

실리콘(001) 표면에 암모니아 분자의 자체 집단화 흡착에 관한 제일원리 연구

김용성, 김한철

한국표준과학연구원

실리콘(001) 표면에 암모니아 분자의 자체 집단화 흡착 과정을 제일원리 슈도포텐셜 계산 방법을 사용하여 조사하였다. 암모니아 분자는 먼저 분자 상태로 흡착하여 표면에서 Si-NH_3 구조를 형성한다. 이후 NH_3 는 NH_2 와 H 로 분리되어 같은 다이머(dimer)의 두 실리콘 원자와 결합하거나 [On-dimer (OD) 구조], 혹은 같은 다이머 열(dimer row)의 인접한 다이머의 두 실리콘 원자와 결합하여 [Inter-dimer (ID) 구조] 최종 분해 흡착 상태를 형성한다.⁽¹⁾ 암모니아 분자의 자체 집단화 현상을 이해하기 위하여 OD나 ID 구조로 이미 흡착되어 있는 한 개의 암모니아를 가정하고, 그 구조 주위에 다른 암모니아 분자가 느끼는 포텐셜 에너지 표면을 계산하였다. 그 결과, 접근하는 암모니아 분자는 이미 흡착되어 있는 OD나 ID 구조의 분자로부터 매우 강한 인력을 받는다는 사실을 발견할 수 있었다. 그 인력은 수소 결합 상호작용에 기인한 것으로, 이와 같이 끌어당겨진 암모니아 분자는 결국 수소 결합을 형성하면서 OD 혹은 ID 구조의 흡착물과 물리적 흡착 상태를 형성한다. 물리적 흡착 상태에서 분자 흡착 상태, 그리고 최종 분해 흡착 상태로 전이되는 과정을 다이머 방법⁽²⁾을 사용하여 계산하였다. 물리적 흡착 상태의 암모니아 분자는 인접한 표면 실리콘 “down” 원자에 의해 인력을 받아 분자 흡착 상태를 형성한다. 분자 흡착된 암모니아는 NH_2 와 H 로 분리 되면서 이미 흡착된 OD 혹은 ID 구조 옆에 최종 분해 흡착 구조인 또 다른 OD 혹은 ID 구조를 형성하게 된다. 에너지 장벽 분석을 통해, OD 주위에는 같은 다이머 열의 OD-OD 지그재그 흡착 구조와 OD-ID 흡착 구조의 형성 가능성이 높으며, ID 주위에는 같은 다이머 열의 ID-ID 일열 흡착 구조의 형성 가능성이 높은 것으로 확인되었다. 이는 최근의 STM 실험과 일치하는 결과로 기존의 흡착 에너지에 기반한 이론으로 설명되지 않았던 부분이다.^(3,4)

본 연구는 한국과학기술정보연구원의 [슈퍼컴퓨팅 응용연구 전략지원 프로그램]을 통해 수행되었음. 컴퓨팅 자원을 제공해 준 슈퍼컴퓨팅센터에 감사함.

[참고문헌]

1. Opti Naguan Chung, Hanchul Kim, Sukmin Chung, and Ja-Yong Koo, Phys. Rev. B **73**, 033303 (2006).
2. G. Henkelman and H. Jonsson, J. Chem. Phys. **111**, 7010 (1999).
3. K. T. Queeney, Y. J. Chabal, and K. Raghavachari, Phys. Rev. Lett. **86**, 1046 (2001)
4. J. H. G. Owen, D. R. Bowler, S. Kusano, and K. Miki, Phys. Rev. B **68**, 113304 (2005).