

밴드이론을 통한 반도체표면의 원자 및 전자구조 연구

강명호, 조준형, 정석민

포항공과대학 물리학과

지난 십여년간 슈도포텐셜 이론과 국소밀도근사식에 기초한 밴드에너지 계산 방법을 통해 표면계의 원자 및 전자구조연구가 활발히 수행되어 왔다. 평형원자배열을 이론적으로 규명하기 위해서는 주어진 시스템에서 각 구성원자들이 받는 힘을 계산할 수 있어야 하는데, 이 힘계산의 출발점이 바로 밴드계산이 된다. 밴드이론을 표면계에 적용하기 위해 주기적인 박막의 supercell 을 통해 표면구조를 3차원계로 모사하고 planewave basis 를 사용하여 valence 전자들의 파동함수를 전개한다. 전자의 밴드에너지와 파동함수로부터 원자가 받는 힘을 계산해 힘의 방향대로 원자위치를 변위시켜 평형에 이르게 하며 이 과정에서 평형구조에서의 전자구조는 부수적으로 얻어진다.

본 논문에서는 최근에 효율화 시킨 슈도포텐셜-국소밀도근사 전자구조계산방법을 소개하고, 이를 적용하여 연구한 반도체 표면, 계면, 단원자층의 원자 및 전자구조 결과를 실험사실들과 연관시켜 논의하고자 한다.

먼저 Si(100)-(2x1) 표면연구에서는 asymmetric-dimer 재구성 모델을 통해 최적화된 표면 Si 원자쌍의 평형구조를 보고하고, 전자밀도분포로부터 계산된 표면에서의 핵심전자의 속박에너지 변화를 XPS 실험데이터와 비교하겠다. 다음에, Si(100) 표면 위에 알칼리금속인 Na 이 단원자층으로 흡착된 상태의 원자구조를 규명하겠고, 마지막으로, micro tubule 과 관련지어 관심이 증대되고 있는 단원자층 graphite 에 대해 본 계산을 통해 예측된 새로운 원자구조 및 전기적 성질을 소개하고 이로부터 최근에 금속표면에 형성된 단원자층 graphite 에서 관측된 흥미있는 STM image를 설명하겠다.