



***Ab initio* Approach on the Anisotropic Growth of GaAs: from DFT to Growth Kinetics**

In Won Yeu¹, Gyuseung Han^{1,2}, Cheol Seong Hwang², and Jung-Hae Choi^{1*}

¹Electronic Materials Research Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul 02792, Korea

²Department of Materials Science and Engineering, and Inter-University Semiconductor Research Center, Seoul National University, Seoul 08826, Korea

E-mail: choijh@kist.re.kr

나노스케일 III-V 재료 성장은 온도와 압력과 같은 기상 증착 방법의 외부 조건을 조절함으로써 특정 결정형상 혹은 나노와이어 성장을 자발적으로 유도하는 등 발전을 이루었다. 많은 표면을 노출하면서 일어나는 성장 양상은 결국 결정 표면과 기체 소스의 이방성 상호작용에 의해 결정되기 때문에, 성장 조건에 따라 변화하는 표면에너지와 표면구조가 나노스케일 성장에 있어 결정적인 요인이라고 할 수 있다. 그럼에도 불구하고 표면구조 변화에 대한 원자수준에서의 예측기술은 더디게 발전되었고 이는 외부 조건으로 성장을 미세하게 조절하려는 궁극적인 목표에 큰 걸림돌이 되어왔다. 이 논문에서는 밀도범함수론 (DFT) 기반의 제일원리 계산과 기상 증착 시스템의 열역학적 모델링을 조합하여 임의의 온도 압력 조건에서 안정한 표면구조를 예측하는 방법과, 이를 활용해 외부 조건에 따라 달라지는 성장 양상을 원자수준에서 모델링하는 방안을 제시한다. 모델링 기법의 타당성을 증명하기 위해 대표적인 III-V 화합물인 GaAs 에 적용하여 GaAs 나노와이어 성장과 관련된 두가지 독특한 현상을 원자수준에서 설명한다. 첫째, GaAs 가 특정 성장 조건에서 <111>B 방향으로만 선택적으로 나노와이어 형태로 성장하는 현상은 서로 다른 결합 형태의 결정 표면에 기체 소스가 이방성 흡착하는 것과 연관 지어 설명하였다. GaAs (111)B 표면에 대한 흡착이 나노와이어가 성장한다고 알려진 조건에서 다른 표면에 비해 압도적으로 우세함을 보였고, 이러한 표면방향 별 소스공급속도의 현저한 차이가 나노와이어 성장을 유발하는 것으로 밝혔다 [1]. 두번째로 GaAs 나노와이어가 극성 방향인 <111> 의 서로 반대 방향, <111>A 와 <111>B, 으로 성장할 때 나타나는 독특한 현상인 적층 결함의 비대칭 형성을 설명하였다. 표면 핵 형성 반응의 장벽 자유에너지를 계산하고 이로부터 적층 결함이 우연히 형성될 확률을 추정하여 (111)A 보다 (111)B 표면에서 그 확률이 현저히 큼을 밝혔다 [2]. 여기서 제시된 제일원리 기반 성장 모델링 방법은 다른 재료의 나노스케일 성장을 예측하고 조절하는데도 큰 도움이 될 것이다.

Acknowledgments This work was supported by the National Research Foundation of Korea (NRF) grant funded by MSIT (2020R1A2C2003931), and by the Institutional Research Program of Korea Institute of Science and Technology (KIST) [2E30100 and 2E30410].

References [1] In Won Yeu *et al.*, Appl. Surf. Sci. 497, 143740 (2019). [2] In Won Yeu *et al.*, Nanoscale 12, 17703 (2020).