

O 원자 흡착에 대한 Si(111)In-4×1 표면의 제일원리 계산 연구

김치호^{1,2}, 이근섭³, 김한철¹

¹숙명여자대학교 물리학과, ²한양대학교 디스플레이공학연구소, ³한국표준과학연구원

준 일차원 구조의 In 사슬이 형성된 Si(111) 표면에 O, H, Pb 등의 원자 흡착으로 유도된 점 결함에 관한 실험 및 이론 연구가 최근 활발히 이루어지고 있다[1,2]. 특히 O 원자 흡착의 경우 제일원리 potential energy surface (PES) 계산을 통하여 In 사슬 위의 3-fold 자리가 가장 안정적인 흡착 위치로 제안되었으나[1], 이 자리에 대한 scanning tunnelling microscopy (STM) simulation 결과는 실험을 통하여 밝혀진 STM image와 불일치하였다.

이 연구에서는 보다 체계적으로 흡착 기구를 탐구하기 위하여 표면 뿐 아니라, 표면 내부 첫 번째 Si 원자 층과 표면 In 원자 층의 사이까지 조사 범위를 확장하여 Si(111)In-4×1의 O 원자 흡착에 대한 PES를 (4×5) supercell 을 이용하여 계산하였다. 그로부터 기존에 제시되었던 In 사슬 위의 3-fold 자리가 아닌 표면의 3-fold coordinated In 밑에 가장 안정적인 흡착 자리가 존재하는 것을 확인하였다. 이 때 In₃-O-Si 구조의 결합이 안정적으로 형성되는 것을 밝혔다. O 원자와 Si 원자 사이의 결합 거리는 1.68 Å이고, 세 개의 In 원자 중 두 개의 결합 거리는 2.62 Å, 나머지 한 개의 결합 거리는 2.31 Å이다. O 원자 주변에서 In 원자들의 뚜렷한 위치 이동이 발견된 반면, 결합에 참여하는 Si 원자의 위치 이동은 작았다. 이 새로운 구조에 대한 STM image simulation은 높은 빈도로 발견되는 실험 image의 registry와 잘 일치한다.

참고문헌

- [1] S. Wippermann, N. Koch, and W.G. Schmidt, Phys. Rev. Lett. **100**, 106802 (2008).
 [2] G. Lee, S.-Y. Yu, H. Kim, and J.-Y. Koo, Phys. Rev. B **70**, 121304(R) (2004).