는 WSe<sub>2</sub>인 경우 수소는 셀레늄(Se)과 결합되어 원자선이 형성되며, 상기 단결정 복합체가 MoTe<sub>2</sub>인 경우 수소는 텔루륨(Te)과 결합되어 원자선이 형성된다.
- [0020] 상기 단결정 복합체는 단결정 복합체의 표면에 수소가 결합되어 원자선을 형성함으로써 상기 단결정 복합체는 금속 특성을 나타낼 수 있다.
- [0021] 또한, 본 발명은 단결정 복합체의 표면을 절개한 후 수소를 공급하고 열처리하는 것을 특징으로 하는 단결정 복합체의 금속화방법을 제공한다.
- [0022] 본 발명에 따른 단결정 복합체의 금속화방법에서 상기 절개는 수증기 또는 불순물이 반응하는 문제를 방지하기 위해  $1 \times 10^{-10} \sim 9 \times 10^{-10}$  Torr의 초고진공에서 절개하는 것이 바람직하다.

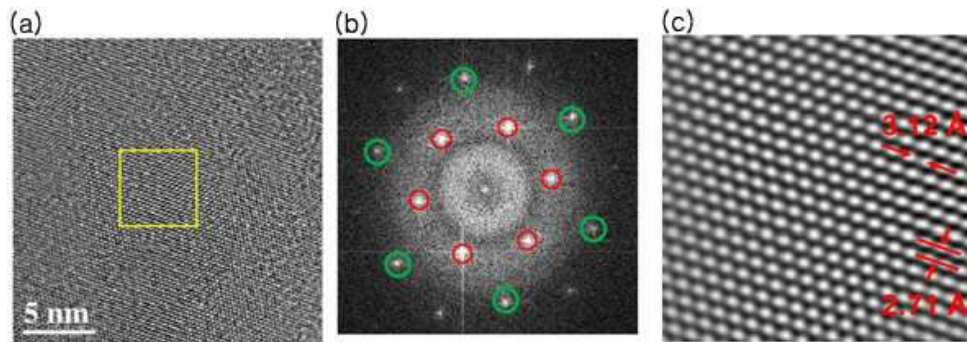
- [0023] 본 발명에 따른 단결정 복합체의 금속화방법은 수소를  $1 \times 10^{-3} \sim 1 \times 10^{-1}$  Torr로 공급되는 것이 바람직하다. 상기 수소가  $1 \times 10^{-3}$  Torr 미만으로 공급되는 경우에는 단결정 복합체의 칼코겐족 원소와 수소의 반응이 느려 원자선 형성이 되지 않을 수 있는 문제가 있고,  $1 \times 10^{-1}$  Torr를 초과하는 경우에는 불순물이 단결정 복합체의 칼코겐족 원소와 반응하여 원자선이 형성되지 않는 문제가 있다.
- [0024] 상기 열처리는 200 ~ 400 °C에서 1시간 동안 수행되는 것이 바람직하다. 상기 열처리가 200 °C 미만에서 수행되는 경우에는 원자성이 완전히 형성되지 않는 문제가 있고, 400 °C를 초과하는 경우에는 황이나 몰리브덴이 증발하는 문제가 있다.
- [0025] 실시예 1: 단결정 복합체의 금속화 1
- [0026] 단결정  $\text{MoS}_2$ 의 표면을  $8 \times 10^{-10}$  Torr의 초고진공 챔버에서 절개한 후 수소 가스( $\text{H}_2$ )를  $1 \times 10^{-2}$  Torr의 고진공으로 챔버 내에 공급하고 300 °C에서 1시간 동안 열처리하여 단결정  $\text{MoS}_2$ 에 원자선을 형성시켜 단결정 복합체를 금속화시켰다.
- [0027] 실시예 2: 단결정 복합체의 금속화 2
- [0028] 단결정  $\text{MoS}_2$ 의 표면을  $3 \times 10^{-10}$  Torr의 초고진공 챔버에서 절개한 후 수소 가스( $\text{H}_2$ )를  $1 \times 10^{-2}$  Torr의 고진공으로 챔버 내에 공급한 후 300 °C에서 1시간 동안 열처리하여 단결정  $\text{MoS}_2$ 에 원자선을 형성시켜 단결정 복합체를 금속화시켰다.
- [0029] 실험예 1: 원자선이 형성된 단결정 복합체의 표면 분석
- [0030] 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체를 비교하기 위해서, 단결정 복합체의 표면과 원자선이 형성된 단결정 복합체의 표면을 투과전자현미경(TEM)으로 분석으로 그 결과를 도 1 및 도 2에 나타내었다.
- [0031] 도 1의 (a)는 원료물질인  $\text{MoS}_2$ 의 고분해능 투과전자현미경(HRTEM) 사진으로, TEM의 전자빔 입사에 의해 다양한 결함들이 형성된 것을 알 수 있다.
- [0032] 도 1의 (b)는 (a) 사진의 고속 푸리에 변환(Fast Fourier transformation)한 사진으로, 육각형으로 배열된 점들이 나타나는 것을 알 수 있고, 빨간 원과 녹색 원의 육각형들은  $\text{MoS}_2$  결정의 (100) 면과 (110) 면에 대응되며, 각각 2.71Å과 1.58Å의 격자 간격( $d$ )을 가졌다.
- [0033] 도 1의 (c)는 (a)의 특정영역(노란색 박스) 사진의 역변환 고속 푸리에 변환(Inverse Fast Fourier transformation) 사진으로,  $\text{MoS}_2$ 가 고결정성 물질임을 나타내고, 격자 상수( $a$ )는 3.12Å이었다.
- [0034] 도 2의 (a)는 원자선이 형성된  $\text{MoS}_2$ 의 투과전자현미경 사진으로, 표면에 균일한 원자선들이 형성된 것을 알 수 있다.
- [0035] 도 2의 (b)는 (a) 사진의 고속 푸리에 변환 사진으로, 빨간색과 녹색의 두개의 육각형이 형성된 것을 나타내고, 육각형이 서로 12 도의 각도로 회전되어 있는데 이는 원자선이 형성된 표면과 초기의 육각형 배열을 유지하고 있는 표면 아랫면이 서로 회전되었을 가능성을 나타낸다. 또한, 원자선이 형성되지 않은  $\text{MoS}_2$  표면의 (100)과 (110) 면 간격은 전술한 바와 같이 2.71Å과 1.58Å이었으나, 원자선 형성에 의해 각각 2.74Å와 1.60Å로 증가된 것을 알 수 있다.
- [0036] 도 2의 (c)는 (a)의 특정영역(노란색 박스) 사진의 역변환 고속 푸리에 변환 사진으로, 원자선이 균일하게 배열된 것을 확인할 수 있었다.
- [0037] 실험예 3: 원자선 형성 전후의 내각준위와 가전자대 변화 분석

- [0038] 본 발명에 따른 원자선이 형성되는 단결정 복합체의 표면과 수소의 반응성을 확인하기 위해, 수소를 공급한 후 열처리 전후의  $\text{MoS}_2$  표면을 방사광 가속기 기반의 광전자 분광법을 이용하여 내각준위와 가전자대 변화를 분석하고, 그 결과를 도 3에 나타내었다. 그리고, 수소 반응성과 비교하기 위하여 질소를 공급한 후 열처리 전후의 변화를 도 4 및 도 5에 나타내었다.
- [0039] 도 3의 (a)는 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체에서 수소를 이용한 원자선 형성 전후의 C 1s의 내각준위 스펙트럼을 나타낸 것이고, (b)는 Mo 3d의 내각준위 스펙트럼을 나타낸 것이며, (c)는 S 2p의 내각준위 스펙트럼을 나타낸 것이고, (d)는 가전자대 변화를 나타낸 것이다.
- [0040] 도 3에 나타난 바와 같이, 수소를 이용한 열처리 전후 각 스펙트럼의 세기는 절반으로 감소한 것을 알 수 있다. 이는  $\text{MoS}_2$  표면이 수소와 반응하는 것을 의미한다. 도 4의 (a)는 질소를 이용한 원자선 형성 전후의 C 1s의 내각준위 스펙트럼을 나타낸 것이고, (b)는 Mo 3d의 내각준위(core level) 스펙트럼을 나타낸 것이며, (c)는 S 2p의 내각준위 스펙트럼을 나타낸 것이고, (d)는 가전자대 변화를 나타낸 것이다. 질소를 이용한 열처리 전후 각 스펙트럼의 세기는 3배로 증가한 것을 알 수 있다. 이는  $\text{MoS}_2$  표면이 질소와 반응하지 않고 표면에서 탄소와 같은 불순물이 제거되어 더 청정해짐을 의미한다.
- [0041] 또한, 도 5의 (a)와 (b)는 질소 분위기에서의 열처리(200 °C) 전후의  $\text{MoS}_2$  표면에서 임의의 두 지점에서 Mo 3p의 내각준위 스펙트럼을 나타낸 것이다. 도 5에 나타난 바와 같이, 400 eV의 결합에너지를 가지는 질소 성분이 관찰되지 않았는데 이는 질소가  $\text{MoS}_2$  표면과 반응하지 않은 것을 나타낸다. 반면에 탄소 성분은 질소를 이용한 열처리 후 발견되지 않았는데 질소 분위기에서의 열처리는  $\text{MoS}_2$  표면의 불순물 제거 효과가 있음을 알 수 있다. 수소를 이용한 열처리 후 스펙트럼 세기가 감소한 것은 수소가  $\text{MoS}_2$ 의 표면과 반응한 것으로 판단된다.
- [0042] 실험예 4: 원자선 형성 메커니즘 규명
- [0043] 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체에서 원자선 형성 메커니즘을 규명하고, 그 결과를 도 6에 나타내었다.
- [0044] 도 6의 (a)는 수소를 고진공으로 채운 후 열처리한  $\text{MoS}_2$ 의 TEM 사진으로, 도 2와 비교하여 완전한 원자선 형성 이전의 중간 상태를 나타낸다. 2H 적층 순서, 즉 단일층의(1L- $\text{MoS}_2$ ) Mo 또는 2S 열(도 6의 (d) 참고)과 두 층의(2L- $\text{MoS}_2$ ) Mo+2S 또는 2S+Mo 열(도 6의 (e) 참고)은 서로 동일한 강도를 가지며, 라인 분석(도 6의 (c)에서 L1 및 L2)은 2L- $\text{MoS}_2$ 의 상부 층에 대한 Mo 원자와 결합된 상부 또는 하부 S 원자를 정의한다. L2 라인 분석은 L1에 나타난 바와 같이 교대하는 열로부터 하나의 S 원자가 배열 밖에 있지만 동일한 강도를 보이므로, 수소가 Mo 원자 대신 S 원자와 서로 결합된 것을 나타낸다. 이러한 Mo원자와 S 원자의 결합으로 형성된 원자선은  $\text{MoS}_2$ 의 모서리에 관찰되는 전도성 와이어(conducting wire)와 유사한 것으로 나타났다. 또한, L1와 L2의 라인 분석에서  $\text{MoS}_2$ 의 한층 또는 두층의 2H 배열(1L는 2S 또는 Mo, 2L은 2S+Mo 또는 Mo+2S)과는 어긋나 있는 것을 알 수 있다. 따라서, 어긋난 황 원자들(녹색과 노란색)이 몰리브덴 원자(빨간색)들과 대각선으로 원자선을 형성한 것으로 판단된다. 어긋난 황 원자들의 간격은 0.9Å이었으며, 이는 도 6의 (e)에서 구한 계산에서의 간격 0.8Å과 유사하였다.
- [0045] 도 6의 (b)는 질소로 열처리한  $\text{MoS}_2$ 의 TEM 사진으로, 전술한 바와 같은 어긋난 황 원자들의 모형은 질소로 열처리한  $\text{MoS}_2$ 에서도 나타나지만, 원자선은 형성되지 않았다. 그리고 L3의 라인분석에서 적층되는 층 사이에 큰 차이가 있음을 나타내고, 이는 수소는 S 원자와 결합하는 것을 뒷받침하면서 L2의 라인분석과는 차이가 있음을 나타낸다. 한편으로, 육각형의 패턴이 하부 오른쪽에서 관찰되었다. 그러나, 첫번째 피크와 비교하면 두번째 피크의 왼쪽에는 피크가 없다. 이는 L3 라인분석에서 2H 배열의 적층에서 이웃하는 층의 세기가 확연히 차이 나는 것을 알 수 있다.
- [0046] 전술한 바와 같이, 질소 열처리는 불순물을 제거하는 효과가 있어 Mo와 S 원자 배열 사이의 큰 세기가 차이를 보인다. 반면에 수소 열처리된  $\text{MoS}_2$ 의 라인분석에서 알 수 있듯이, 큰 차이를 보이지 않은 것으로 보아 수소가 황 원자들과 반응하였음을 나타낸다.

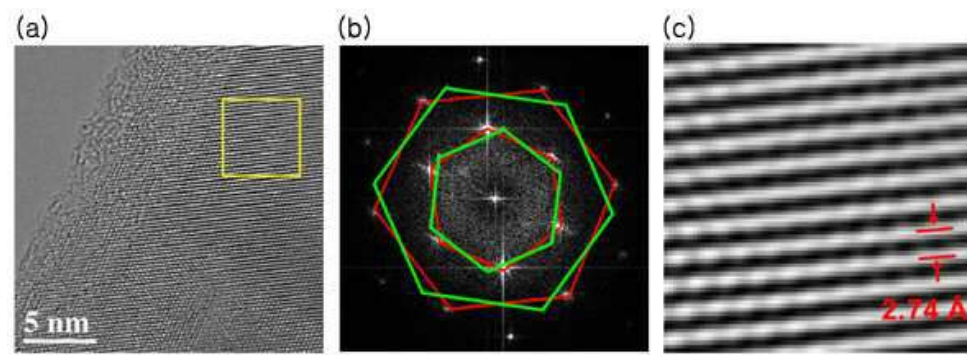
- [0047] 도 6의 (d)와 (e)는 전술한 실험결과를 토대로 밀도함수이론(Density functional theory)을 적용하여 제일원리(First-principles) 계산결과를 나타낸 것이다. 도 6의 (d)는 한 층의 MoS<sub>2</sub>에 양쪽 황 원자들에 수소 원자들이 결합한 경우이고, (e)는 두 층의 MoS<sub>2</sub>에 상부 층의 양쪽 황 원자들에 수소 원자들이 결합한 경우이다. 한 층의 MoS<sub>2</sub>와 비교하면 수소 결합에 의해 두 층의 MoS<sub>2</sub>의 경우 아래 수소(S2-H2)의 결합 각이 층과 수직하게 향하게 되는 차이가 있다. 이런 차이에 의해서 상부 층의 양쪽 황 원자들은 어긋나게 되고 대각선으로 원자선을 형성되는 것으로 판단된다.
- [0048] 실험예 5: 띠 구조, 상태밀도 및 가전자대 스펙트럼 분석
- [0049] 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체의 띠 구조, 상태밀도 및 가전자대 스펙트럼을 분석하고, 그 결과를 도 7에 나타내었다.
- [0050] 도 7의 (a)는 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체에서 수소가 결합된 1L-MoS<sub>2</sub>를 나타내고, (b)는 수소가 결합된 2L-MoS<sub>2</sub>를 나타낸다. 도 7의 (a)와 (b)에 나타난 바와 같이, 띠 구조로부터 수소 결합에 의해 새로운 띠가 페르미(Fermi) 에너지 준위 근처에 형성된 것을 알 수 있다. 2L-MoS<sub>2</sub>의 경우 더욱 강한 혼성 밴드가 페르미 준위 아래로 많이 차지하고 있어 금속성을 갖게 되는 것을 나타낸다.
- [0051] 도 7의 (c)는 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체의 상태밀도를 나타낸 것으로, 두 층의 경우 수소가 결합하지 않은 아래층의 경우 반도체 갭을 나타내지만, 수소가 결합한 위층에 의해 반도체 밴드갭이 없어져 금속성이 되는 것을 나타내고 있다.
- [0052] 도 7의 (d)는 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체의 표면을 각분해광전자 분광법 (ARPES)으로 분석한 결과이고, (i)는 MoS<sub>2</sub>를 초고진공( $3 \times 10^{-9}$  Torr)에서 절개한 후의 가전자대)이고, (ii)는 수소가스를 1시간 동안 노출시킨 후의 가전자대)이며, (iii)는 300 °C에서 1시간 동안 열처리한 후의 가전자대이다.
- [0053] 도 7의 (e)는 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체의 각분해광전자 분광으로 얻어진 가전자대 들을 적분한 결과로, (i)에서 가전자대 최고점은 0.5 eV이고, 수소가스에 노출 후 0.6 eV였으며, 열처리 후 0.3 eV로 나타나 페르미 준위에 근접한 것을 알 수 있다. 이러한 경향은 수소 결합에 의해 원자선 형성으로 밴드갭이 없어지는 금속성과 유사함을 알 수 있다.
- [0054] 따라서, 적어도 두개의 층 이상의 MoS<sub>2</sub> 표면에 수소 원자선이 형성된 것을 알 수 있고, 수소 원자선으로 인해 반도체 특성의 MoS<sub>2</sub>가 도체 특성을 나타낸다.
- [0055] 지금까지 본 발명에 따른 원자선이 형성된 단결정 복합체 및 단결정 복합체의 금속화방법에 관한 구체적인 실시예에 관하여 설명하였으나, 본 발명의 범위에서 벗어나지 않는 한도 내에서는 여러 가지 실시 변형이 가능함은 자명하다.
- [0056] 그러므로 본 발명의 범위에는 설명된 실시예에 국한되어 전해져서는 안 되며, 후술하는 특허청구범위뿐만 아니라 이 특허청구범위와 균등한 것들에 의해 정해져야 한다.
- [0057] 즉, 전술된 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며, 한정적인 것이 아닌 것으로 이해되어야 하며, 본 발명의 범위는 상세한 설명보다는 후술될 특허청구범위에 의하여 나타내어지며, 그 특허청구범위의 의미 및 범위 그리고 그 등가 개념으로부터 도출되는 모든 변경 또는 변형된 형태가 본 발명의 범위에 포함되는 것으로 해석되어야 한다.

도면

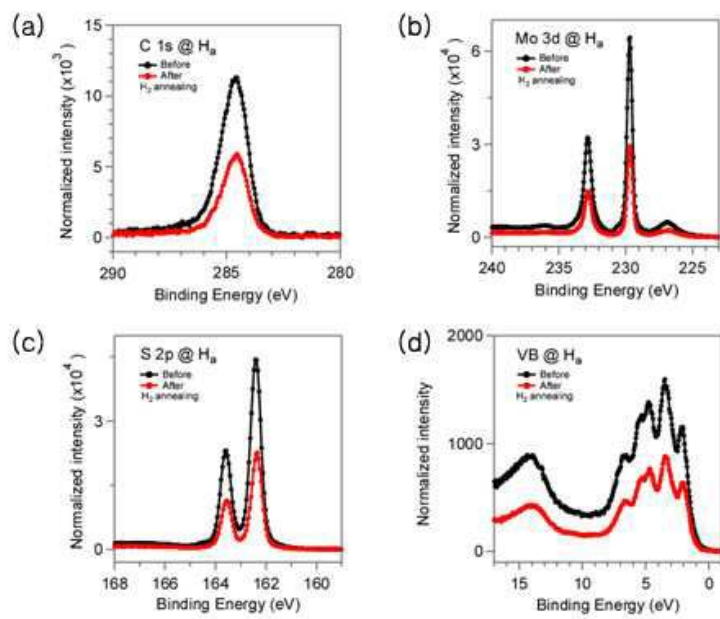
도면1



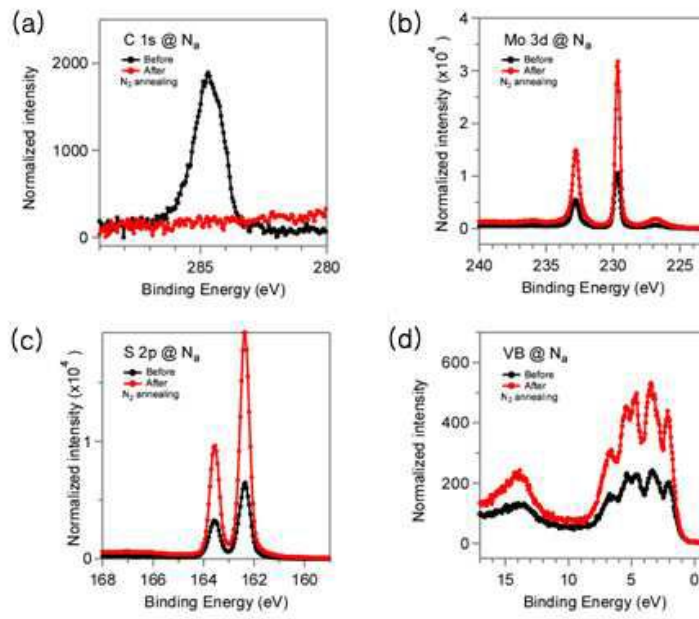
도면2



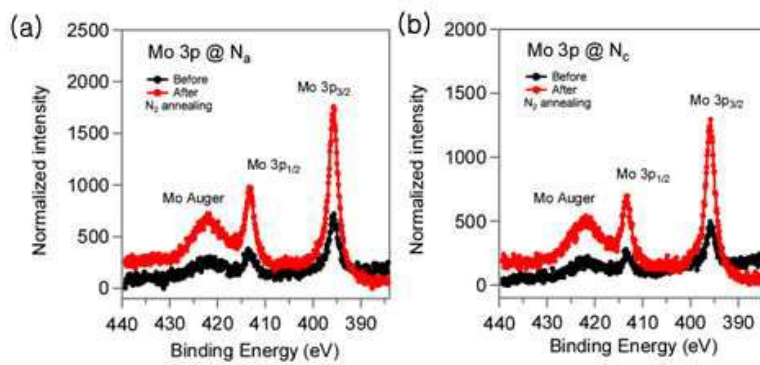
도면3



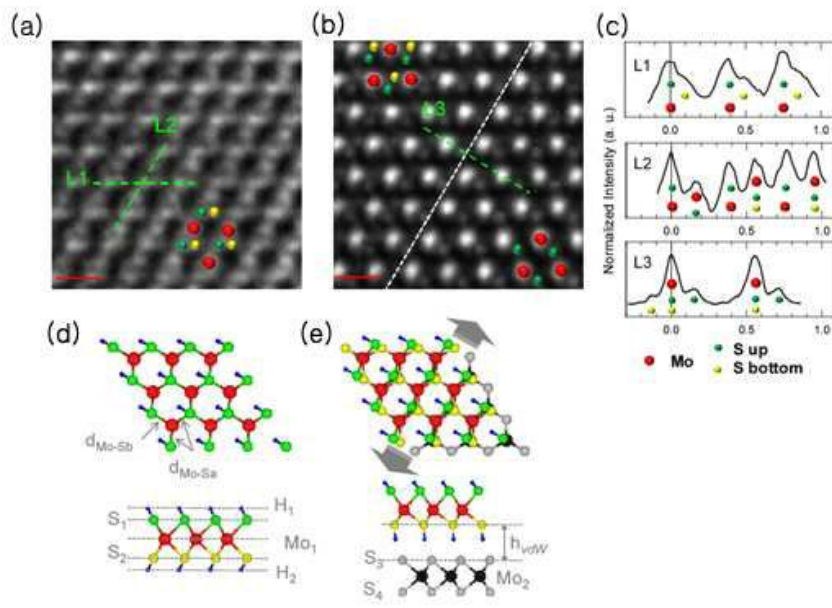
도면4



도면5



도면6



도면7

