

Bonding length change of N₂ molecule in Ge(100) by using the first-principle calculation

윤원석¹, 정민철¹, 홍순철¹, 이영미², 박용섭², 장승훈³, 정기영³,
한문섭³, 황한나⁴, 황찬국⁴, 김미영⁵

¹울산대학교 물리학과, ²경희대학교 물리학과, ³서울시립대학교 물리학과,
⁴포항가속기연구소 빔라인부, ⁵서울대학교 재료공학부

4족 기반 비휘발성 메모리 소자 개발에 있어 나노결정립 Ge은 매우 유용한 특성을 가지고 있어 최근 집중적으로 연구되고 있다. 그러나 제작 방법에 있어 아직까지 정형화 되어 있는 연구가 부족하고 그 특성이 불순물 및 기타 다른 요소들에 의하여 크게 좌우되는 문제점을 가지고 있다. 본 연구에서는 초고진공상에서 이온화가스방법을 이용하여 순수한 Ge(100)에 N₂ 이온 가스를 주입하고 약 600 °C에서 1 분간 후열처리를 하면 표면에 반구형의 Ge 질화물을 보호막으로 하는 나노결정립 Ge이 형성되는 실험 결과에 주목하였다. 일반적으로 알려진 결과에서 N₂→N+N의 해리는 약 1200 °C에서 일어나는 데, Ge(100) 내부에 존재하는 N₂ 분자는 실험에서 약 600 °C 이하에서 해리되는 현상을 보이고 있다. 결국 이러한 현상은 초고진공상에서의 N₂ 분자와 Ge(100) 물질 내의 N₂ 분자의 전자구조가 확연히 달라지는 이유에 기인되는 것으로 파악할 수 있다. 이에 본 연구에서는 제일원리계산법을 통해 초고진공상에 존재하는 N₂ 분자의 결합길 이와 Ge(100) 내에 존재하는 N₂ 분자의 결합길이를 계산하여 도출하고 이에 따른 전체에너지 차이를 계산하였다. 이를 통해 Ge(100)로 들어간 N₂ 분자의 경우, 주변의 Ge 원자들에 영향을 받아 결합길이가 짧아지면서 전체에너지의 값 또한 약 2 eV 정도의 큰 차이를 보임을 확인하였다. 이는 N₂ 분자 해리의 온도가 줄어드는 것을 자연스럽게 설명한다고 사료된다. 이에 본 발표에서는 이러한 연구결과를 자세히 살펴볼 계획이다.