

DV- $X\alpha$  법을 이용한 Nanocrystalline Silicon 의 Band Gap 계산  
Band Gap Calculation in Nanocrystalline Silicon  
using DV- $X\alpha$  Cluster Method

강 영 석<sup>1</sup>, Hirohiko Adachi<sup>2</sup>, 박 순 자<sup>1</sup>

<sup>1</sup>서울대학교 공과대학 재료공학부

<sup>2</sup>Dept. of Materials Science & Engineering, Kyoto Univ., Japan

결정질의 silicon 은 반도체 소자의 제조에 있어서 가장 중요한 물질이다. 특히, 최근에는 다공질의 silicon 층에서 나타나는 가시광선 영역에서의 photoluminescence (PL) 현상이 주목받고 있다. 보통의 crystalline silicon 은 band gap ( $E_g$ ) 이 1.1eV 이며 indirect transition 을 하기 때문에 상온에서는 PL 현상이 나타나지 않는다. 그러나, nanometer 크기의 결정으로 이루어진 다공질의 silicon 에서는 상온에서도 PL 현상을 관찰할 수 있는데, 이의 원리에 대하여 많은 연구자들이 가설을 제시하고 있다. 그 중에서 quantum size 효과의 설명에 의하면, Bohr 반경(~5nm) 보다 작은 크기를 가진 silicon 은 결정립의 크기가 작아질 수록  $E_g$  의 크기는 커지게 되고, 흡수단이 blue 로 이동한다. 이러한 결정립의 크기에 따른 band gap 의 변화를 연구하기 위하여 simulation 에 의한  $E_g$  계산이 많이 행하여 졌으나, 이들은 대부분 silicon 의 표면을 수소(H) 로 처리한 모델을 사용한 것이다. 그러나, 이러한 계산결과들은 크기 변화에 따른  $E_g$  변화에 대한 정량적 해석은 가능하지만, 실험적으로 구한  $E_g$  와 많은 오차를 보이고 있으며,  $E_g$  의 크기는 silicon 입자의 크기 뿐 아니라, 표면이 처리에 의해서도 달라질 것으로 생각된다.

본 연구에서는 nanocrystalline silicon 의 표면을 H, O, OH 등으로 각각 처리한 모델을 사용하여  $E_g$  의 변화를 계산하였다. 계산에는 DV- $X\alpha$  cluster 법을 사용하였다. DV- $X\alpha$  법이란 Schrodinger 의 식을 수치적으로 계산하는데 있어서,  $X\alpha$  근사법을 사용하여 계산시간을 크게 단축시킨 계산방법이다. 최근에 이러한 계산법은 재료의 전자상태 해석 및 물성 예측, 광전자 스펙트럼, 재료표면의 분자흡착에서의 에너지 계산에 많이 이용되고 있다.

계산 결과, 수소로 표면처리한 silicon cluster 는 산소나 OH 로 표면처리한 것보다  $E_g$  가 더 컸으며, silicon cluster 의 표면이 SiO<sub>2</sub> 구조를 가지는 모델의 경우는 수소의 경우보다 더 큰  $E_g$  를 보임을 알 수 있었다. 이러한 계산결과는 nanocrystalline silicon cluster 의 표면을 적절히 처리함으로써  $E_g$  를 조절할 수도 있다는 가능성을 보여준다.