

First-Principles Study of the Adsorption of Organic Molecules on Si(001) and Ge(001)

조준형

한양대학교

Si(001) 표면과 Ge(001) 표면에 여러 가지 종류의 유기분자가 흡착될 때의 반응 경로와 흡착 구조 모델에 대한 제일원리 전자구조 계산 결과를 소개한다. 본 연구에서는 반도체 표면에 다양한 유기분자 흡착 시스템에 대한 국내의 여러 STM 실험 그룹 (김세훈, 구자용, 여인환, 강현, 한재량, 김정원 그룹장)에서 얻은 실험 결과를 소개하고 제일원리계산 결과를 통하여 각 흡착 시스템의 반응 메카니즘과 흡착구조모델을 제시한다. 또한 아직 해결되고 있지 않은 문제점들에 대해서도 논의한다.