[III~16] [초청]

수소가 흡착된 텅스텐(110) 표면의 이론적 연구

곽국휘

현대전자산업(주) 메모리연구소 소자특성분석실

텅스텐(110) 표면에 흡착된 수소는 표면의 재구성(reconstruction)을 유도하고, surface phonon spectrum에 특이한 현상이 나타나게 하는 등 텅스텐 표면의 구조 및 전자적 특성을 크게 변화시킨다. 본 논문에서는 수도포텐셜 토탈에너지 계산방법을 이용하여 순수한 텅스텐(110) 표면과 수소가 흡착된 텅스텐(110) 표면의 구조와 전자적 특성을 연구하였다. 먼저 텅스텐(110) 표면의 여러 위치에 수소가 흡착될 때의 에너지를 비교함으로써 가장 안정된 수소 흡착위치를 결정하였으며, 수소가 흡착된 경우 텅스텐의 표면 층이 <1$\bar{1}$0> 방향으로 이동하여 표면이 재구성되는 것이 에너지 측면에서 유리함을 볼 수 있었다. 또한 본 연구결과는 surface-phonon anomaly가 phonon과 전자, 홀 사이의 강력한 상호작용에 의한 것임을 시사하며, 이러한 강력한 상호작용의 결과로 텅스텐 표면 위의 수소원자들이 본 위치로부터 벗어나게 되어(Peierls distortion) 전하밀도파를 형성할 가능성에 대해 논의하겠다.