

SF-001

## Ca/Si(111)-2x1에서 에피성장을 통한 Si단결정 성장가능성에 관한 Si원자의 흡착과 확산에 대한 전산모사연구

여강모, 정석민

전북대학교 물리학과

Si은 값싸고 넓은 시설풀반을 갖추고 있어, 발전산업에서 태양광소자의 주원료로 널리 사용된다. 하지만 Si은 간접 띠뵤을 Si의 특성을 개선하기 위해 최근 Si에 특정한 결함을 넣어 직접 띠뵤으로 바뀌 광 효율을 높으려는 시도가 있다. 2015년 초 Si단결정[111]으로 Seiwatz-chain 형태의 결함이 있다면 결함이 있는 Si(111)에 직접 띠뵤이 생길 것 이라고 이론적으로 예상했다. 이러한 구조의 제작방법으로 Ca/Si(111)과 Si(111)을 접합 후 가열하여 Ca을 빼내는 방법을 제시했다[1]. 본 연구에서는 이 제작방법 외 에 Ca/Si(111)-2x1 표면에서[2] 에피성장으로 결함이 유지된 Si단결정 형성가능성을 제일원리 계산을 통해 연구했다. 제일원리 계산방법으로는 VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)를 이용하였다. Si원자 한 개, 두 개, 세 개가 흡착될 경우 원자당 흡착에너지는 각각 3.73 eV, 3.73 eV, 3.91 eV 였다. 따라서 Si원자는 무리형태로 흡착될 것으로 예상되어 결함을 유지하며 단결정으로 성장하기는 어려울 것으로 보인다.

[1] Y. J. Oh et al., arXiv:1504.04134 (2015)

[2] S. Jeong et al., Phys. Rev. B 72, 193309 (2005)

**Keywords:** 표면, Ca/Si(111)-2x1, direct band gap

SF-002

## Ge(110) 표면에서 탄소 원자 확산에 대한 수소의 효과

박가람, 정석민

전북대학교

연구된 Si위의 흡착원자들의 확산 메커니즘들에 비해 Ge 표면에서의 확산 메커니즘은 잘 알려져 있지 않다. 최근 연구에 따르면, 수소가 덮인 Ge(110) 표면에서 그래핀 결정 핵생성은 비등방적이며, 낱알 둘레 없이 웨이퍼 크기로 성장시킬 수 있음을 보였다. 본 연구에서는 VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)의NEB(Nudged Elastic Band) 방법을 이용하여 수소가 덮인 Ge(110) 표면과 청결한 표면에서 탄소 원자의 확산 과정과 확산에 따른 에너지 장벽을 계산 하였다. 계산 결과 수소가 덮인 표면에서의 탄소원자 확산은 체인 방향으로 각각 3.29 eV, 2.67 eV의 에너지 장벽을 가지고 청결한 표면에서는 탄소원자가 게르마늄 연결을 치환하며 확산한다. 이때 에너지 장벽은 0.82 eV이고 치환된 게르마늄이 확산할 때는 각각 0.64 eV, 0.59 eV의 에너지 장벽을 넘어야 한다. 결과적으로 수소가 덮인 표면에서보다 청결한 표면에서 탄소 확산 에너지 장벽이 낮으며, 청결한 표면에서는 탄소가 게르마늄을 치환하고 치환된 게르마늄이 확산할 확률이 높음을 알 수 있었다.

**Keywords:** DFT, germanium, diffusion