

실리콘(001) 표면에 NH₃, H₂O 분자의 흡착 동역학

김용성¹, 구자용¹, 김한철²

¹한국표준과학연구원, ²숙명여자대학교 물리학과

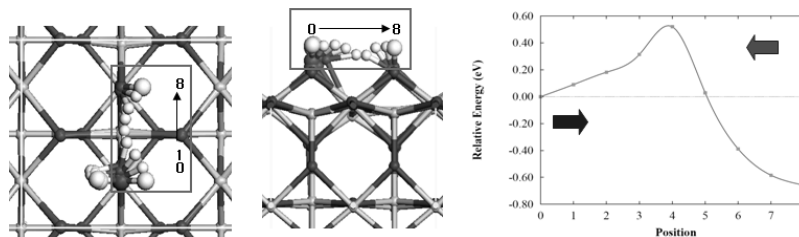
NH₃, H₂O 분자는 실리콘 반도체의 산화 및 질화 공정에 흔히 사용된다. 원자수준으로 제어된 미세 실리콘 소자의 제작을 위해서는 이들 분자의 표면흡착과 산·질화 과정에 대한 미시적 관점의 이해가 필요하다. 본 연구에서는 Si(001) 표면에 NH₃, H₂O 분자의 흡착과정을 제일원리 계산방법을 사용하여 조사하였다. NH₃ 분자는 Si(001) 표면에서 스스로 집단화를 이루며 흡착한다. 흡착 전 분자가 느끼는 포텐셜 에너지를 계산 분석한 결과, 이미 흡착된 NH₃ 분자와 강한 수소결합 상호작용으로 NH₃ 분자들이 서로 모이고, 표면 근처에서는 dative-bond 상호작용으로 down-buckled Si 원자에 흡착함을 알 수 있었다.¹ H₂O 분자는 Si(001) 표면에서 down-buckled Si 원자에 분자흡착하고 이후 OD 혹은 ID 구조로 분해흡착한다.² 이 과정은 NH₃ 분자의 흡착과정과 비슷하지만 실험적으로 NH₃ 분자는 상온에서 OD 구조를 선호하지만 H₂O 분자는 ID 구조를 선호한다.^{2,3} 본 연구에서 분해 흡착 동역학을 분석하여 dimer buckling 운동과 분해흡착 과정의 상호작용 메커니즘을 제시한다.

- [1] Yong-Sung Kim, Ja-Yong Koo, and Hanchul Kim, Phys. Rev. Lett. 100, 256105 (2008).
 [2] Sang-Yong Yu, Hanchul Kim, and Ja-Yong Koo, Phys. Rev. Lett. 100, 036107 (2008).
 [3] O. N. Chung, Hanchul Kim, Sukmin Chung, and Ja-Yong Koo, Phys. Rev. B 73, 033303 (2006).

Theoretical investigations on the dissociation of water on the TiO₂ surfaces

공기정, 장현주, 백진욱, 문상진

한국화학연구원



A stable and efficient material that uses sunlight to split water into hydrogen and oxygen would be an immense blessing. Water and sunlight are both renewable and cheap resources of energy. Materials have been currently sought for use in the photo-induced decomposition of water on crystalline electrodes. In particular, since 1971, when Fujishima and Honda reported their work on a photoelectrochemical cell possessing an anode of TiO₂, [1] titanium dioxide has continuously used to hold a dominant position in photocatalysis. By performing a series of first-principles electronic structure calculations, we have investigated the materials properties of TiO₂ in the most abundant forms, i.e., Rutile and Anatase phases. The experimentally determined band gaps are 3.0 and 3.2 eV for Rutile and Anatase phases, respectively. In spite of higher band gap, only the Anatase phase shows photocatalytic decomposition of water[2]. Comparing the adsorption energies and dissociation barriers of water molecules on the stable surfaces of each phase, we have tried to explain the photocatalytic activities. The feature of electronic structures will be also discussed relating to photocatalysis.

- [1] A. Fujishima and K. Honda, Nature 238, 37 (1972)
 [2] U. Diebold, Surf. Sci. Rep. 48, 53 (2003)