

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국



(10) 국제공개번호
WO 2014/200231 A1

(43) 국제공개일
2014년 12월 18일 (18.12.2014)

- (51) 국제특허분류:
G01Q 30/04 (2010.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2014/005043
- (22) 국제출원일: 2014년 6월 10일 (10.06.2014)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2013-0066020 2013년 6월 10일 (10.06.2013) KR
10-2014-0055617 2014년 5월 9일 (09.05.2014) KR
- (71) 출원인: 한국과학기술원 (KOREA ADVANCED INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY) [KR/KR]; 305-701 대전시 유성구 대학로 291, Daejeon (KR).
- (72) 발명자: 김용현 (KIM, Yong Hyun); 305- 701 대전시 유성구 대학로 291 한국과학기술원, Daejeon (KR). 여호기 (LYEO, Ho Ki); 305- 340 대전시 유성구 가정로 267, Daejeon (KR). 이의섭 (LEE, Eui Sup); 305- 701 대전시 유성구 대학로 291 한국과학기술원, Daejeon (KR).
- (74) 대리인: 특허법인 무한 (MUHANN PATENT & LAW FIRM); 135-814 서울시 강남구 학동로 3길 9, 2층 (논현동, 명림빌딩), Seoul (KR).

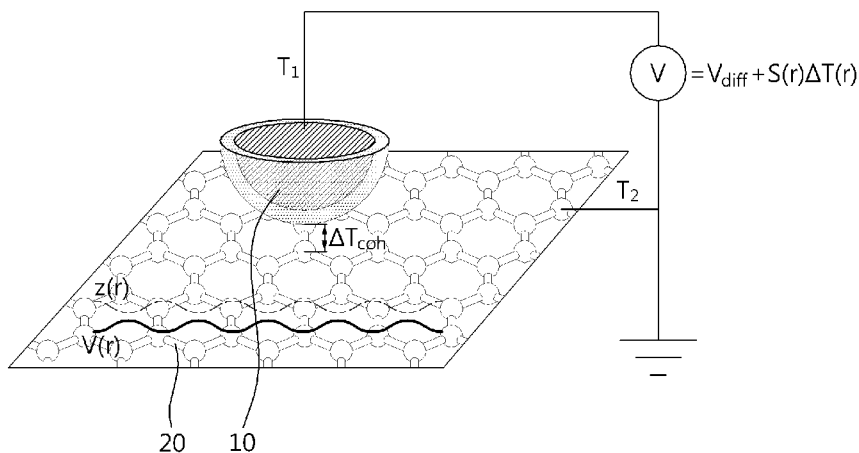
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(54) Title: METHOD FOR COMPUTER-AIDED SIMULATION OF ATOMIC-RESOLUTION SCANNING SEEBECK MICROSCOPE IMAGE

(54) 발명의 명칭 : 원자수준-해상도 주사 제벡 현미경 이미지의 컴퓨터 원용 시뮬레이션 방법



(57) Abstract: The method for the computer-aided simulation of an atomic-resolution scanning Seebeck microscope image, according to an embodiment, relates to a simulation method in which a computer calculates a local thermoelectric voltage $V(r)$ for the location r of a voltage probe so as to obtain a scanning Seebeck microscope image corresponding to the location r of the voltage probe.

(57) 요약서: 일 실시예에 따르면 원자수준-해상도(atomic-resolution) 주사 제벡 현미경 이미지(scanning seebeck microscope image)의 컴퓨터 원용 시뮬레이션 방법(computer-aided simulation method)으로서, 전압 탐침(voltage probe)의 위치 r 에 대응하는 상기 주사 제벡 현미경 이미지를 획득하기 위해, 상기 전압 탐침의 위치 r 에 대한 국지 열전 전압(local thermoelectric voltage; $V(r)$)을 컴퓨터가 계산하는 시뮬레이션 방법에 관한 것이다.

WO 2014/200231 A1

명세서

발명의 명칭: 원자수준-해상도 주사 제벡 현미경 이미지의 컴퓨터 원용 시뮬레이션 방법

기술분야

- [1] 일 실시예에 따르면 원자수준-해상도 주사 열전 현미경의 컴퓨터 원용 시뮬레이션 방법이 제공된다.

배경기술

- [2] 소재의 표면을 원자수준-해상도로 볼 수 있는 방법으로 미국특허 제4,343,993호에 개시되어 있는 주사 터널링 현미경(Scanning Tunneling Microscope) 기술이 있다. 주사 터널링 현미경은 소재와 탐침 사이에 외부 전압을 인가하여 국지적으로(localized) 발생하는 진공 터널링 전류에 기초하여 소재 표면의 원자수준-해상도 이미지를 표시하는 기술이다. 그런데 외부 전압을 인가해야 하기 때문에 전압에 의해 페르미 전자가 방해 받을 가능성이 있고 스캔할 수 있는 영역이 좁은 단점이 있다. 그리고 국지화된 전류를 발생시키기 위해 날카로운 탐침을 만들어야 하는데, 이 과정의 어려움 때문에 생산성(yield)도 높지 않은 단점이 존재한다.
- [3] 이러한 주사 터널링 현미경의 단점을 보완할 수 있는 대안으로 주사 열전 현미경(scanning thermoelectric microscope)이 고려될 수 있지만 일반적으로 열은 공간에서 국지화되기(localization)가 어려운 것으로 알려져 있어서 실제로 구현하기가 여의치 않다.
- [4] 최근에 주사 열전 현미경을 이용하여 원자수준-해상도로 소재의 표면을 볼 수 있는 기술이 2013년에 공개된 논문 S. Cho, S. D. Kang, W. Kim, E.-S. Lee, S.-J. Woo, K.-J. Kong, I. Kim, H.-D. Kim, T. Zhang, J. A. Stroscio, Y.-H. Kim, and H.-K. Lyeo, "Thermoelectric imaging of structural disorder in epitaxial graphene" arXiv: 1305.2845 (<http://arxiv.org/abs/1305.2845>), Nature Mater. **12**, 913에 개시되어 있다.
- [5] 실제 장치인 주사 열전 현미경을 이용하여 소재의 표면으로부터 원자수준-해상도 이미지를 획득하고, 획득된 이미지에 대응하는 원자 구조를 알아내기 위해 컴퓨터를 원용하여 특정 소재의 표면 형상을 시뮬레이션할 필요가 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

- [6] 일 실시예에 따르면, 원자수준-해상도 주사 제벡 현미경 이미지의 컴퓨터 원용 시뮬레이션 방법에 관한 것으로서, 실제 주사 열전 현미경에 의해 획득된 이미지에 대응하는 소재의 표면 형태를 시뮬레이션함으로써, 소재의 표면 형태를 알 수 있는 방법을 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [7] 일 실시예에 따르면 원자수준-해상도(atomic-resolution) 주사 제벡 현미경 이미지(scanning Seebeck microscope image)의 컴퓨터 원용 시물레이션 방법(computer-aided simulation method)으로서, 전압 탐침(voltage probe)의 위치 \mathbf{r} 에 대응하는 상기 주사 제벡 현미경 이미지를 획득하기 위해, 상기 전압 탐침의 위치 \mathbf{r} 에 대한 국지 열전 전압(local thermoelectric voltage; $V(\mathbf{r})$)을 하기 수학식에 의해 컴퓨터가 계산하는 시물레이션 방법에 관한 것이다.

[8]

$$V(\mathbf{r}) = V_{\text{diff}} + S_{\text{coh}}(\mathbf{r}) \int \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}'$$

- [9] 여기서, V_{diff} 는 팁(tip)과 샘플(sample)에서 확산 수송 영역(diffusive transport region)에서의 열전 전압 강하(thermoelectric voltage drop)이고, $S_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 는 위치-의존 제벡 계수(position-dependent Seebeck coefficient)이며, \mathbf{r} 은 점 형태의 탐침으로부터 측정된 거리이고, \mathbf{r}' 은 소재 내부 좌표이며, $\nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ 은 $1/r^2$ 의 팩터(factor)에 의해 반경 방향으로 가중된 온도 구배(temperature gradient)이고, $\int \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}'$ 은 온도 프로파일의 부피 적분일 수 있다.

- [10] 일 실시예에 따른 시물레이션 방법에 있어서, 상기 온도 프로파일의 부피 적분 $\int \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}'$ 은 하기 수학식에 의해 정의되는, 시물레이션 방법에 관한 것이다.

[11]

$$\int \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}' = \Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$$

- [12] 여기에서, $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 는 상기 팁과 상기 샘플 간의 계면(interface)에서의 유효 온도 강하(effective temperature drop)일 수 있다.

- [13] 일 실시예에 따른 시물레이션 방법에 있어서, 상기 위치-의존 제벡 계수 $S_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 는 하기 수학식에 의해 계산되는, 시물레이션 방법에 관한 것이다.

[14]

$$S_{\text{coh}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{eT} \frac{\int \tau^{el}(E, \mathbf{r})(E - E_F) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE}{\int \tau^{el}(E, \mathbf{r}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE}$$

- [15] 여기에서, e 는 전자 전하량이고, T 는 절대 온도이며, τ^{el} 은 전자 투과 확률(electron transmission probability)이고, E_F 는 페르미 에너지이며, f 는 온도 T 에서 페르미-디랙 분포 함수(Fermi-Dirac distribution function)일 수 있다.

- [16] 일 실시예에 따른 시물레이션 방법에 있어서, 상기 위치-의존 제벡 계수 $S_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 는 란다우어 공식으로부터 하기 수학식으로 도출되는, 시물레이션 방법에 관한 것이다.

$$[17] \quad S_{coh}(\mathbf{r}) = S_{tip} + S_{sample}(\mathbf{r})$$

[18] 여기서, S_{tip} 은 팁 제백 계수이고, $S_{sample}(\mathbf{r})$ 은 소재의 샘플 제백 계수일 수 있다.

[19] 일 실시예에 따른 시뮬레이션 방법에 있어서, 상기 샘플 제백 계수 $S_{sample}(\mathbf{r})$ 는, 하기 수학식에 의해 정의되는, 시뮬레이션 방법에 관한 것이다.

$$[20] \quad S_{sample}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{eT} \frac{\int N_e^{sample}(E, \mathbf{r})(E - E_F) \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE}{\int N_e^{sample}(E, \mathbf{r}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE}$$

[21] 여기서, e 는 전자 전하량이고, T 는 절대 온도이며, E_F 는 페르미 에너지이고, f 는 온도 T 에서 페르미-디랙 분포 함수(Fermi-Dirac distribution function)이며,

$N_e^{sample}(E, \mathbf{r})$ 은 소재 표면(material surface)에 대한 제일원리 계산(first-principles

Calculations)으로부터 획득한 전자의 국지 밀도(local density of states)일 수 있다.

[22] 일 실시예에 따른 시뮬레이션 방법에 있어서, 상기 유효 온도 강하 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 는 하기 수학식에 의해 계산되는, 시뮬레이션 방법에 관한 것이다.

$$[23] \quad \Delta T_{coh}(\mathbf{r}) = \frac{\Delta Q}{\pi^2 k_B^2 T} \frac{3h}{\tau^{ph}(\mathbf{r})}$$

[24] 여기서, k_B 는 볼츠만 상수(Boltzmann constant)이고, $\tau^{ph}(\mathbf{r})$ 는 팁-샘플

접합의 포논 투과 확률일 수 있다.

[25] 일 실시예에 따른 시뮬레이션 방법에 있어서, 상기 유효 온도 강하 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 는 실험적인 $I_{expt}(\mathbf{r})$ 및 이론적인 $S_{coh}^{theory}(\mathbf{r})$ 에 기초하여 하기 수학식에 의해

유도되는, 시뮬레이션 방법에 관한 것이다.

$$[26] \quad \Delta T_{coh}(\mathbf{r}) = \frac{V^{exp}(\mathbf{r}) - V_{diff}}{S_{coh}^{theory}(\mathbf{r})}$$

[27] 여기서, $I_{expt}(\mathbf{r})$ 는 무결함 영역(defect-free region)에 대해 측정된 열전 전압이고, $S_{coh}^{theory}(\mathbf{r})$ 는 소재의 이론적인 제백 계수일 수 있다.

[28] 일 실시예에 따른 시뮬레이션 방법에 있어서, 상기 유효 온도 강하 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 는 반데르발스 에너지 $E^{vdw}(\mathbf{r})$ 와의 상관관계(correlation)에 기초한 함수인 하기

수학식에 의해 추론(deduce)되는, 시뮬레이션 방법에 관한 것이다.

[29]
$$\Delta T_{coh}(r) = f(E^{vdw}(r))$$

[30] 여기서, $f(E^{vdw}(r))$ 는 선형 피팅 공식 또는 지수 함수를 포함하는 함수일 수 있다.

발명의 효과

[31] 일 실시예에 따르면 제백 효과를 이용하여 소재의 표면에 대응하는 주사 제백 현미경의 원자수준-해상도 이미지를 컴퓨터가 시뮬레이션할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[32] 도 1은 일 실시예에 따른 주사 열전 현미경의 원자 해상도의 스케매틱을 도시할 수 있다.

[33] 도 2A 내지 도 2F는 일 실시예에 따라 n 도핑된 독립 그래핀의 무결함 영역에 대한 실험적 열전 전압 이미지, 제백 계수 이미지, 라인 프로파일, 및 상관관계(correlation)를 도시할 수 있다.

[34] 도 3A 내지 도 3D는 일 실시예에 따라 포인트 결함(point defect)에 대한 열전 전압의 이미지, 토포그래픽 이미지(topographic image), 및 프로파일을 도시할 수 있다.

[35] 도 4A 내지 도 4F는 일 실시예에 따라 n 도핑된 독립 그래핀에서 포인트 결함에 인접한 제백 계수의 시뮬레이션된 이미지 및 열전 전압을 도시할 수 있다.

[36] 도 5A 내지 도 5D는 일 실시예에 따라 원시 독립 그래핀의 모형(model), 전자밀도(DOS, density of states), 반데르발스 에너지, 반데르발스 토포그래피를 도시할 수 있다.

[37] 도 6A 내지 도 6F는 일 실시예에 따라 국지적으로 평균화된 제백 계수, 반데르발스 에너지, 효과적 온도 강하 간의 상관 관계, 열전 전압을 도시할 수 있다.

[38] 도 7A 내지 도 7D는 일 실시예에 따라 결함 있는 독립 그래핀(defective free-standing graphene)의 모형, 전자밀도, 반데르발스 에너지 및 반데르발스 토포그래피를 도시할 수 있다.

[39] 도 8A 내지 도 8D는 일 실시예에 따라 단일 치환 질소 원자의 모형, 전자밀도, 반데르발스 에너지, 및 반데르발스 토포그래피를 도시할 수 있다.

[40] 도 9A 내지 도 9D는 일 실시예에 따라 결함 있는 독립 그래핀의 모형, 전자밀도, 반데르발스 에너지 및 반데르발스 토포그래피를 도시할 수 있다.

[41] 도 10A 내지 도 10D는 일 실시예에 따라 결함 복합체에 대한 시뮬레이션된 열전 전압 이미지, 그에 대응하는 고속 푸리에 변환(FFT, Fast Fourier Transform) 이미지, 실험적 열전 이미지, 및 그에 대응하는 고속 푸리에 변환 이미지를 도시할 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

- [42] 이하에서는 첨부 도면을 참조하여 본 발명에 대해 구체적으로 설명한다.
- [43] 이하, 본 명세서에서 주사 제백 현미경(SSM, Scanning Seebeck Microscope)은 제백 효과(Seebeck effect)를 이용한 주사 열전 현미경(STM, Scanning Thermoelectric Microscope)을 나타낼 수 있다. 일 실시예에 따르면, 주사 제백 현미경에 의해 획득된 소재 표면(material surface)의 이미지에 대응하는 소재(material)를 찾기 위해, 소재 표면을 컴퓨터 원용 시뮬레이션할 수 있다.
- [44] 여기서, 주사 터널링 현미경(STM, Scanning Tunneling Microscope)은 터널링(tunneling)을 이용하는 것으로서 전하 전송 갭(Charge-transfer gap) 및 전압 바이어스(voltage bias)를 이용하여 다이렉트 파동함수 이미지(direct wavefunction image)를 획득하는 것과 달리, 주사 제백 현미경은 제백 효과를 이용하는 것으로서 열 전송 갭(Heat-transfer gap) 및 온도 바이어스(temperature bias)를 이용하여 차동 파동함수 이미지(Differential wavefunction image)를 획득할 수 있다.
- [45] 또한, 본 명세서에서 주사 제백 현미경 이미지는 상술한 주사 제백 현미경에 의해 획득된 이미지를 나타낼 수 있다. 일 실시예에 따르면 주사 제백 현미경 이미지에 대응하는 소재 표면의 원자수준-해상도 이미지가 컴퓨터에 의해 시뮬레이션되는 과정을 하기에서 상세히 설명한다.
- [46] 이하에서는, 주사 제백 현미경 이미지의 시뮬레이션에 대한 예시로서, 그래핀(graphene)을 중점적으로 설명하였으나, 소재를 이로 한정하는 것은 아니고, 임의의 원자 구조를 갖는 다른 소재에 대해서도 일 실시예에 따른 시뮬레이션 방법이 적용될 수 있다.
- [47] 이하, 본 명세서에서 제백 계수(Seebeck coefficient)는 위치-의존 제백 계수(또는 코히어런트 제백 계수) $S_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 및 국지 제백 계수 $S(\mathbf{r})$ (또는 $S(\mathbf{r};\mathbf{r}')$)를 포함할 수 있다.
- [48] 열(heat)은 소재 내에서 전자와 홀과 같은 전하 캐리어(charge carrier) 및 포논(phonons)과 같은 격자의 진동(lattice vibrations)에 의해 확산되거나 이질적으로 수송(incoherent transport)될 수 있다고 알려져 있다. 그러므로 열 수송(heat transport)을 이용하여 소재 및 소재의 전자 상태의 국지 이미징을 하는 것은 매우 힘들 것으로 여겨지고 있다. 그러나, 최근에, Cho et al.은 에피태셜 그래핀(epitaxial graphene)표면에서 열 기반 주사 탐침 현미경(heat-based scanning probe microscope)으로 국지 열전 이미징(local thermoelectric imaging)을 수행하여 일련의 원자 파동함수 이미지를 얻어 냈음을 보고하였다. 이러한 보고는 어떻게 열 수송 실험에서 단위 셀(unit cell)에서 원자 편차(atomic variation)를 측정할 수 있는지에 대한 질문을 야기시킬 수 있다. 이에 대한 대답으로써, 주사 열전 현미경의 이미징 메커니즘을 밝혀내야할 뿐 아니라 열전 또는 제백 효과에 대한 기초 물리이론(fundamental physics)이 일반적인 길이 스케일에서부터 원자 길이

스케일까지 재검증되어야 할 것이다.

- [49] 본 명세서에서 중시적 전자 및 열 수송 특성을 바탕으로 원자 해상도를 갖는 주사 열전 현미경의 이론이 제시될 수 있다. 거시적인 일반 수송 방정식 및 정전기 방정식을 시작으로 한 이론은 열전 측정으로 원자 수준의 이미징 기술의 가능성 및 메커니즘을 보여줄 수 있다. 열전 이미지의 컴퓨터 시뮬레이션은 실험적 결과와 결합되어 그래핀에서 원자 스케일 결합을 식별하기 위해 효과적으로 사용될 수 있다.
- [50] 도 1은 일 실시예에 따른 주사 열전 현미경의 원자 해상도의 스케매틱을 도시할 수 있다.
- [51] 도 1에서 개략적으로 도시된 바와 같이, 주사 열전 현미경의 탐침(10)이 제1 온도(T1)으로 그래핀 소재(20; graphene)에 접촉하고 그래핀 소재는 제2 온도(T2)에 놓여 있다. 측정은 개조된 초고진공 접촉 모드 원자력 현미경(AFM, atomic force microscope)을 통하여 이루어진다. 편의를 위해 도면과 본 명세서에서는 그래핀으로 설명하지만 본 발명의 시뮬레이션 방법이 그래핀에 제한되는 것으로 해석되어서는 아니된다. 제1 온도와 제2 온도 차이에 의해서 온도 구배 필드 ∇T 가 팁-샘플 접촉 영역의 근방에서 형성될 수 있고, 팁과 샘플 간의 계면에서 $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 가 유도되어 원자의 높낮이 $z(\mathbf{r})$ 과 180도의 위상차를 보이는 열전 전압(thermoelectric voltage)이 실제 주사 열전 현미경에서는 고임피던스 전압계(high-impedance voltmeter)에 의해서 정확하게 측정될 수 있다. 측정된 국지 열전 전압은 하기 수학식 1과 같이 나타낼 수 있다.
- [52] 【수학식 1】
- $$V(\mathbf{r}) = V_{\text{diff}} + S_{\text{coh}}(\mathbf{r}) \Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$$
- [53] 여기서, V_{diff} 는 팁과 샘플 모두에서 확산 수송 영역(diffusive transport region)에서의 열전 전압 강하(thermoelectric voltage drop), $S_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 및 $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 은 위치-의존 제백 계수 및 팁과 샘플 간의 계면에서의 유효 온도 강하를 나타낼 수 있다. 이 때, 전자 및 열은 코히어런트하게(coherently) 수송될 수 있다. 코히어런트한 열전 전압(coherent thermoelectric voltage) $V(\mathbf{r}) = V_{\text{diff}} + S_{\text{coh}}(\mathbf{r}) \Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 은 하기에서 설명하는 바와 같이, 주사 열전 현미경에서 관측되는 원자 해상도에 대응할 수 있다.
- [54] 온도 구배 ∇T 가 거시적 전도성 시스템(macroscopic electro-conductive system)에 존재하는 경우, 전자 또는 대전 입자(charged particles)의 수송은 정전 전계 E 및 구배 ∇T 하에서 입자 확산(particle diffusion)을 구동력(driving force)으로 하여

이루어진다. 국지 사이트(local site)에서 전류 밀도(electric current density) $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ 은 일반 수송 방정식 $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \sigma [\mathbf{E}(\mathbf{r}) - S(\mathbf{r})\nabla T(\mathbf{r})]$ 으로 나타낼 수 있다. 여기서,

σ 는 전도율(electrical conductivity)이고, $S(\mathbf{r})$ 은 국지 제백 계수 또는 열전력(thermopower)일 수 있다. 이상적인 전압계의 경우 $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0$ 인 개방 회로 조건(open-circuit limit)을 만족하므로 대전된 입자에 작용하는 정전기 힘(electrostatic force)과 열전력 힘(thermopower force) 간의 균형을 유지하여 내부 전위(built-in potential)는 하기 수학적 식 2와 같이 나타낼 수 있다.

[55]

【수학적 식 2】

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = S(\mathbf{r}) \nabla T(\mathbf{r})$$

[56]

온도 프로파일 $T(\mathbf{r})$ 은 주로 구성 소재의 열 전도성 및 소재간의 계면 열 전도성과 같은 시스템의 열 수송 특성에 의해 결정될 수 있다. 상술한 수학적 식 2는 거시적 확산 시스템에서 도출될 수 있으나, 현미경 시스템과 같이 미시적인 시스템에도 적용될 수 있다. 외부 전계가 인가되지 않을 때, $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 은 열 확산 유도 전하 분포(thermal diffusion-induced charge distribution) $q^{th}(\mathbf{r})$ 로부터 발생하는 내부 전계(built-in electric field)만을 나타낸다. 가우스의 법칙은 내부 전계 및 전하 밀도에 적용될 수 있는 바 $\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = q^{th}(\mathbf{r})$ 일 수 있다. 이에 따라 수학적 식 2를 이용하여 하기 수학적 식 3을 유도할 수 있다.

[57]

【수학적 식 3】

$$\nabla \cdot (S(\mathbf{r}) \nabla T(\mathbf{r})) = q^{th}(\mathbf{r})$$

[58]

수학적 식 3로부터 열 유도 전하의 분포 $q^{th}(\mathbf{r})$ 는 국지 제백 계수 $S(\mathbf{r})$ 및 온도 프로파일 $T(\mathbf{r})$ 의 정보로부터 정확하게 역추적될 수 있다.

[59]

AFM 팁(AFM tip)이 도 1에 도시된 바와 같이 점 형태의 탐침이라 가정하면, 국지 열전 전압은 "하트리 형(Hartree-type)" 정전 포텐셜 $V(\mathbf{r}) = [q^{th}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')/|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2] d^3 \mathbf{r}'$ 과 등가일 수 있다. 여기서 \mathbf{r} 은 탐침의 위치로서, $V(\mathbf{r})$ 은 전체 부피(entire volume)에 대한 \mathbf{r}' 의 적분일 수 있다. 이 때, 수학적 식 3 및 무한대(infinity)에서 $\nabla T = 0$ 이라는 사실을 이용하여 국지 열전 전압을 하기 수학적 식 4와 같이 나타낼 수 있다.

[60]

【수학적 식 4】

[61]

$$V(\mathbf{r}) = \int S(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}'$$

[62]

국지 열전 전압 $V(\mathbf{r})$ 은 $1/r^2$ 의 팩터(factor)에 의해 반경 방향으로 가중된 온도 구배 $\nabla T(\mathbf{r})$ 에 의해 컨볼루션된(convoluted) 국지 제백 계수 $S(\mathbf{r})$ 의 부피 적분의

형태(선 적분이 아닌)로 나타낼 수 있다. 여기서, r 은 점 형태의 탐침으로부터 측정된 거리일 수 있다. 수학적 4는 어떠한 근사(approximation)도 포함하지 않는 정확한 수학적이므로, 비접촉 STM 설정을 포함하여 다른 열전 시스템에 대해 전반적으로 적용될 수 있다.

- [63] 수학적 4에서 부피 적분은 확산 및 코히어런트(coherent) 수송 영역으로 나뉠 수 있다. 확산 수송 영역에서, 제백 계수 및 온도 프로파일은 오직 전기 전도성 및 열 전도성과 같은 소재의 고유 특성에 의해 결정될 수 있다. 모트 공식(Mott formula)으로부터, 확산 제백 계수는 $S = -\frac{(k_B\pi)^2 T}{3e} \frac{\partial}{\partial E} (\ln[\sigma(E)])_{E_F}$ 로 나타낼 수 있다.

여기서, k_B 는 볼츠만 상수(Boltzmann constant), T 는 절대 온도, e 는 전자의 전하(electron charge), $\sigma(E)$ 는 에너지 의존 전기 전도성(energy-dependent electrical conductivity), E_F 는 페르미 에너지(Fermi energy)를 나타낼 수 있다. 온도 프로파일 $T(\mathbf{r})$ 은 포논 평균 자유 행로(phonon mean-free-path)에 의해 결정되어 물질 내에서는 대개 천천히 변화할 수 있기 때문에, 확산 수송 영역에서 발생하는 열전 전압 V_{diff} 는 거의 상수 값을 가질 수 있다.

- [64] 팁-샘플 계면(tip-sample interface)의 코히어런트한 수송 영역(coherent transport region)에서는, 접합(junction)을 통한 전자 및 포논의 수송이 각각의 투과 확률(transmission probability)과 전기 및 열 전도성 쿼텀(electrical and thermal conductance quanta)에 의해 설명될 수 있다. 코히어런트 제백 계수 $S_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 는 팁 위치 \mathbf{r} (내부 좌표 \mathbf{r}' 과는 무관)에 의존적이고, 팁-샘플 접합(tip-sample junction)의 전자 투과 확률(electron transmission probability) $\tau(E, \mathbf{r})$ 를 이용해 란다우어 공식(Landauer formula)으로부터 $S_{\text{coh}}(\mathbf{r}) = -\frac{(k_B\pi)^2 T}{3e} \frac{\partial}{\partial E} (\ln[\tau(E, \mathbf{r})])_{E_F}$ 로 나타낼 수 있다.

여기서, $\tau(E, \mathbf{r})$ 은 팁-샘플 접합(tip-sample junction)의 전자 투과 확률(electron transmission probability)을 나타낼 수 있다.

- [65] 국지 코히어런트 열전 전압은 하기 수학적 5와 같이 나타낼 수 있다.

- [66] 【수학적 5】

$$V_{\text{coh}}(\mathbf{r}) = S_{\text{coh}}(\mathbf{r}) \int \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}'$$

$$= S_{\text{coh}}(\mathbf{r}) \Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r}).$$

- [67] 여기서, 온도 프로파일의 부피 적분은 $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 로 설정될 수 있고, $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 는 $1/r^2$ 에 기인하여 탐침 주변의 온도 프로파일 및 국지 형상(local geometry)에 민감하게 의존할 수 있다. 물리적으로 $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 은 두 다른 박막 소재들(thin-film materials)

간의 열 경계(thermal boundary)에서 존재하는 것으로 알려진 계면 온도 강하에 대응할 수 있다. 일반적으로 박막에서의 계면 온도 강하는 진동 스펙트럼(vibrational spectra) 및 관련된 소재들의 상호작용 강도(interaction strength)에 따라 달라질 수 있다.

- [68] 예를 들어, 유효 온도 강하 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 는 팁-샘플 접합의 포논 투과 확률(phonon transmission probability)을 이용해 란다우어 공식으로부터 나타낼 수 있다. 여기서, $\tau^{ph}(\mathbf{r})$ 는 팁-샘플

$$\Delta T_{coh}(\mathbf{r}) = \frac{\Delta Q}{\pi^2 k_B^2 T} \frac{3h}{\tau^{ph}(\mathbf{r})}$$

접합의 포논 투과 확률을 나타낼 수 있다.

- [69] 확산 열전 전압 V_{diff} 및 코히어런트 열전 전압을 통해, 총 국지 열전 전압을 수학식 1로부터 도출할 수 있다. 이를 통하여, 열전력 프로파일링이 PN접합에 대해 어떻게 동작하는지, 국지 열전 이미징이 마이크로미터에서 서브 옴스트롬 스케일까지 어떻게 원활하게 동작하는지 설명할 수 있다.

- [70] 코히어런트 제백 계수(예를 들면, 위치-의존 제백 계수) $S_{coh}(\mathbf{r})$ 은 하기 수학식 6과 같이 나타낼 수 있다.

- [71] 【수학식 6】

$$S_{coh}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{eT} \frac{\int \tau^{el}(E, \mathbf{r})(E - E_F) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE}{\int \tau^{el}(E, \mathbf{r}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE}$$

- [72] 약한 결합의 제한에서, 전자 투과 확률 $\tau(E, \mathbf{r})$ 은 $\tau(E, \mathbf{r}) \propto N_e^{tip}(E) N_e^{sample}(E, \mathbf{r})$ 로 근사화될 수 있다. 여기서, $N_e(E, \mathbf{r})$ 은 국지 전자 밀도를 나타낼 수 있다.

- [73] 란다우어 공식으로부터, 코히어런트 제백 계수 $S_{coh}(\mathbf{r})$ 는 $S_{coh}(\mathbf{r}) = S^{tip} + S_{sample}(\mathbf{r})$ 로 나타낼 수 있다. 샘플 제백 계수 $S_{sample}(\mathbf{r})$ 은 하기 수학식 7과 같이 나타낼 수 있다.

- [74] 【수학식 7】

$$S_{sample}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{eT} \frac{\int N_e^{sample}(E, \mathbf{r})(E - E_F) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE}{\int N_e^{sample}(E, \mathbf{r}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE}$$

- [75] 여기서, f 는 온도 T 에서 페르미-디랙 분포 함수(Fermi-Dirac distribution function)일 수 있다. 300K에서 $\left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right)$ 는 페르미 에너지 E_F 근처의 ~ 0.1 eV의

적분 윈도우(integration window)로서 작용할 수 있다. 샘플 제백 계수는 페르미 에너지에서 $N_e^{sample}(E, \mathbf{r})$ 의 에너지 미분(energy derivative) 또는

비대칭(asymmetry)에 따라 양수(positive) 또는 음수(negative)일 수 있다.

[76] 소재 표면에 대한 제일원리 계산(first-principles Calculations)으로부터 소재의 국지 전자 밀도 $N_e^{sample}(E, \mathbf{r})$ 가 획득될 수 있으므로, $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 가 알려져 있다면,

수학식 1은 튜브-샘플 접합에서 열전 이미지 시뮬레이션의 기초 역할을 할 수 있다. 일반적으로 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 의 정보는 실험 또는 시뮬레이션으로 알기 어려울 수 있다.

대신, 하기 도 2에 도시된 바와 같이 실험적인 $I^{exp}(\mathbf{r})$ 및 이론적인 $S_{coh}^{theory}(\mathbf{r})$

(예를 들어, $S_{sample}(\mathbf{r})$)으로 수학식 1을 인버스(inverting)함으로써 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 를

유도할 수 있다. 예를 들어,

$$\Delta T_{coh}(\mathbf{r}) = \frac{V^{exp}(\mathbf{r}) - V_{diff}}{S_{coh}^{theory}(\mathbf{r})}$$

[77] 도 2A 내지 도 2F는 일 실시예에 따라 무결함 영역에 대한 실험적 열전 전압 이미지, 제백 계수 이미지, 라인 프로파일, 및 상관관계(correlation)를 도시할 수 있다.

[78] 도 2A는 SiC(0001) 상의 2층 그래핀의 무결함 영역에 대한 실험적 열전 전압 이미지로, SiC 기판에 의해 재구성된 그래핀의 $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ 패턴도 관찰할 수 있다.

[79] 도 2B는 도 2A를 확대한 것일 수 있다. 평행사변형으로 마킹된 그래핀 단위 셀에서 실험적 열전 전압을 샘플링할 수 있다.

[80] 도 2C는 n도핑된 독립 그래핀의 컴퓨터 시뮬레이션된 제백 계수 이미지를 나타낼 수 있다. 중심 공극 및 탄소 원자는 'V' 및 'C'로 각각 마킹될 수 있다.

[81] 도 2D는 도 2C에서 V-C-C-V의 라인을 따라 실험적 열전 전압, 제백 계수 및 반데르발스 에너지의 라인 프로파일을 도시한 것이다.

[82] 도 2E는 추론된 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 및 반데르발스 에너지 $E^{vdw}(\mathbf{r})$ 간의 상관관계를 도시한

것이다. 국지적으로 0.5 옴스트롬의 디스크 반경(disk radius)으로 평균화된 $S_{sample}(\mathbf{r})$ 은 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 를 추론하기 위해 사용될 수 있다. (도 8) 예를 들어, 추론된

$\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 및 반데르발스 에너지 $E^{vdw}(\mathbf{r})$ 간의 상관관계는 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r}) = f(E^{vdw}(\mathbf{r}))$ 로

표현될 수 있다. 여기서, 함수 $f(E^{vdw}(\mathbf{r}))$ 는 선형 피팅 공식 또는 지수 함수를

포함할 수 있다. 상술한 도 2E에서 선형 피팅 공식 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r}) = \alpha E^{vdw}(\mathbf{r}) + \beta$ 은

$\Delta T_{coh}(\mathbf{r}) = 118.05 + 1.6454 E^{vdw}(\mathbf{r})$ 일 수 있다.

- [83] 도 2F는 n도핑된 독립 그래핀에 대한 이론적 열전 전압의 재구성된 이미지를 나타낼 수 있다.
- [84] 도 2A 및 도 2B는 SiC 상의 2층 그래핀(bilayer graphene)에서 무결함 영역(defect-free region)에 대해 측정된 열전 전압 $I_{\text{expt}}(\mathbf{r})$ 을 도시할 수 있다. 도 2C는 수학적 7로부터 계산된 n-도핑 독립 그래핀(n-doped free-standing graphene)에 대한 이론적 제백 계수 $S_{\text{sample}}(\mathbf{r})$ 를 도시할 수 있다. 다이아몬드로 코팅된 AFM 팁 및 그래핀 샘플은 반데르발스(vdW, van der Waals) 상호작용을 통해 상호작용할 수 있으므로, 제백 계수 $S_{\text{sample}}(\mathbf{r})$ 은 하기도 5에 도시된 바와 같이 원시 그래핀(pristine graphene)에 대한 레나드-존스 포텐셜(Lennard-Jones potential)로 계산된 vdW 평형 높이(equilibrium height)에서 평가될 수 있다. 도 2B 및 도 2C에서 실험적 열전 이미지 및 이론적 열전력 이미지 적당한 정도의 유사성을 나타낼 수 있다. 특히, 탄소 육사곤(carbon hexagon)의 중심 공극(center void)은 탄소 원자 사이트보다 실험적 및 이론적 결과 모두에서 더 네거티브(negative)한 신호를 나타낸다. 이는 전하가 풍부한 원자 사이트에서 더 많은 전류를 집어내는 STM과 특징적으로 차이를 보인다. 하지만 제백 계수 $S_{\text{sample}}(\mathbf{r})$ 만으로는 열전 전압 $I_{\text{expt}}(\mathbf{r})$ 에서 관측되는 원자 파형(atomic corrugation)을 재현할 수 없다는 것이 도 2D에서 라인 프로파일링으로부터 확인할 수 있다.
- [85] 코히어런트 수송의 길이 스케일에서 온도의 역할을 식별하기 위해 수학적 1을 인버스(invert)하고 $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 을 추론(deduce)할 수 있다. 추론된 $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 및 vdW 에너지 $E^{\text{vdw}}(\mathbf{r})$ 간에는 도 2E에 도시된 바와 같은 거의 선형인 상관관계(almost linear correlation)가 존재할 수 있다. 이러한 선형 상관관계(linear correlation)는 $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 가 팁-샘플 계면에서 원자간 열 결합(inter-atomic thermal coupling)에 민감하게 의존할 수 있기 때문일 수 있다. 즉, 열 결합(thermal coupling) 약한 경우(탄소 원자 사이트) 큰 계면 온도 강하를 예측할 수 있고, 결합이 강한 경우(탄소 육사곤의 중심 공극) 작은 계면 온도 강하를 예측할 수 있다.
- [86] 결과적으로 추론된 $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 은 탄소 원자 사이트로부터 육사곤 공극(hexagonal void)까지의 서브 옹스트롬 스케일에서 원자 편차를 나타낼 수 있다. 그러므로, 국지 열전 전압에서의 원자수준의 해상도는 제백 계수를 통한 코히어런트 전자 수송에서 원자수준에서의 변화와 열 전도성을 통한 코히어런트 열 수송의 원자수준에서의 변화가 기인하는 것이 제안될 수 있다. 도 2F는 $\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 의 선형 피팅 공식(linear fitting formula)과 $S_{\text{sample}}(\mathbf{r})$ 을 통해 시뮬레이션한 원시 독립 그래핀의 이론적 열전 전압의 이미지를 도시할 수 있다.
- [87] 도 3A 내지 도 3D는 일 실시예에 따라 포인트 결함(point defect)에 대한 열전

전압의 이미지, 토포그래픽 이미지(topographic image) 및 프로파일을 도시할 수 있다.

- [88] 도 3A는 SiC 상의 2층 그래핀에서 포인트 결함에 대한 열전 전압의 큰-영역 주사 이미지를 나타낼 수 있다.
- [89] 도 3B는 도 3A에서 포인트 결함에 대해 회전된 시점에서 열전 전압의 작은 영역 주사 이미지를 나타낼 수 있고, 도 3C는 동시에 획득된 토포그래픽 이미지(topographic image)를 나타낼 수 있다.
- [90] 도 3D는 도 3C에서 점선(1') 및 굵은 선(2')을 따라 높이 프로파일을 나타낼 수 있다. 점선(1')과 굵은 선(2')의 라인 프로파일에 비교하면 점선(1') 상에 하나의 탄소 원자가 결합되어 있는 것을 알 수 있다.
- [91] $E_{vdw}(\mathbf{r})$ 와 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 의 선형 상관관계를 이용하여 시뮬레이션된 열전 전압

이미지를 실험적 열전 이미지와 비교함으로써 그래핀 표면의 원자 스케일 결함을 식별할 수 있다. 도 3A 및 도 3B는 SiC 상의 2층 그래핀의 포인트 결함의 열전 이미지를 나타낼 수 있다. 도 3C 및 도 3D에서 토포그래픽 분석(topographic analysis)을 통해 실험에서 포인트 결함이 단일 탄소 원자 사이트와 연관된다는 것을 유추할 수 있다.

- [92] 도 4A 내지 도 4F는 일 실시예에 따라 n-도핑된 포인트 결함 구조를 갖는 독립 그래핀에 대한 제백 계수의 시뮬레이션된 이미지(도 4A, 도 4B, 도 4C) 및 열전 전압(도 4D, 도 4E, 도 4F)을 도시할 수 있다.
- [93] 도 4A 및 도 4D는 단일 탄소 공백(V_C)의 포인트 결함에 대한 제백 계수의 시뮬레이션된 이미지 및 열전 전압을 나타낼 수 있다.
- [94] 도 4B 및 도 4E는 치환 질소 원자(N_C)의 포인트 결함에 대한 제백 계수의 시뮬레이션된 이미지 및 열전 전압을 나타낼 수 있다.
- [95] 도 4C 및 도 4F는 탄소 공백 및 치환 질소의 결함 복합체(V_C-O_C)의 포인트 결함에 대한 제백 계수의 시뮬레이션된 이미지 및 열전 전압을 나타낼 수 있다.
- [96] 여기서, 각 원자 모델은 삽화(inset)로 표시될 수 있다.
- [97] 결함을 원자 모델에 매핑하기 위해, 단일 탄소 공백(single carbon vacancy)(V_C ; 도 4A 및 도 4D), 치환 질소(substitutional nitrogen)(N_C ; 도 4B 및 도 4E), 및 n-도핑된 독립 그래핀에서 탄소 공백과 치환 질소의 결함 복합체(defect complex)(V_C-O_C ; 도 4C 내지 도 4F)의 열전 이미지를 시뮬레이션할 수 있다.
- [98] V_C 결함의 전자는 페르미 에너지 아래에 위치하기 때문(하기 도 7)에, 열전력 및 열전 이미지는 실험적 이미지와는 반대로 결함 사이트에서 밝은 이미지를 보인다. 한편, N_C 및 V_C-O_C 결함의 전자는 페르미 에너지 위에 위치하기 때문에(하기 도 8 및 도 9), 열전력 및 열전 이미지는 실험적 이미지와 비슷하게 어두운 이미지를 보인다. 어두운 부분의 크기가 N_C 와 잘 매칭되는 반면, 대칭구조는 V_C-O_C 의 이미지에 잘 매칭될 수 있다. 산소 원자(atomic oxygen)는 샘플 성장(sample growth) 환경에 존재하고 V_C-O_C 의 형성 에너지(formation

energy)는 V_C 보다 충분히 작기 때문에 실험에서 포인트 결함(point defect)은 V_C -O_c일 가능성이 높을 수 있다. 도 10에 도시된 바와 같이, $V_{diff} = -0.6$ mV로 가정하여 양의 신호(positive signals)를 포함하는 시뮬레이션 결과는 실험적 이미지와 비교했을 때 몇 가지 눈에 띄는 특징들을 재생성할 수 있다. 실제로, 실험에서 결함 사이트에 인접한 양의 열전 신호는 파동 함수 중첩, 원자-대-원자 열 결합, 기판 효과(substrate effect), 및 제한적으로 전류 시뮬레이션 스킴(current simulation scheme)에서 반영될 수 있는 V_{diff} 의 자세한 사항과 연관될 수 있다.

- [99] 열 기반 주사 열전 현미경을 STM과 비교하는 것이 중요할 수 있다. 두 기술은 파동 함수의 실제 공간 이미지를 제공하는 주사 탐침 현미경의 타입으로서 공통 특징 및 기능을 공유할 수 있다. 두 기술의 차이는 STM이 진공 터널링 갭(vacuum-tunneling gap)에 걸쳐서 전압 강하를 인가함으로써 터널 전류를 측정하는 반면, 열전 현미경은 열전달 갭(heat-transfer gap)에 걸쳐 또는 계면에 걸쳐 온도 강하를 인가함으로써 전압 차이를 측정할 수 있다. 결과적으로 STM에서는 전압 바이어스에 의한 페르미 전자의 0차 perturbation을 보는 반면, 열전 현미경에서는 온도 바이어스에 의한 1차 perturbation을 보는 것이라 할 수 있겠다. 이 점에서, 주사 열전 현미경은 실온에서도 페르미 전자 상태를 STM과는 다르게 별도로 분석하는데 유용할 수 있다.
- [100] 이하, 제일원리 계산(First-principles calculations)에 대해 상세히 설명한다.
- [101] 수학적 7에서 중시적 제백 계수는 그래핀의 제일원리 전자구조 계산(first-principles density-functional theory calculations)으로부터의 국지 전자 밀도 및 콘-삼 파동 함수(Kohn-Sham wavefunctions)를 이용하여 획득될 수 있다. 바닥상태의 총 에너지 계산을 위해 VASP 소프트웨어를 사용할 수 있다. 그래핀에서 포인트 결함($V_C, N_C, \dots V_C-O_C$)을 모델링하기 위해 (12x12) 그래핀 슈퍼셀(supercell)을 사용할 수 있다. 디랙 포인트(Dirac point)를 0 eV라 하였을 때, 페르미 에너지 $E_F = 0.3$ eV가 전자의 국지 밀도를 계산하기 위해 사용될 수 있다. 수학적 7에서 $S_{sample}(\mathbf{r})$ 을 계산하기 위해 $T = 315K$ 를 사용할 수 있다.
- [102] 이하, 원자적으로 다양한 효과적인 온도 강하(Atomically-varying effective temperature drops)에 대해 상세히 설명한다.
- [103] $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 를 실험적 $J_{expt}(\mathbf{r})$ 및 $S_{sample}(\mathbf{r})$ 이론적 으로부터 수학적 1을 인버스하여 추론하기 위하여, 특정 디스크 반경 R 내에서 국지적으로 평균화된(locally averaged) $S_{sample}(\mathbf{r})$ 을 사용할 수 있다. 이는 탐침의 유한 크기 효과를 고려할 수 있는 방법이다. 도 2E 내지 도 2F에서, $R = 0.5$ 옴스트롬의 국지적으로 평균화된 $S_{sample}(\mathbf{r})$ 을 사용할 수 있다. 비교를 위해, 도 6에 도시된 바와 같이 $R = 0.3$ 옴스트롬의 국지적으로 평균화된 $S_{sample}(\mathbf{r})$ 및 기존 $S_{sample}(\mathbf{r})$ 을 사용할 수 있다.
- [104] 추론된 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 는 하기 수학적 7과 같이 표현되는 레너드-존스 12-6 포텐셜(12-6

potentials)로 계산된 반데르발스(vdW, van der Waals) 에너지 $E^{\text{vdw}}(\mathbf{r})$ 와 거의 선형 상관관계 또는 거의 지수 상관 관계(exponential correlation)를 나타낼 수 있다.

[105] 【수학식 8】

$$E^{\text{vdw}}(\mathbf{r}) = \sum_j 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right)^6 \right]$$

[106] 여기서, r_i 및 r_j 는 각각 팁과 샘플의 원자 위치(atomic position)일 수 있고, ϵ 및 σ 는 레너드-존스 파라미터(Lennard-Jones parameters)일 수 있다. 팁은 단일 탄소 원자로 모델링될 수 있다. 탄소, 질소 및 산소 원자에 대한 ϵ_{ii} 및 σ_{ii} 파라미터는 표 1로 목록화될 수 있고, $\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_{ii}\epsilon_{jj}}$ 및 $\sigma_{ij} = (\sigma_{ii} + \sigma_{jj})/2$ 를 사용할 수 있다.

반데르발스 에너지는 원자-원자 거리가 15 Å 보다 작은 경우 합산되고, 최소 반데르발스 에너지를 갖는 평형 높이 $z(\mathbf{r})$ 가 $S^{\text{sample}}(\mathbf{r})$ 을 평가하기 위해 사용될 수 있다.

[107] 【표 1】

i	ϵ_{ii} (meV)	σ_{ii} (Å)
C	4.20	3.37
N	7.41	3.25
O	9.12	2.96

[108] 이하, 통계적으로 정의된 페르미 온도(Statistically defined Fermi temperature)를 상세히 설명한다.

[109] 수학식 7에서 표현된(하기 수학식 9의 형태로도 표현 가능하다.) 샘플 제백 계수에 대한 심층 물리학(in-depth physics)을 이해할 수 있다.

[110] 【수학식 9】

$$S^{\text{sample}}(\mathbf{r}) = -\frac{(k_B\pi)^2 T}{3e} \frac{\partial}{\partial E} \left(\ln[N_e^{\text{sample}}(E, \mathbf{r})] \right)_{E_f}$$

[111] $k_B \ln[N_e^{\text{sample}}(E, \mathbf{r})]$ 를 전자의 엔트로피로 정의하면, 엔트로피의 에너지 미분은

온도의 역수에 대응할 수 있고, 하기 수학식 10과 같이 나타낼 수 있다.

[112] 【수학식 10】

$$\frac{1}{T_F(\mathbf{r})} = \frac{\partial}{\partial E} \left(k_B \ln [N_e^{\text{sample}}(E, \mathbf{r})] \right)_{E_F}$$

[113] 여기서, $T_F(\mathbf{r})$ 은 소재의 위치 의존 정적으로 정의된 페르미

온도(position-dependent statistically-defined Fermi temperature)일 수 있다. 실제 소재의 새롭게 정의된 페르미 온도 $T_F(\mathbf{r})$ 는 3차원 자유 전자 가스

모델(three-dimensional free electron gas model)에만 적용할 수 있는 '페르미 온도' $T_F = E_F/k_B$ 의 일반화된 버전(generalized version)일 수 있다. 이 때, 제백 계수는

하기 수학식 11과 같이 나타낼 수 있다.

[114] 【수학식 11】

$$S(\mathbf{r}) = -\frac{\pi^2 k_B}{3 e} \frac{T}{T_F(\mathbf{r})}$$

[115] 상술한 수학식 11은 소재의 열 평형 온도(T) 및 페르미 온도 (T_F)의 비율(ratio)로 해석될 수 있다. 통계적으로 정의된 페르미 온도는 실제 온도가 아닌 소재 특성이고, $N_e^{\text{sample}}(E, \mathbf{r})$ 의 기울기에 따라 양수 또는 음수가 될 수 있다. 수학식

11에서 제백 계수는 개념적으로 전자 열 캐퍼시티(electronic heat capacity)

$$c_v = \pi^2 N_e(E_F) k_B^2 T / 3 \quad \text{및} \quad \text{열 전도성의 양자} \quad g_0 = \pi^2 k_B^2 T / 3 h$$

와 같은 소재의 전자 관련 열 특성에 연결될 수 있다. 예를 들어, 제백 계수 및 전자 열 캐퍼시티는 하기 수학식 12와 같이 표현될 수 있다.

[116] 【수학식 12】

$$S(\mathbf{r}) = \frac{c_v}{e} \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{1}{N_e^{\text{sample}}(E, \mathbf{r})} \right)_{E_F}$$

[117] 도 5A 내지 도 5D는 일 실시예에 따라 원시 독립 그래핀의 모형(model), 전자밀도(DOS, density of states), 반데르발스 에너지, 반데르발스 토포그래피를 도시할 수 있다.

[118] 도 5A는 원시 독립 그래핀(pristine free-standing graphene)의 공-막대모형(ball-and-stick model)을 나타낼 수 있다.

[119] 도 5B는 원시 독립 그래핀의 전자밀도를 나타낼 수 있다. 영 에너지(zero energy)는 전하 중성 지점(charge-neutrality point) 또는 디랙 포인트(Dirac point)(굵은 점선)를 지시할 수 있다. 가는 점선은 도 4에서 열전 시뮬레이션에 사용하지 위한 페르미 에너지(0.3eV)를 마킹할 수 있다.

[120]

$E^{vdw}(\mathbf{r})$ 의 컴퓨터 시뮬레이션된 이미지를 나타낼 수 있다.

- [121] 도 5D는 최소 에너지에서 반데르발스 토포그래피(topography) $z(\mathbf{r})$ 의 컴퓨터 시뮬레이션된 이미지를 나타낼 수 있다.
- [122] 도 6A 내지 도 6F는 일 실시예에 따라 국지적으로 평균화된 제백 계수, 반데르발스 에너지, 유효 온도 강하 간의 상관 관계, 열전 전압을 도시할 수 있다.
- [123] 도 6A는 $R = 0$ 옹스트롬 내에서 국지적으로 평균화된 제백 계수의 컴퓨터 시뮬레이션된 이미지를 나타낼 수 있다.
- [124] 도 6B는 $R = 0.3$ 옹스트롬 내에서 국지적으로 평균화된 제백 계수의 컴퓨터 시뮬레이션된 이미지를 나타낼 수 있다.
- [125] 도 6C는 $R = 0$ 옹스트롬으로부터 추론된 반데르발스 에너지 및 효과적인 온도 강하 간의 상관관계(correlation)를 나타낼 수 있다.
- [126] 도 6D는 $R = 0.3$ 옹스트롬으로부터 추론된 반데르발스 에너지 및 효과적인 온도 강하 간의 상관관계(correlation)를 나타낼 수 있다.
- [127] 도 6E는 $R = 0$ 옹스트롬에 대한 열전 전압의 재구성된 이미지를 나타낼 수 있다.
- [128] 도 6F는 $R = 0.3$ 옹스트롬에 대한 열전 전압의 재구성된 이미지를 나타낼 수 있다.
- [129] 도 7A 내지 도 9D는 일 실시예에 따라 결함 있는 독립 그래핀(defective freestanding graphene)의 모형, 전자밀도, 반데르발스 에너지 및 반데르발스 토포그래피를 도시할 수 있다.
- [130] 도 7A는 단일 탄소 공백(V_C)로 된 결함 있는 독립 그래핀의 공-막대 모형을 나타낼 수 있다.
- [131] 도 7B는 단일 탄소 공백(V_C)로 된 결함 있는 독립 그래핀의 전자밀도로 땀글링 결합된(dangling-bounded) C_3 원자의 국지 전자밀도가 나타날 수 있다. 영 에너지는 기존 디랙 포인트를 지시할 수 있다. 굵은 점선은 결함 있는 그래핀의 기존 페르미 에너지를 지시할 수 있다. 가는 점선은 열전 시뮬레이션(도 4A 내지 도 4D)에 사용되는 상승된 페르미 에너지($0.3eV$)를 지시할 수 있다.
- [132] 도 7C는 반데르발스 에너지 $E^{vdw}(\mathbf{r})$ 의 컴퓨터 시뮬레이션된 이미지를 나타낼 수 있다.
- [133] 도 7D는 최소 에너지에서 반데르발스 토포그래피 $z(\mathbf{r})$ 의 컴퓨터 시뮬레이션된 이미지를 나타낼 수 있다.
- [134] 도 8A 내지 도 8D는 일 실시예에 따라 단일 치환 질소 원자의 모형, 전자밀도, 반데르발스 에너지, 및 반데르발스 토포그래피를 도시할 수 있다.
- [135] 도 8A는 단일 치환 질소 원자(N_C)로 된 결함 있는 독립 그래핀의 공-막대 모형을 나타낼 수 있다.
- [136] 도 8B는 중간 굵기의 선으로 마킹된, 단일 치환 질소 원자(N_C)로 된 결함 있는

독립 그래핀의 전자밀도로 질소 원자 및 3개의 이웃 탄소 원자에 대한 국지 전자밀도를 나타낼 수 있다. 영 에너지는 디랙 포인트를 지시할 수 있다. 굵은 점선은 결합 있는 그래핀의 기존 페르미 에너지를 지시할 수 있다. 가는 점선은 열전 시뮬레이션(도 4B 내지 도 4E)에 사용되는 페르미 에너지(0.3eV)를 지시할 수 있다.

[137] 도 8C는 반데르발스 에너지 $E^{vdw}(\mathbf{r})$ 의 컴퓨터 시뮬레이션된 이미지를 나타낼

수 있다.

[138] 도 8D는 최소 에너지에서 반데르발스 토포그래피 $z(\mathbf{r})$ 의 컴퓨터 시뮬레이션된 이미지를 나타낼 수 있다.

[139] 도 9A 내지 도 9D는 일 실시예에 따라 V_C-O_C 결합 있는 독립 그래핀의 모형, 전자밀도, 반데르발스 에너지 및 반데르발스 토포그래피를 도시할 수 있다.

[140] 도 9A는 결합 복합체 V_C-O_C 로 된 결합 있는 독립 그래핀의 공-막대 모형을 나타낼 수 있다. 여기서 산소 원자는 진한 색으로 마킹될 수 있다.

[141] 도 9B는 결합 복합체 V_C-O_C 로 된 결합 있는 독립 그래핀의 전자밀도로 공백(vacancy) 주변의 원자에 대한 국지 전자상태를 나타낼 수 있다. 영 에너지는 기존 디랙 포인트를 지시할 수 있다. 굵은 점선은 결합 있는 그래핀의 기존 페르미 에너지를 지시할 수 있다. 가는 점선은 열전 시뮬레이션(도 4C 내지 도 4F)에 사용되는 페르미 에너지(0.3eV)를 지시할 수 있다.

[142] 도 9C는 반데르발스 에너지 $E^{vdw}(\mathbf{r})$ 의 컴퓨터 시뮬레이션된 이미지를 나타낼

수 있다.

[143] 도 9D는 최소 에너지에서 반데르발스 토포그래피 $z(\mathbf{r})$ 의 컴퓨터 시뮬레이션된 이미지를 나타낼 수 있다.

[144] 도 10A 내지 도 10D는 일 실시예에 따라 V_C-O_C 결합 복합체에 대한 시뮬레이션된 열전 전압 이미지, 그에 대응하는 고속 푸리에 변환(FFT, Fast Fourier Transform) 이미지, 실험적 열전 이미지, 및 그에 대응하는 고속 푸리에 변환 이미지를 도시할 수 있다.

[145] 도 10A는 $V_{diff} = -0.6$ mV로 가정하여 컴퓨터 시뮬레이션된 V_C-O_C 결합

복합체에 대한 열전 전압의 이미지를 나타낼 수 있다.

[146] 도 10B는 도 10A의 이미지의 고속 푸리에 변환 이미지를 나타낼 수 있다. 도 10B에서 화살표 A는 역격자에 해당하고, 화살표 B는 페르미 파 벡터(Fermi wave vector) k_F 의 인터벨리산란(intervalley scattering)에 기인한다.

[147] 도 10C는 도 3A에 도시된 실험적 열전 이미지에 대응할 수 있다.

[148] 도 10D는 도 10C에 도시된 이미지의 고속 푸리에 변환 이미지일 수 있다. 도 10D에서 화살표 A는 역격자에 해당하고, 화살표 B는 페르미 파 벡터(Fermi wave vector) k_F 의 인터벨리산란(intervalley scattering)에 기인한다. 화살표 C는

SiC(0001) 표면의 $6\sqrt{3}\times 6\sqrt{3}R30^\circ$ 재구성(reconstruction)으로부터 유래된 것이다.

- [149] 이상 첨부 도면을 참조하여 본 발명에 대해서 설명하였지만 본 발명의 권리범위는 후술하는 특허청구범위에 의해서 결정되며 전술한 설명에 제한되는 것으로 해석되어서는 아니된다. 그리고 특허청구범위에 기재된 발명의, 당업자에게 자명한 개량, 변경 및 또는 수정도 본 발명의 권리범위에 포함된다는 점이 이해되어야 한다.

청구범위

[청구항 1]

원자수준-해상도(atomic-resolution) 주사 제백 현미경 이미지(scanning seebeck microscope image)의 컴퓨터 원용 시뮬레이션 방법(computer-aided simulation method)으로서, 소재 표면에서 전압 탐침(voltage probe)의 위치 \mathbf{r} 에 대응하는 상기 주사 제백 현미경 이미지를 획득하기 위해, 상기 전압 탐침의 위치 \mathbf{r} 에 대한 국지 열전 전압(local thermoelectric voltage; $V(\mathbf{r})$)을 하기 수학적식에 의해 컴퓨터가 계산하는, 시뮬레이션 방법.

$$V(\mathbf{r}) = V_{\text{diff}} + S_{\text{coh}}(\mathbf{r}) \int \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}'$$

여기에서,

V_{diff} : 팁(tip)과 샘플(sample)에서 확산 수송 영역(diffusive transport region)에서의 열전 전압 강하(thermoelectric voltage drop)

$S_{\text{coh}}(\mathbf{r})$: 위치-의존 제백 계수(position-dependent Seebeck coefficient)

\mathbf{r} : 점 형태의 탐침으로부터 측정된 거리

\mathbf{r}' : 소재 내부 좌표

$\nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$: $1/r^2$ 의 팩터(factor)에 의해 반경 방향으로 가중된 온도

구배(temperature gradient)

$\int \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}'$: 온도 프로파일의 부피 적분

[청구항 2]

제1항에 있어서,

상기 온도 프로파일의 부피 적분 $\int \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}'$ 은 하기 수학적식에

의해 정의되는,

시뮬레이션 방법.

$$\int \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}' = \Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$$

여기에서,

$\Delta T_{\text{coh}}(\mathbf{r})$: 상기 팁과 상기 샘플 간의 계면(interface)에서의 유효 온도 강하(effective temperature drop)

[청구항 3]

제1항에 있어서,

상기 위치-의존 제백 계수 $S_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 는 하기 수학적식에 의해 계산되는,

시뮬레이션 방법.

$$S_{\text{coh}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{eT} \frac{\int t^{el}(E, \mathbf{r})(E - E_F) \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE}{\int t^{el}(E, \mathbf{r}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE}$$

여기에서,

e : 전자 전하량

T : 절대 온도

t^{el} : 전자 투과 확률(electron transmission probability)

E_F : 페르미 에너지

f : 온도 T 에서 페르미-디랙 분포 함수(Fermi-Dirac distribution function)

[청구항 4]

제1항에 있어서,

상기 위치-의존 제백 계수 $S_{\text{coh}}(\mathbf{r})$ 는 란다우어 공식으로부터 하기

수학식으로 도출되는,

시뮬레이션 방법.

$$S_{\text{coh}}(\mathbf{r}) = S^{\text{tip}} + S^{\text{sample}}(\mathbf{r})$$

여기에서,

S^{tip} : 팁 제백 계수

$S^{\text{sample}}(\mathbf{r})$: 소재의 샘플 제백 계수

[청구항 5]

제4항에 있어서,

상기 샘플 제백 계수 $S^{\text{sample}}(\mathbf{r})$ 는, 하기 수학식에 의해 정의되는,

시뮬레이션 방법.

$$S^{\text{sample}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{eT} \frac{\int N_e^{\text{sample}}(E, \mathbf{r})(E - E_F) \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE}{\int N_e^{\text{sample}}(E, \mathbf{r}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE}$$

여기에서,

e : 전자 전하량

T : 절대 온도

E_F : 페르미 에너지

f : 온도 T 에서 페르미-디랙 분포 함수(Fermi-Dirac distribution function)

$N_e^{\text{sample}}(E, \mathbf{r})$: 소재 표면(material surface)에 대한 제일원리

계산(first-principles Calculations)으로부터 획득한 전자의 국지 밀도(local density of states)

[청구항 6]

제2항에 있어서,

상기 유효 온도 강하 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 는 하기 수학식에 의해 계산되는, 시뮬레이션 방법.

$$\Delta T_{coh}(\mathbf{r}) = \frac{\Delta Q}{\pi^2 k_B^2 T} \frac{3h}{\tau^{ph}(\mathbf{r})}$$

여기에서,

k_B : 볼츠만 상수(Boltzmann constant)

$\tau^{ph}(\mathbf{r})$: 팁-샘플 접합의 포논 투과 확률

[청구항 7]

제2항에 있어서,

상기 유효 온도 강하 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 는 실험적인 $J^{exp}(\mathbf{r})$ 및 이론적인

$S_{coh}^{theory}(\mathbf{r})$ 에 기초하여 하기 수학식에 의해 유도되는,

시뮬레이션 방법.

$$\Delta T_{coh}(\mathbf{r}) = \frac{V^{exp}(\mathbf{r}) - V_{diff}}{S_{coh}^{theory}(\mathbf{r})}$$

여기에서,

$J^{exp}(\mathbf{r})$: 무결함 영역(defect-free region)에 대해 측정된 열전 전압

$S_{coh}^{theory}(\mathbf{r})$: 소재의 이론적인 제벡 계수

[청구항 8]

제2항에 있어서,

상기 유효 온도 강하 $\Delta T_{coh}(\mathbf{r})$ 는 반데르발스 에너지 $E^{vdw}(\mathbf{r})$ 와의

상관관계(correlation)에 기초한 함수인 하기 수학식에 의해 추론(deduce)되는,

시뮬레이션 방법.

$$\Delta T_{coh}(\mathbf{r}) = f(E^{vdw}(\mathbf{r}))$$

여기에서,

$f(E^{vdw}(\mathbf{r}))$: 선형 피팅 공식 또는 지수 함수를 포함하는 함수

[청구항 9]

주사 제벡 현미경 이미지의 컴퓨터 원용 시뮬레이션 방법으로서, 소재 표면에서 전압 탐침의 위치 \mathbf{r} 에 대응하는 상기 주사 제벡 현미경 이미지를 획득하기 위해, 상기 전압 탐침의 위치 \mathbf{r} 에 대한 국지 열전 전압 $V(\mathbf{r})$ 을 하기 수학식에 의해 컴퓨터가 계산하는,

시뮬레이션 방법.

$$V(\mathbf{r}) = \int S(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} d^3 \mathbf{r}'$$

여기에서,

$S(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$: 국지 제백 계수

$\nabla T(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$: $1/r^2$ 의 팩터(factor)에 의해 반경 방향으로 가중된 온도

구배

r : 점 형태의 탐침으로부터 측정된 거리

r' : 소재 내부 좌표

[청구항 10]

주사 제백 현미경 이미지의 컴퓨터 원용 시뮬레이션 방법에 있어서,

컴퓨터가 소재의 소정의 국지 영역에 대한 이미지를 표시하기 위한 열전압을 제백 계수 및 탐침과 상기 소재의 표면 사이의 온도 변화에 기초하여 계산하는,

시뮬레이션 방법.

[청구항 11]

제10항에 있어서,

상기 제백 계수는,

전자 전하량, 절대온도, 페르미 에너지 및 페르미-디랙 분포 함수 중 적어도 하나에 기초하여 상기 컴퓨터에 의해 계산되는,

시뮬레이션 방법.

[청구항 12]

제10항에 있어서,

상기 제백 계수는,

전기 전도성, 전자 투과 확률 및 국지 전자 밀도 중 적어도 하나에 기초하여 상기 컴퓨터에 의해 계산되는,

시뮬레이션 방법.

[청구항 13]

제10항에 있어서,

상기 제백 계수는,

상기 소재의 고유 특성을 포함하는,

시뮬레이션 방법.

[청구항 14]

제10항에 있어서,

상기 탐침과 상기 소재의 표면 사이의 온도 변화는,

열 전도성, 포논 투과 확률 및 탐침-소재 상호작용 중 적어도 하나에 기초하여 상기 컴퓨터에 의해 계산되는, ,

시뮬레이션 방법.

[청구항 15]

제10항에 있어서,

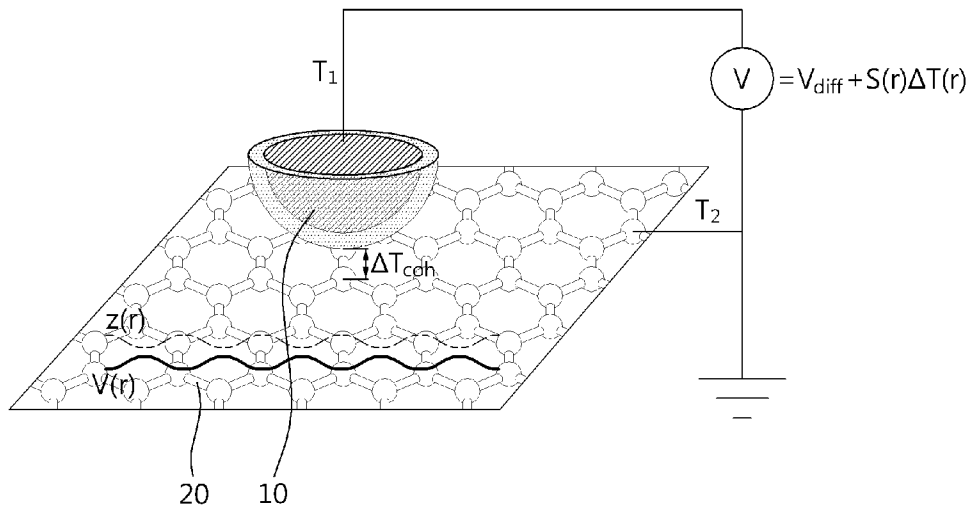
상기 소재는,

그래핀(graphene)을 포함하는,

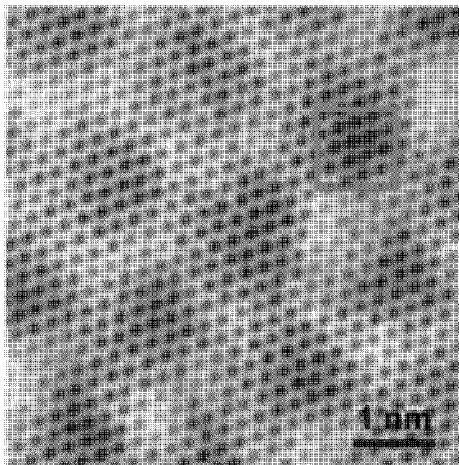
[청구항 16]

시플레이션 방법.
제10항에 있어서,
상기 열전압은,
상기 탐침의 제1 온도 및 상기 소재의 제2 온도 간의 온도 차이에
의해서 발생하는,
시플레이션 방법.

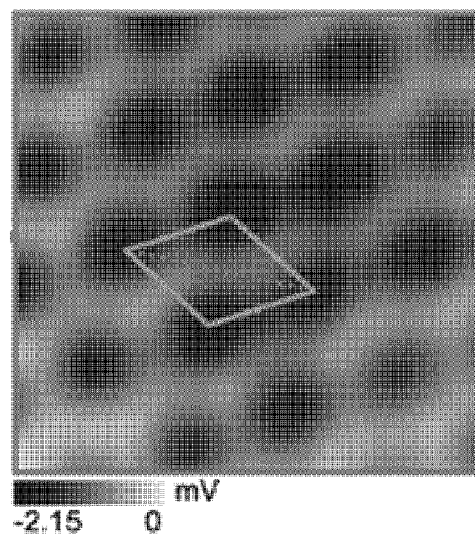
[Fig. 1]



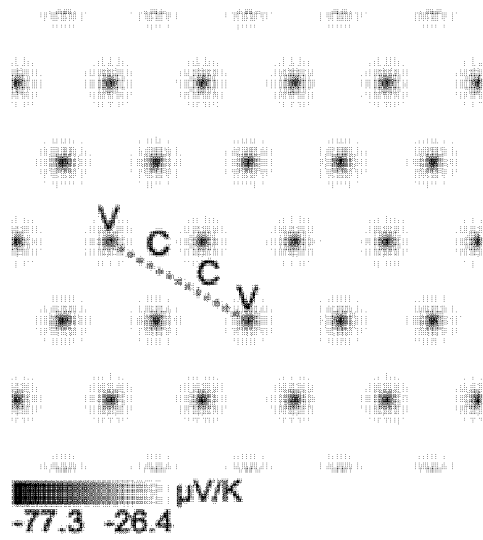
[Fig. 2a]



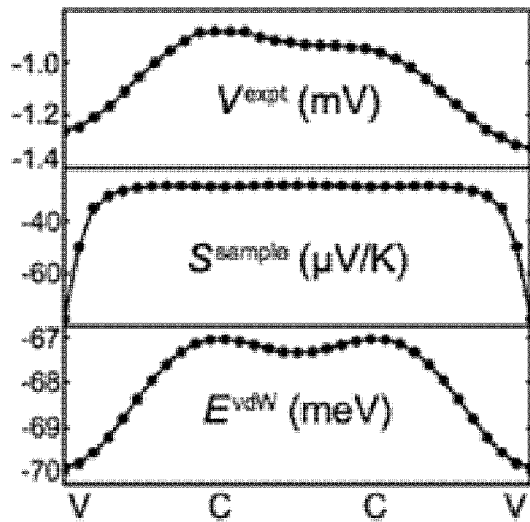
[Fig. 2b]



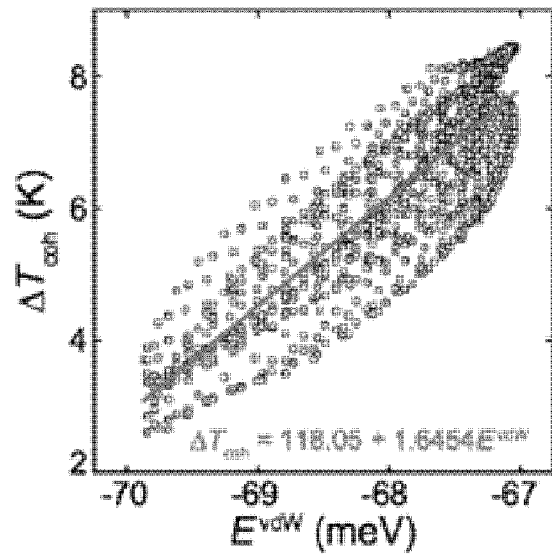
[Fig. 2c]



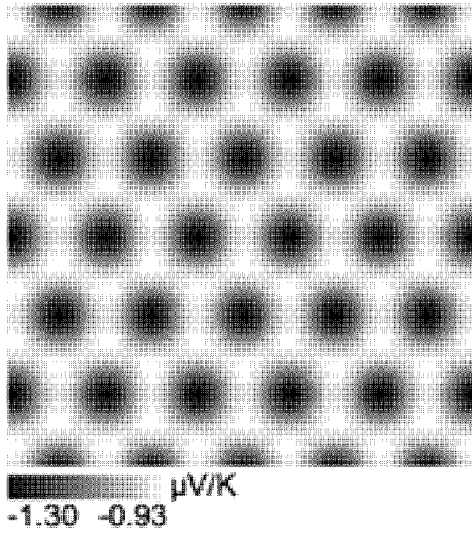
[Fig. 2d]



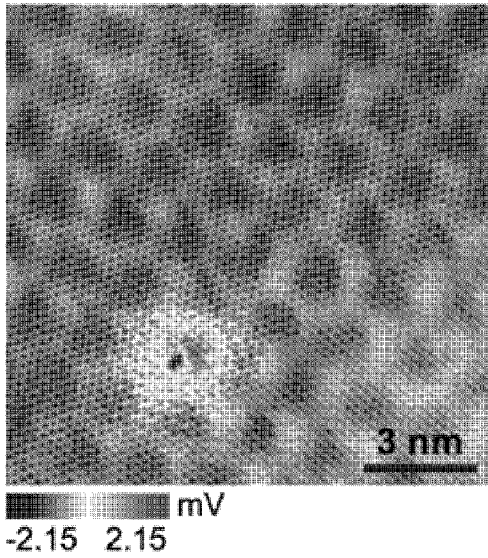
[Fig. 2e]



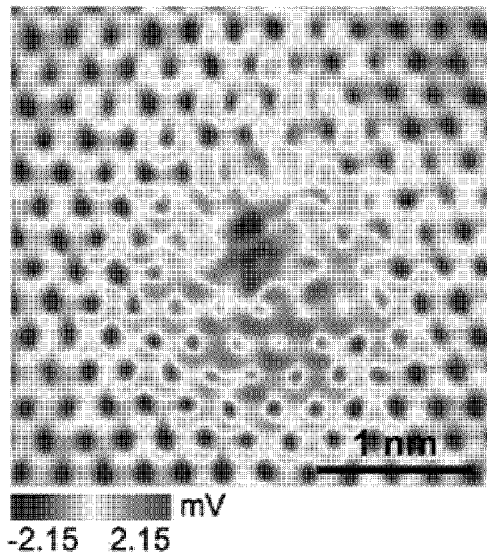
[Fig. 2f]



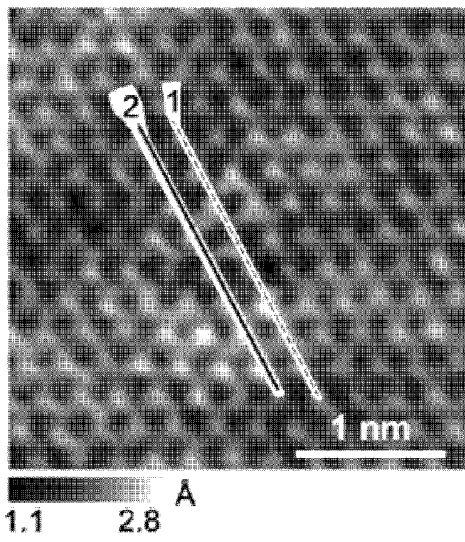
[Fig. 3a]



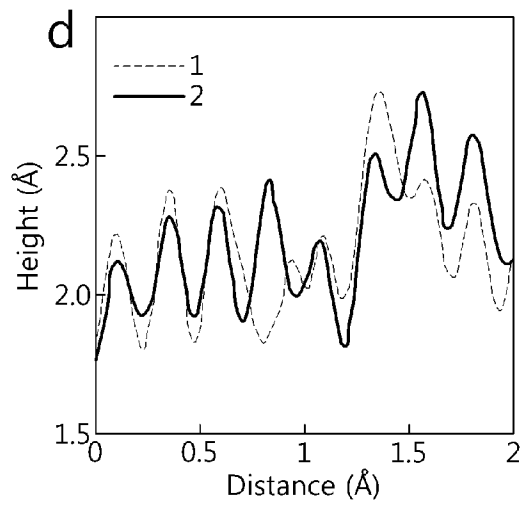
[Fig. 3b]



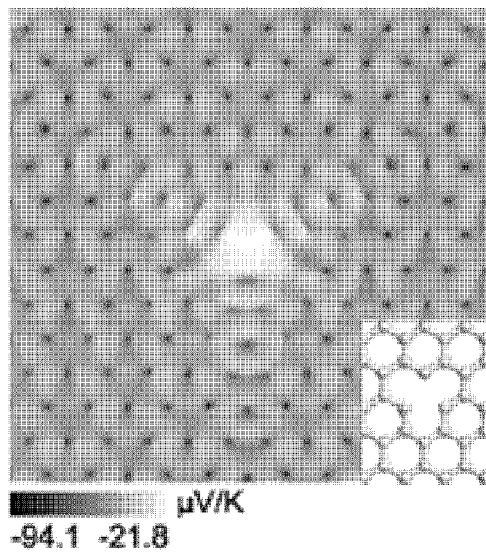
[Fig. 3c]



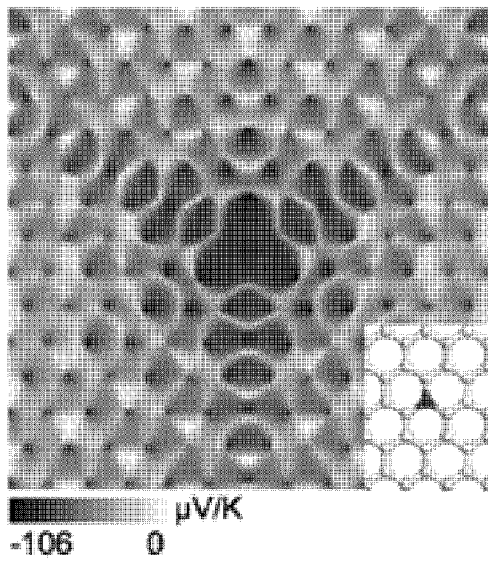
[Fig. 3d]



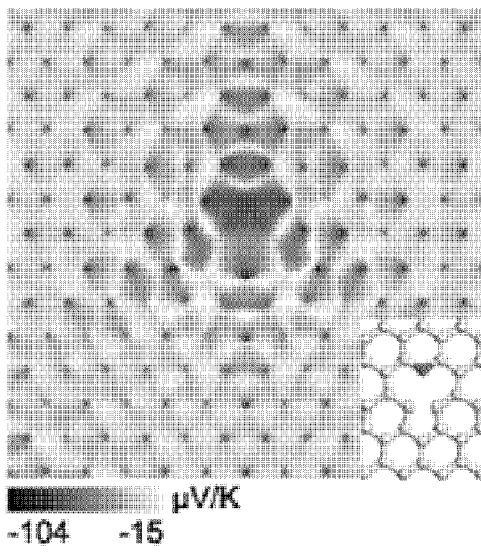
[Fig. 4a]



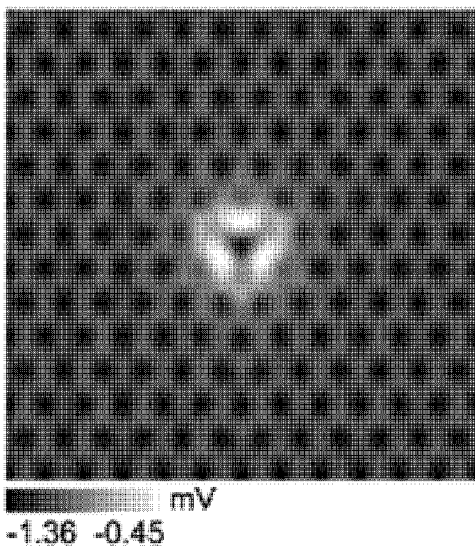
[Fig. 4b]



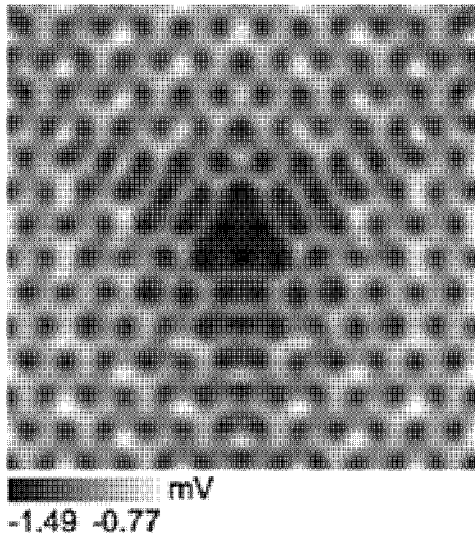
[Fig. 4c]



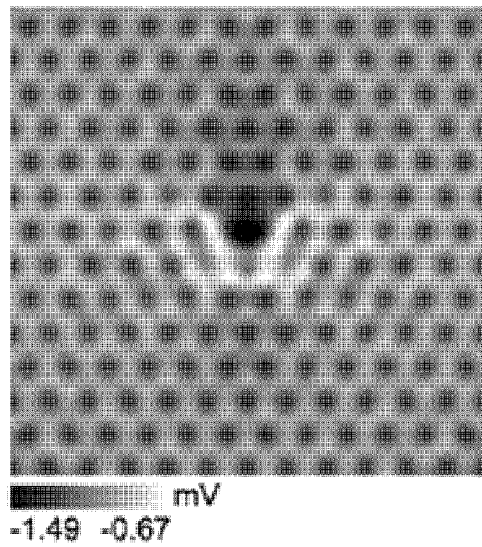
[Fig. 4d]



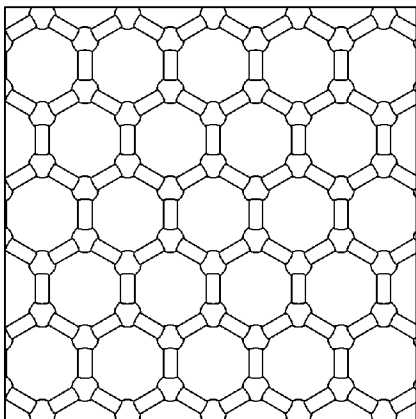
[Fig. 4e]



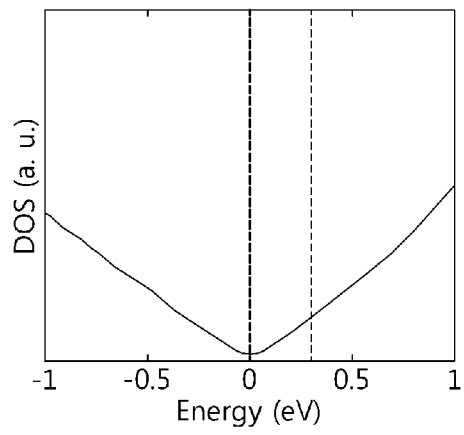
[Fig. 4f]



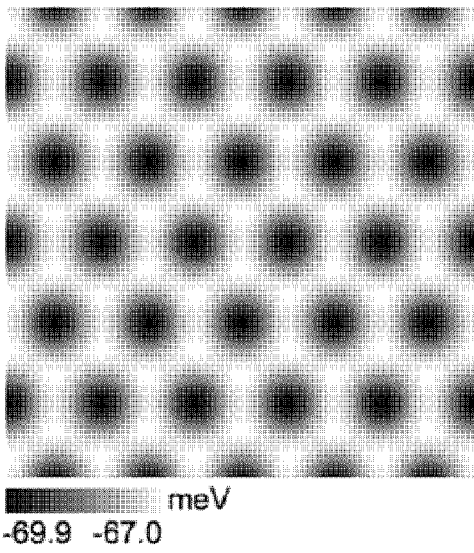
[Fig. 5a]



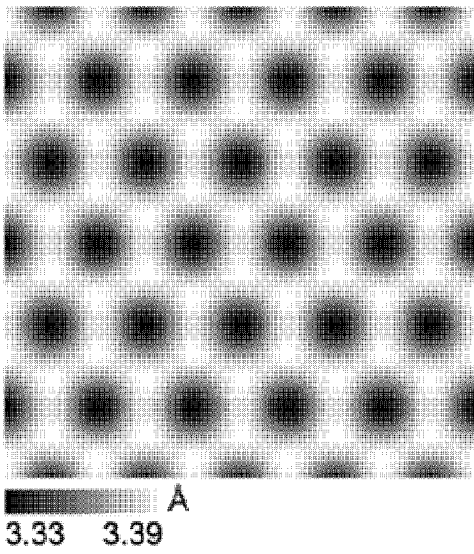
[Fig. 5b]



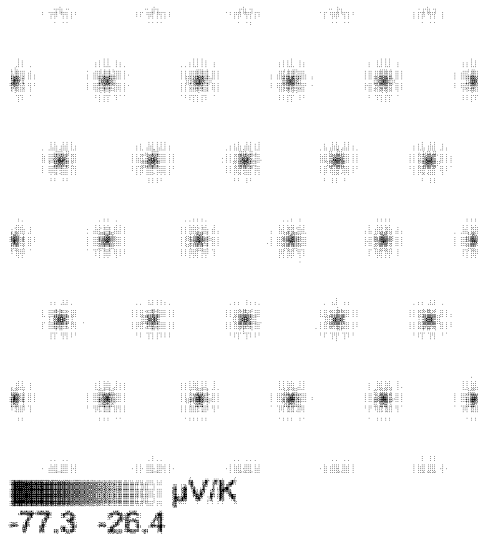
[Fig. 5c]



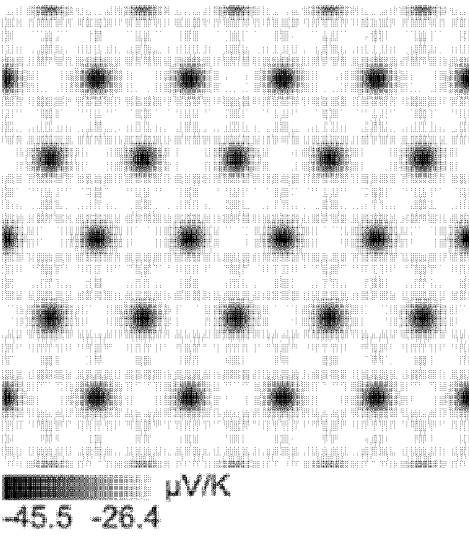
[Fig. 5d]



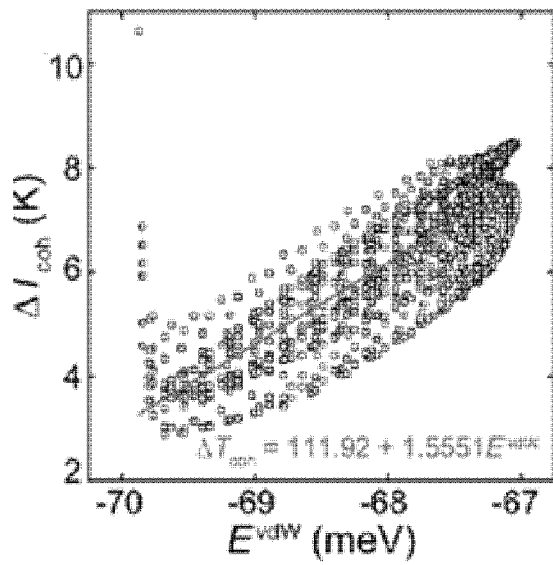
[Fig. 6a]



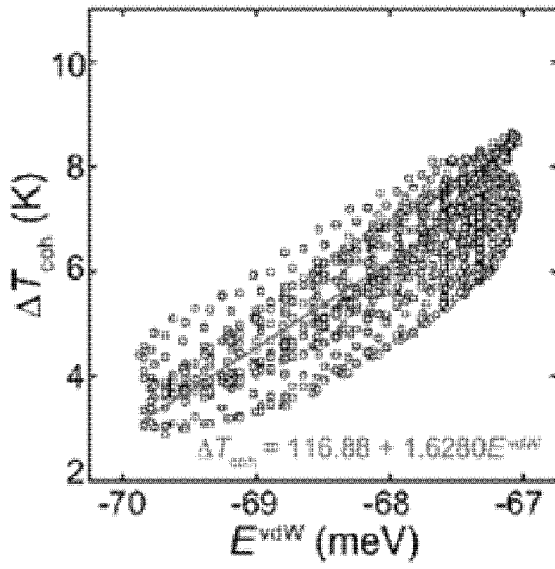
[Fig. 6b]



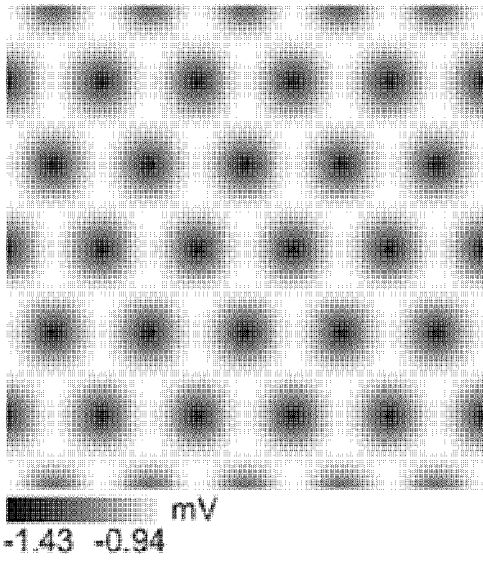
[Fig. 6c]



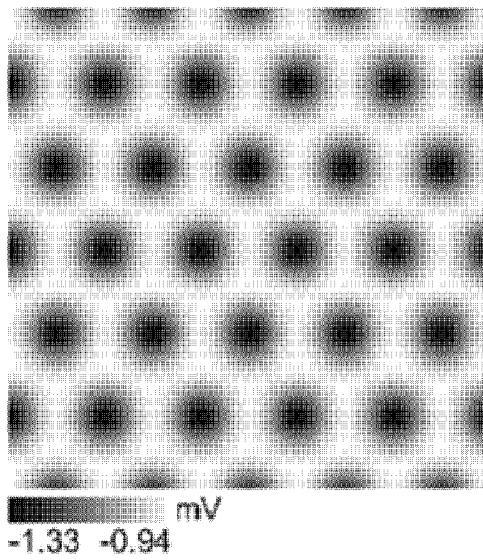
[Fig. 6d]



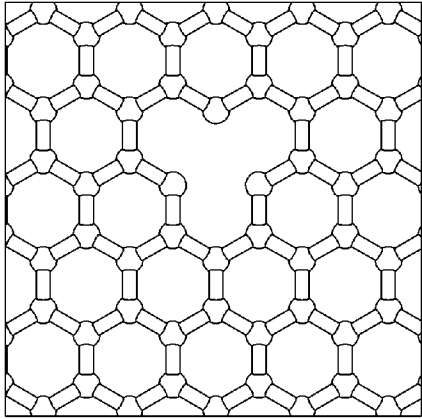
[Fig. 6e]



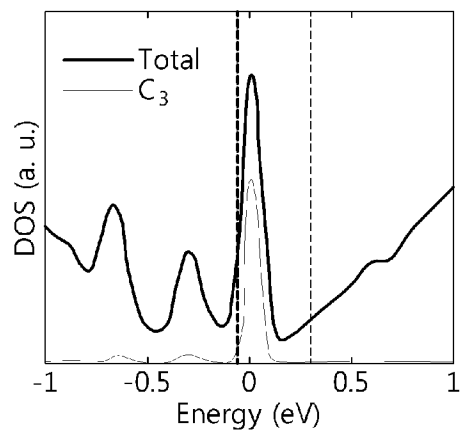
[Fig. 6f]



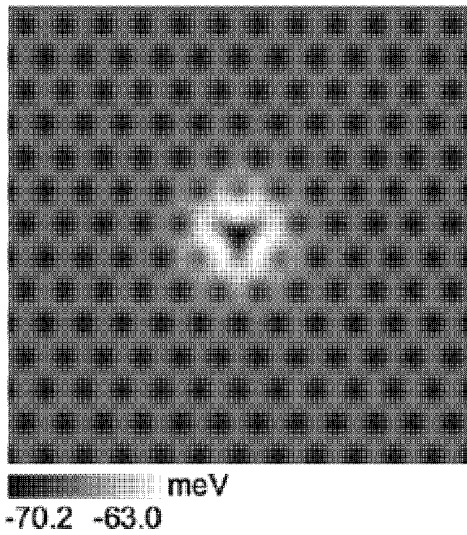
[Fig. 7a]



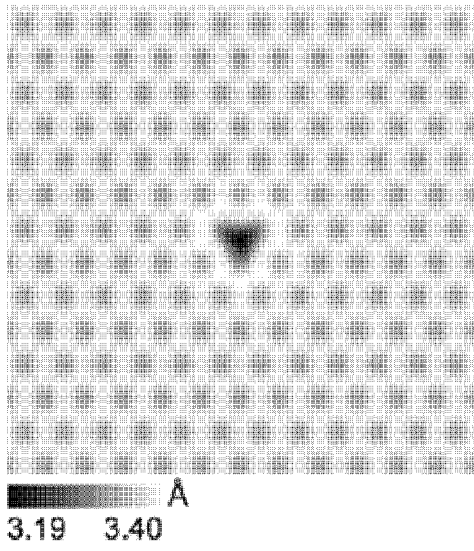
[Fig. 7b]



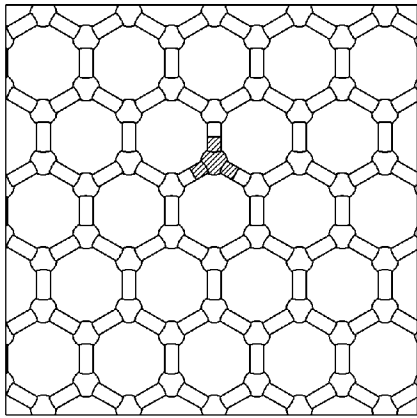
[Fig. 7c]



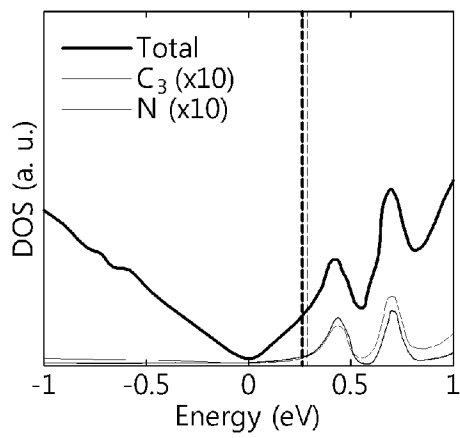
[Fig. 7d]



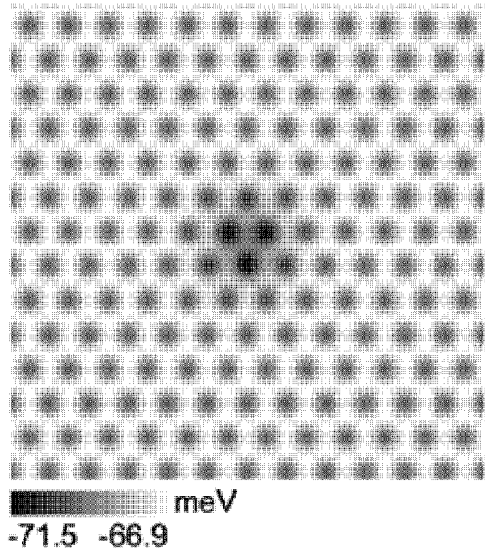
[Fig. 8a]



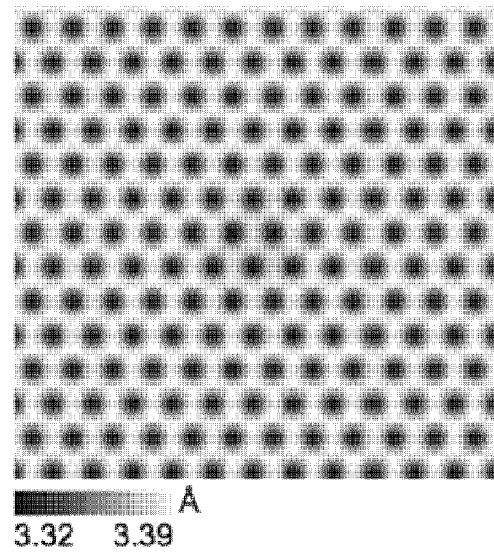
[Fig. 8b]



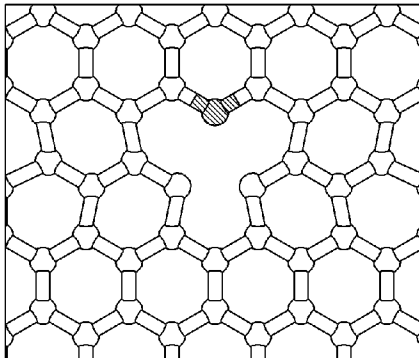
[Fig. 8c]



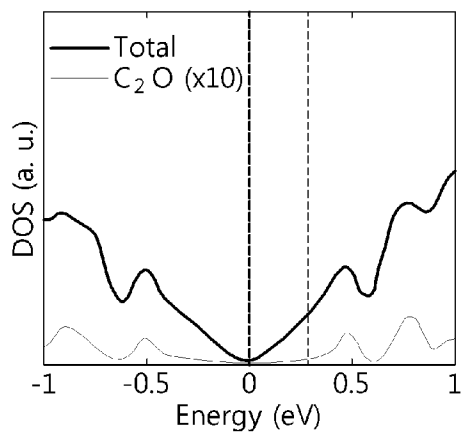
[Fig. 8d]



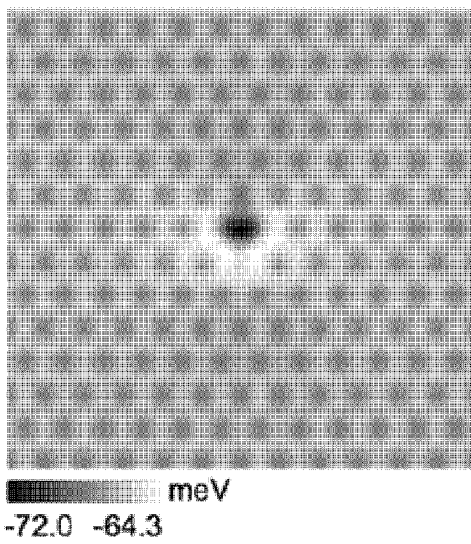
[Fig. 9a]



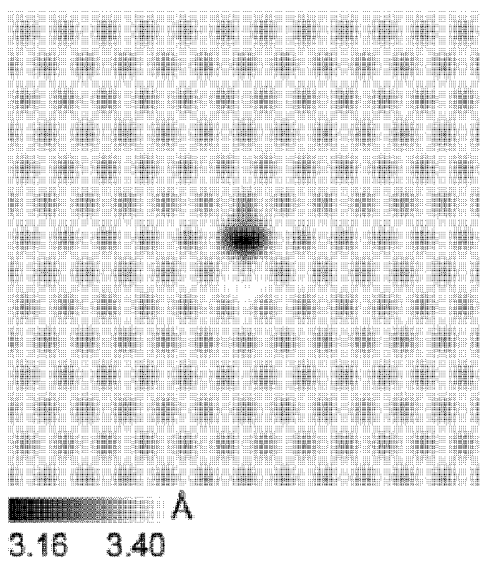
[Fig. 9b]



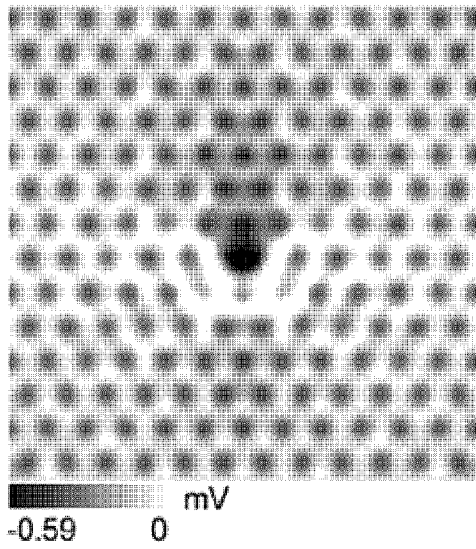
[Fig. 9c]



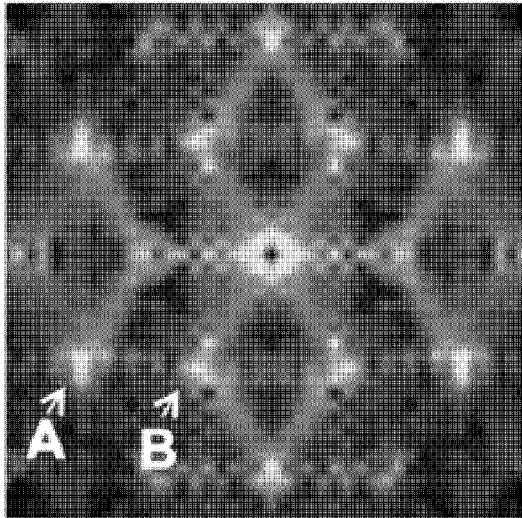
[Fig. 9d]



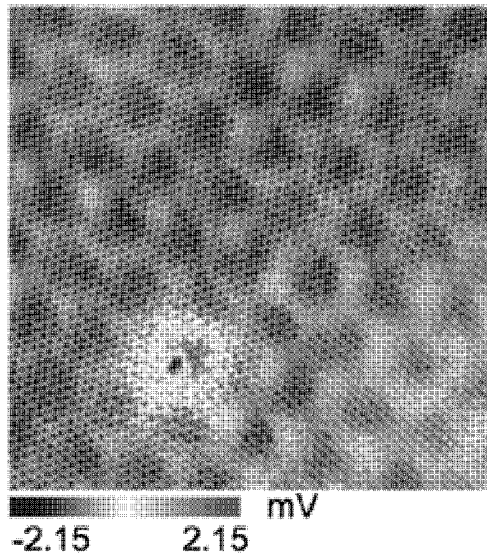
[Fig. 10a]



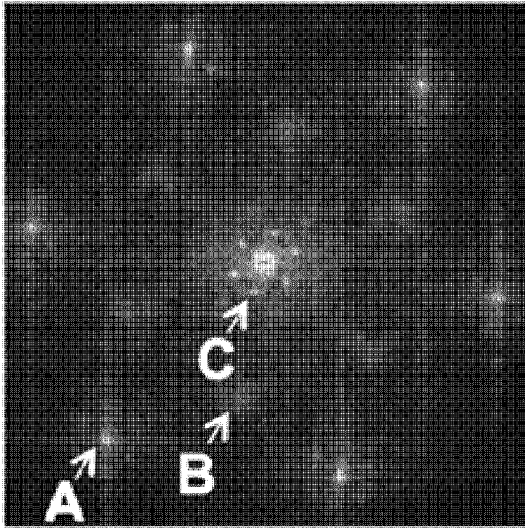
[Fig. 10b]



[Fig. 10c]



[Fig. 10d]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2014/005043

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G01Q 30/04(2010.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G01Q 30/04; C23C 14/00; H01L 35/30; H01L 35/18; G01K 7/02; H01L 35/28; G01N 25/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: seebek(seebek), microscopy, local thermoelectric voltage, prove and simulation

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	US 6467951 B1 (GHOSHAL, Uttam Shyamalindu) 22 October 2002 See column 1, line 38-column 1, line 63, column 4, line 8-column 4, line 14 and figure 1.	10-16
A		1-9
Y	HUZEL, D. et al. Nanowires-Implementations and Applications. InTech, 18 July 2011, ISBN 978-953-307-318-7 See page 299, 4. seebeck coefficient and page 300, formula (4).	10-16
A	US 2009-0014047 A1 (SPAN, Gerhard) 15 January 2009 See paragraphs [0030]-[0035] and figure 8.	1-16
A	EP 1326292 A1 (SUMITOMO SPECIAL METALS COMPANY LIMITED) 09 July 2003 See paragraphs [0010]-[0017] and figure 1B.	1-16
A	US 2006-0151021 A1 (STARK, Ingo) 13 July 2006 See paragraphs [0014]-[0026] and figure 1.	1-16

 Further documents are listed in the continuation of Box C. See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"I" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family


Date of the actual completion of the international search

12 SEPTEMBER 2014 (12.09.2014)

Date of mailing of the international search report

15 SEPTEMBER 2014 (15.09.2014)

Name and mailing address of the ISA/KR


 Korean Intellectual Property Office
 Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701,
 Republic of Korea

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2014/005043

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
US 6467951 B1	22/10/2002	JP 2002-131211 A	09/05/2002
		JP 3468300 B2	17/11/2003
		US 6487515 B1	26/11/2002
US 2009-0014047 A1	15/01/2009	AT 505168 A4	15/11/2008
		AT 505168 B1	15/11/2008
		CN 101335324 A	31/12/2008
		CN 101335324 B	18/04/2012
		EP 2009709 A2	31/12/2008
		EP 2009709 A3	18/05/2011
		JP 2009-016831 A	22/01/2009
		JP 4881919 B2	22/02/2012
		KR 10-1175386 B1	20/08/2012
		KR 10-2009-0003124 A	09/01/2009
		RU 2008126318 A	10/01/2010
		RU 2419919 C2	27/05/2011
		US 2013-0042900 A1	21/02/2013
		US 8373057 B2	12/02/2013
		US 8766083 B2	01/07/2014
EP 1326292 A1	09/07/2003	EP 1326292 A4	14/02/2007
		JP 2002-064228 A	28/02/2002
		WO 02-17406 A1	28/02/2002
US 2006-0151021 A1	13/07/2006	AU 2004-241965 A1	02/12/2004
		AU 2004-241965 B2	19/11/2009
		AU 2007-215413 A1	23/08/2007
		CA 2526270 A1	02/12/2004
		CA 2641697 A1	23/08/2007
		CN 100499192 C	10/06/2009
		CN 101449402 A	03/06/2009
		CN 101449402 B	16/03/2011
		CN 1836340 A0	20/09/2006
		EP 1625629 A1	15/02/2006
		EP 1625629 A4	13/12/2006
		EP 1994572 A2	26/11/2008
		EP 1994572 A4	11/11/2009
		EP 1994572 B1	21/11/2012
		JP 2007-500951 A	18/01/2007
		JP 2009-526401 A	16/07/2009
		JP 4290197 B2	01/07/2009
		MX 2008010241 A	05/03/2009
		US 2004-0231714 A1	25/11/2004
		US 2005-0252543 A1	17/11/2005
		US 2009-025771 A1	29/01/2009
		US 6958443 B2	25/10/2005
		US 7629531 B2	08/12/2009
US 8269096 B2	18/09/2012		
WO 2004-105143 A1	02/12/2004		

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2014/005043

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
		WO 2007-095028 A2	23/08/2007
		WO 2007-095028 A3	18/12/2008

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) G01Q 30/04(2010.01)i		
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) G01Q 30/04; C23C 14/00; H01L 35/30; H01L 35/18; G01K 7/02; H01L 35/28; G01N 25/00 조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 제백(seebek), 현미경, 열전 전압, 탐침 및 시뮬레이션		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
Y	US 6467951 B1 (GHOSHAL, UTTAM SHYAMALINDU) 2002.10.22 컬럼 1, 라인 38-컬럼 1, 라인 63, 컬럼 4, 라인 8-컬럼 4, 라인 14 및 도면 1 참조.	10-16
A		1-9
Y	HUZEL, D. et al. Nanowires-Implementations and Applications. InTech, 2011.07.18 , ISBN 978-953-307-318-7 페이지 299, 4. seebeck coefficient 및 페이지 300, 식(4) 참조.	10-16
A	US 2009-0014047 A1 (SPAN, GERHARD) 2009.01.15 문단 [0030]-[0035] 및 도면 8 참조.	1-16
A	EP 1326292 A1 (SUMITOMO SPECIAL METALS COMPANY LIMITED) 2003.07.09 문단 [0010]-[0017] 및 도면 1B 참조.	1-16
A	US 2006-0151021 A1 (STARK, INGO) 2006.07.13 문단 [0014]-[0026] 및 도면 1 참조.	1-16
<input type="checkbox"/> 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. <input checked="" type="checkbox"/> 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일 2014년 09월 12일 (12.09.2014)	국제조사보고서 발송일 2014년 09월 15일 (15.09.2014)	
ISA/KR의 명칭 및 우편주소  대한민국 특허청 (302-701) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-472-7140	심사관 배근태 전화번호 +82-42-481-5580 	

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
US 6467951 B1	2002/10/22	JP 2002-131211 A JP 3468300 B2 US 6487515 B1	2002/05/09 2003/11/17 2002/11/26
US 2009-0014047 A1	2009/01/15	AT 505168 A4 AT 505168 B1 CN 101335324 A CN 101335324 B EP 2009709 A2 EP 2009709 A3 JP 2009-016831 A JP 4881919 B2 KR 10-1175386 B1 KR 10-2009-0003124 A RU 2008126318 A RU 2419919 C2 US 2013-0042900 A1 US 8373057 B2 US 8766083 B2	2008/11/15 2008/11/15 2008/12/31 2012/04/18 2008/12/31 2011/05/18 2009/01/22 2012/02/22 2012/08/20 2009/01/09 2010/01/10 2011/05/27 2013/02/21 2013/02/12 2014/07/01
EP 1326292 A1	2003/07/09	EP 1326292 A4 JP 2002-064228 A WO 02-17406 A1	2007/02/14 2002/02/28 2002/02/28
US 2006-0151021 A1	2006/07/13	AU 2004-241965 A1 AU 2004-241965 B2 AU 2007-215413 A1 CA 2526270 A1 CA 2641697 A1 CN 100499192 C CN 101449402 A CN 101449402 B CN 1836340 A0 EP 1625629 A1 EP 1625629 A4 EP 1994572 A2 EP 1994572 A4 EP 1994572 B1 JP 2007-500951 A JP 2009-526401 A JP 4290197 B2 MX 2008010241 A US 2004-0231714 A1 US 2005-0252543 A1 US 2009-025771 A1 US 6958443 B2 US 7629531 B2 US 8269096 B2 WO 2004-105143 A1	2004/12/02 2009/11/19 2007/08/23 2004/12/02 2007/08/23 2009/06/10 2009/06/03 2011/03/16 2006/09/20 2006/02/15 2006/12/13 2008/11/26 2009/11/11 2012/11/21 2007/01/18 2009/07/16 2009/07/01 2009/03/05 2004/11/25 2005/11/17 2009/01/29 2005/10/25 2009/12/08 2012/09/18 2004/12/02

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
		WO 2007-095028 A2	2007/08/23
		WO 2007-095028 A3	2008/12/18