

Si(111)In-4×1의 표면 나노구조의 포논 및 격자불안정성에 대한 제일 원리 계산 연구

장윤희¹, 이근섭², 김한철³

¹한국표준과학연구원, ²인하대학교 물리학과, ³숙명여자대학교 물리학과

Si(111) 표면에 자발 형성되는 In 사슬은 준 일차원 구조를 가지면서도 금속성을 유지하고, 온도에 따른 구조 상전이를 나타내는 흥미로운 물질이다 [1]. 상온에서는 금속성의 (4×1) 구조를 가지다가 100 K 정도의 낮은 온도에서는 절연체인 (4×2) 구조로 바뀌게 된다. 이 상전이의 원인은 전하 밀도파 (Charge Density Wave)라고 제안되었지만, 아직 논쟁 중에 있다. 그리고 저온에서의 원자 구조 역시, 다양한 모델들이 제안되었음에도 불구하고 [2, 3], 아직 정확히 알려지지 않은 상태이다.

이 연구에서는, 보다 체계적인 원자 구조의 탐구를 위해 In/Si(111) 계의 phonon band를 계산하였고, 그로부터 unstable phonon mode들의 존재를 확인하였다. Unstable phonon mode의 변위 방향으로 원자구조를 이완시킨 결과 기존에 제안되었던 저온구조들과는 다른 X2 구조를 발견하였고, 이 구조는 point defect 주변에서 관찰되는 4×2 구조와 동일함을 확인하였다 [4]. 이 결과로 point defect에 의해 만들어지는 X2 구조 변화는 unstable phonon에 의한 격자 불안정성이 그 원인임을 알 수 있었다. 또한, 이 새로운 4×2구조에 대한 전자구조와 scanning tunneling microscopy (STM) image를 상세히 분석하였다.

참고문헌

- [1] H. W. Yeom, et al., Phys. Rev. Lett. 82, 4898 (1999).
- [2] J. H. Cho, et al., Phys. Rev. B 64, 235302 (2001).
- [3] C. Gonzalez, et al., Phys. Rev. Lett. 96, 136101 (2006); A. A. Stekolnikov, et al. *ibid.* 98, (2007).
- [4] G. Lee, S. Y. Yu, H. Kim, and J. Y. Koo, Phys. Rev. B 70, 121304 (2004).