【SS-05】

반도체 표면에서의 이론적 분자흡착 메커니즘 연구

최철호
경북대학교 화학과

전통적인 유기 화학적 지식과 반도체 공정에서 축적된 기술을 바탕으로 실리콘 반도체의 표면에 유기분자들의 기능을 접합시키기 위해 많은 연구가 수행되고 있다. 이러한 유기 기능성을 기존의 반도체 기술에 접목하여 궁극적으로 분자크기의 소자들을 만들기 위해서는 표면과 흡착 물들의 구조에 대한 명확한 이해가 필요하다. 그리고 표면반응들의 조절을 통한 표면 구조물의 정밀한 조작을 위해서는 그들의 반응 메커니즘의 명확한 규명이 또한 절실히 요구된다.

본 연구원들은 지난 수년 동안 표면 화학반응의 연구에 적합한 새로운 양자 역학적 방법들의 개발과 응용을 시도하였다. 본 발표에서는 지금까지의 연구결과를 바탕으로1,3-cyclohexadiene, acrylonitrile등과 같은 conjugated 된 분자들의 흡착 메커니즘과 conjugated 되어있지 않는 질소화합물들의 흡착 메커니즘들을 중심으로 그들의 특성을 발표한다. 또한 산소 원자에 의한 표면 산화반응 메커니즘의 특징을 살펴보고 상대성 효과인 spin-orbit coupling의 중요성에 대해서도 논한다.