

## 비행시간형 직충돌 이온산란 분광법을 이용한 Si(100) 면의 구조해석

황 연<sup>†</sup> · 이태근

서울산업대학교 신소재공학과  
(2003년 5월 29일 접수; 2003년 7월 7일 승인)

### Si(100) Surface Structure Studied by Time-Of-Flight Impact-Collision Ion Scattering Spectroscopy

Yeon Hwang<sup>†</sup> and Tae-Kun Lee

Department of Materials Science and Engineering, Seoul National University of Technology, Seoul 139-743, Korea  
(Received May 29, 2003; Accepted July 7, 2003)

#### 초 록

2 keV의 저에너지 He<sup>+</sup> 이온을 사용한 비행시간형 직충돌 이온산란 분광법을 이용하여 Si(100) 표면의 원자구조를 해석하였다. [011] 방위를 따라 이온빔을 입사시키고, 입사 각도에 따른 산란된 이온의 강도를 측정하였다. 20°, 28°, 46°, 63°, 80° 등의 5가지 입사각도에서 집속 효과가 일어났다. 이 각도를 설명하기 위해 그림자 원뿔을 계산하여 원자의 위치를 조사하였으며, 이 결과는 실험과 잘 일치하였다. 28°, 46°, 63° 및 80°에서 일어나는 4개의 집속 효과는 표면 최외층에서 이합체가 자리하지 않는 {011}면을 따라서 발생한 것이며 벌크 구조가 반영된 결과이다. 그 반면에 이합체를 이루는 원자 사이에서 발생한 산란은 20°에서 집속 효과를 나타내었다.

#### ABSTRACT

Time-Of-Flight Impact-Collision Ion Scattering Spectroscopy (TOF-ICISS) using 2 keV He<sup>+</sup> ion was applied to study the geometrical structure of the Si(100) surface. The scattered ion intensity was measured along the [011] azimuth varying the incident angle. The focusing effects were appeared at the incident angles of 20°, 28°, 46°, 63°, and 80°. The Si atomic position was simulated by calculating the shadow cone to explain the five focusing effects. The four focusing effects at 28°, 46°, 63°, and 80° resulted from the {011} surface where no dimers existed on the outermost surface. On the contrary, the scattering between two Si atoms in a dimer resulted in the focusing peak at 20°.

**Key words :** Atomic structure, Si(100) surface, Impact-collision ion scattering spectroscopy, Time-of-flight

#### 1. 서 론

실리콘은 메모리나 집적회로와 같은 반도체 산업에서 필수 불가결한 재료로서 단결정 Si의 표면구조에 대하여 많은 연구가 이루어졌으며, 지금까지 Si(100) 면의 구조를 결정하기 위하여 많은 이론적인 또는 실험적인 연구가 이루어져 왔다. 반도체 표면은 3차원적 대칭성이 한 방향으로 깨져 있어서 띠틈(band gap) 내에 미결합(dangling bond)이 존재하게 된다. 이는 결합성 궤도에 비하여 에너지가 높으므로 이를 완화하기 위해 궤도의 재혼성이나 표면 원자 사이에 재결합을 일으키는데, Si(100) 면의 경우 최외층 원자가 이합체(dimer) 구조를 이룸으로써 에너지를 낮추고 미결합을 반으로 줄인다고 알려져 있다.<sup>1)</sup>

Si(100) 이합체의 표면구조 해석은 주로 LEED나 RHEED와 같은 회절법<sup>2)</sup> 및 최근의 STM과 같은 방법으로 연구되었다.<sup>3)</sup> 이온 산란을 이용하여 Si(100) 면에 대하여 몇몇 연구가 이루어진 바 있으나 고에너지(0.1~2.0 MeV) 이온이나 중에너지(20~200 keV) 이온을 사용하여 주로 표면에 국부적으로 존재하는 변형을 측정하는데 그쳤다.<sup>4,5)</sup> 이에 반하여 본 연구에서는 2 keV의 저에너지 이온 산란법을 사용하였다.

고체 표면의 결정구조 해석 수단으로 저에너지(LE; Low Energy) 이온산란 분광법(ISS; Ion Scattering Spectroscopy)이 유용한 도구로 알려져 있는데,<sup>6,7)</sup> LEISS의 뛰어난 표면민감성은 표면에서의 효과적인 이온 중성화 과정에 기인한다. He<sup>+</sup>, Ne<sup>+</sup>, Ar<sup>+</sup> 등과 같은 이온은 Auger 중성화 과정에 의하여 쉽게 중성원자화 되고, 중성화 확률의 타겟에 대한 의존성이 낮기 때문에<sup>8)</sup> 이온빔으로서 종종 사용된다. 그 반면에 Li<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>와 같은 알칼리 금속은 표면 수 층 깊이로부터 산란되어도 쉽게 중성화되지 않는다.<sup>9)</sup>

<sup>†</sup>Corresponding author : Yeon Hwang  
E-mail : yhwang@snut.ac.kr  
Tel : +82-2-970-6517 Fax : +82-2-970-6565

한편 비행시간형(TOF; Time-Of-Flight) 분석기는 이온 뿐 만 아니라 산란과정에서 중성화된 원자도 검출할 수 있기 때문에 알칼리 금속을 사용한 LEISS와 비슷한 특성을 TOF 분석기를 채용한 시스템에서 구현할 수 있다. 또한 이 방법은 불활성 가스 이온을 사용할 수 있다는 장점도 갖고 있다.<sup>10)</sup> 산란각도를 180°로 고정하여 산란이온 검출기를 설치한 직충돌 이온산란 분광법(ICISS; Impact-Collision Ion Scattering Spectroscopy)의 경우는 산란된 이온의 궤적이 입사궤도와 거의 동일하기 때문에 산란궤적의 계산이 간단해지고 표면으로부터 깊은 층까지 원자구조의 해석이 가능해진다는 장점을 갖고 있다. 본 연구에서는 He<sup>+</sup> 이온을 사용한 TOF-ICISS를 이용하여 Si(100) 표면의 원자구조를 해석하고자 하였다.

## 2. 실험방법

Si(100) 면의 구조해석은 TOF-ICISS 및 RHEED 장치가 부착된 초고진공조에서 행하여졌다. Fig. 1은 TOF-ICISS 장치의 개략도를 나타낸 그림인데, 이온 발생기, 펄스화된 이온빔의 도입구, 산란입자의 측정부 등으로 구성되어 있으며 자세한 내용은 이전에 발표한 논문에서 설명되어 있다.<sup>11,12)</sup> 방전형 이온발생기에서 2 keV He<sup>+</sup> 이온을 발생시켰으며 빈 필터(Wien filter)로 질량을 측정하였다. 이온빔의 에너지는 0.5 keV에서 3 keV까지 변화시킬 수 있다. 이온빔을 정전편향형 전극으로 고속 단절함으로써 최대 40 ns의 반가폭을 가진 펄스 빔을 발생시켰다. 후방 산란된 이온이나 중성원자가 시편으로부터 분석기까지 비행하는 시간을 측정함으로써 에너지를 구하였다. 산란된 입자는 시편으로부터 69 cm 거리에 놓인 미소 채널 플레이트

(MCP; Microchannel Plate)로 검출하였다. 모든 스펙트럼은 20 nA 이상의 시편전류에서 20 s 동안 측정하였다.

비저항이 6~12 Ωcm인 p-type Si 단결정 시편을 15×15×0.5 mm 크기로 절단하여 아세톤으로 세척한 후 Ta 박판으로 만든 시편 지지대에 고정하여 load-lock 시스템으로 초고진공조에 장입하였다. Ta 필라멘트를 사용한 전자 충격법으로 시편의 후면을 가열하여 표면을 청정화하였다. 시편의 온도는 적외선 광학온도계(Minolta, TR-630)로 확인하였고, 600°C에서 12시간 가열한 후 1000°C에서 수 초 동안 flash 가열하였다. 청정 표면의 구조는 25 keV의 전자선을 사용한 RHEED 패턴으로 확인하였다.

## 3. 결과 및 고찰

입사 이온이 표적 원자와의 충돌로 산란될 때 두 입사 사이의 퍼텐셜에 의해 결정되는 그림자 원뿔(shadow cone)이라고 부르는 영역이 발생한다. 그림자 원뿔 내부에 위치하는 원자, 즉 입사 이온과 반대 방향에 놓인 원자는 입사 이온과 산란되지 않으나 그림자 원뿔의 경계면은 입사 이온의 밀도가 높으므로 여기에 위치한 원자는 강한 산란을 일으키게 되고 이를 집속 효과(focusing effect)라고 부른다.<sup>6)</sup>

이온의 입사각도를 변화시키면서 산란 이온의 강도를 측정할 때 집속 효과가 일어나는 위치에 원자가 놓이게 되면 산란강도가 매우 높아지고, 이때의 입사각도로부터 원자의 위치를 결정할 수 있다. Fig. 2에 2 keV He<sup>+</sup> 이온으로 측정된 Si(100) 면의 TOF 스펙트럼을 나타내었다. He<sup>+</sup> 이온을 10°에서 180°까지 2° 간격으로 입사각도를 변화시키며 기관의 [011] 방위로 입사하였으며, 그림자 원뿔의 집속 효과에 의해 산란 강도가 증대하는 각도에 대해서 그림에 나타내었다. 낮은 입사각도에서 관찰되는 Ta의 피크는 시편 지지대로부터 산란된 것이다. Si의 산란 강도를 전 입사각도에 대하여 표시한 것이 Fig. 3이다. 집속 효과가 일어나는 입사각도가 5개이며, 입사각도 90° 중심으로 대칭 형태를 이룸을 알 수 있다. 낮은 입사각도, 즉 0~15°와 165~180° 사이에서 산란 강도가 서로 다른 것은 시편 지지대인 Ta과 산란하는 정도가 다르기 때문으로 판단된다.

ICISS는 산란각도가 거의 180°에 가깝게 설계되어 있으므로 산란된 이온이 주위의 원자에 의하여 진로를 방해 받아 검출기에 도달하지 못하는 방해 효과(blocking effect)를 제외시킬 수 있고 집속 효과의 계산만으로 원자간 위치를 알아낼 수 있다. Si(100) 면의 [011] 방위에 대한 5개의 집속 피크는 Si 원자의 그림자 원뿔을 계산한 후 원자 구조에 따른 집속 효과를 모사함으로써 설명할 수 있다.

Fig. 4는 Si(100)면의 [011] 방위에 대한 집속 효과를 모사한 결과이다. 그림자 원뿔은 Thomas-Fermi-Moliere (TFM)

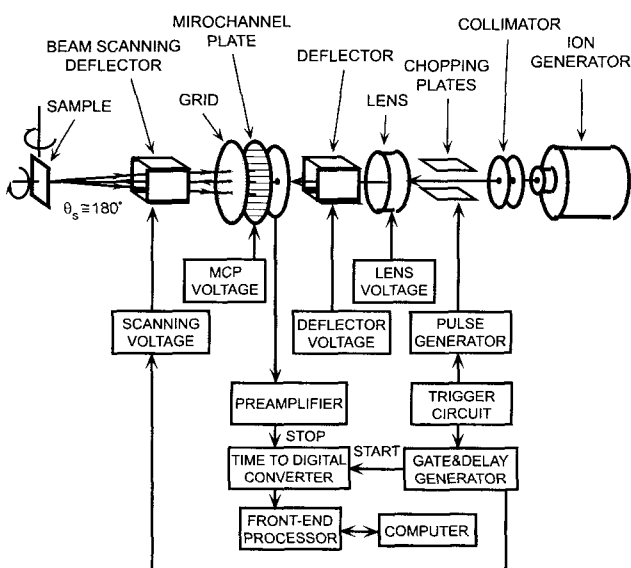


Fig. 1. Schematic diagram of time-of-flight impact-collision ion scattering spectroscopy system.

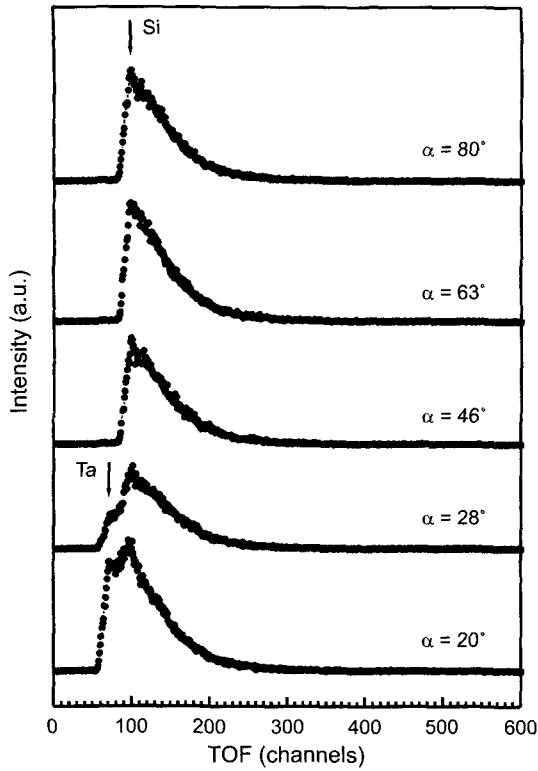


Fig. 2. Time-of-flight spectra of 2 keV He<sup>+</sup> ions scattered from the Si(100) surface taken at selected incident angles with a fixed scattering angle of 180°. The measurement was done along the [011] azimuth.

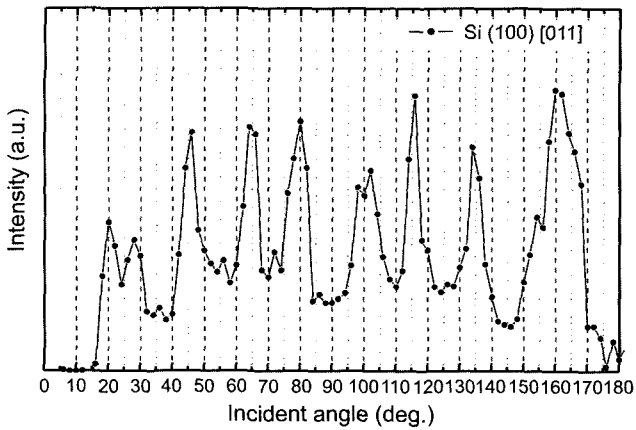


Fig. 3. Polar angle scan of Si peak intensities at the Si(100) surface along the [011] azimuth.

퍼텐셜 및 Firsov가 제안한 가리기 길이(screening length)를 사용하여 계산하였다.<sup>13)</sup> 입사각도가 28°, 46°, 63°, 80° 일 때 그림자 원뿔이 지나는 위치에 다른 Si 원자가 놓임으로써 강한 산란을 일으키고 있음을 알 수 있고, 이 계산은 Fig. 3의 실험결과와 잘 일치한다. 여기서 He<sup>+</sup> 이온이 제5층으로부터 산란되는 큰 입사각도에서도 짐작 피크가 나타남을 알 수 있는데 이는 서론에서 언급하였듯

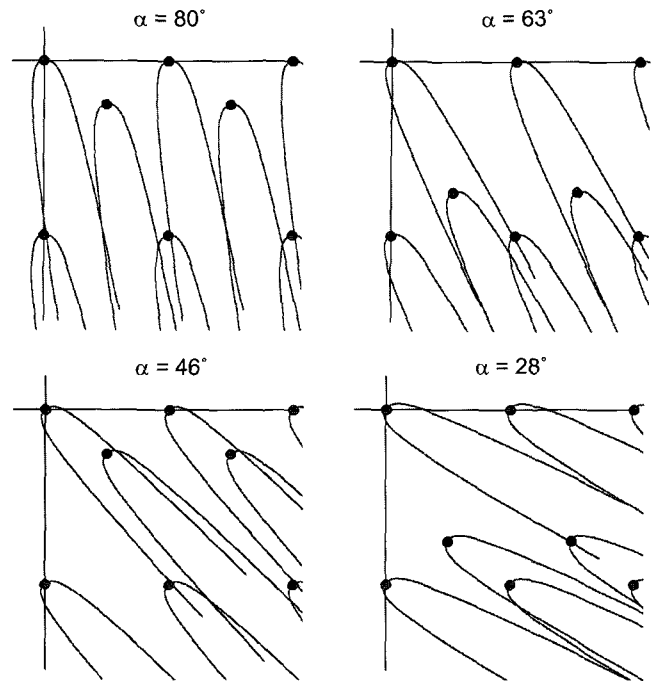


Fig. 4. Schematic views of the shadow cones for 2 keV He<sup>+</sup> ions impinging on the Si(100) surface along the [011] azimuth.

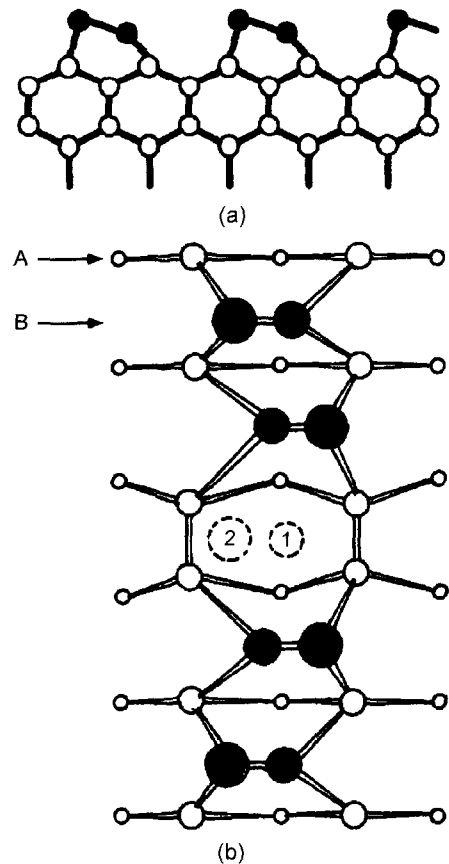


Fig. 5. Atomic structure of Si(100) reconstructed surface. (a) side and (b) top view.

이 TOF-ICISS 방법의 특징이다.

Fig. 5에 Si(100) 표면의 [011] 방위에 대한 원자구조를 나타내었다. (a)는 측면에서 본 구조이고, (b)는 위에서 본 표면 구조이다. Si(100) 면에서 최외층 원자가 가진 미결합이 서로 결합하여 새로운 결합인 이합체를 이루어서 미결합 수는 반으로 줄어든다. 표면의 원자 배열이 벌크의 원자구조와 같다면 (1×1) 구조를 이루어야 하나 이합체의 형성으로 인하여 표면 구조는 (2×1) 구조로 변환된다. 표면 최외층의 이합체는 다시 수직 방향으로 완화되는데 그림에서 보듯이 이합체에 속한 Si 원자들의 수직방향 결합 거리가 어긋나면서 비대칭 이합체를 형성한다.<sup>14)</sup> 이는 이합체가 갖고 있는 2개의 미결합 사이에 전하 이동이 발생하여 점유 및 비점유 미결합으로 바뀌면서 에너지가 저하되기 때문인 것으로 알려져 있다.<sup>15)</sup>

Fig. 5(b)를 보면 [011] 방위를 따라 이합체가 존재하는 {011}면과 존재하지 않는 {011}면 등 두 가지가 있음을 알 수 있다. Fig. 4에 나타난 집속 효과는 다이머가 존재하지 않는 A-방향에 대한 것이다. 즉 28°, 46°, 63°, 80°의 입사각도에서 일어나는 집속 효과는 Si의 벌크 구조로부터 기인하는 것이다. 그 반면에 Fig. 3에서 관찰된 5개의 집속 효과 중 나머지 하나인 입사각도 20°에서 나타난 것은 표면 최외층의 이합체에서 발생하였다고 볼 수 있다. Fig. 5(b)의 B-방향에 대한 그림자 원뿔의 모사를 Fig. 6에 나타내었다. 여기서 이합체를 이루는 두개의 원자 사이의 거리는 Chadi에 의하여 계산된 결과를 사용하였다.<sup>16)</sup> 집속 효과는 20°에서 나타나고 실험 결과와 잘 일치하고 있다.

Si(100) 표면은 이합체를 이루는 열이 완전한 상태가 아니라 결합이 발생하여 에너지를 더욱 낮추게 된다.<sup>14)</sup> Fig. 5(b)에서 보듯이 1, 2번의 이합체 원자가 빠지면 그 아래 원자층에 존재하는 원자 사이에 결합이 생김으로써 남아 있던 미결합을 없앨 수 있고, 그 주위에 자리하던 이합체 원자는 면 중심에서 벗어난다. Fig. 6을 보면 최외층의 이합체에서 산란된 He<sup>+</sup> 이온이 제4층이나 제5층에 위치한

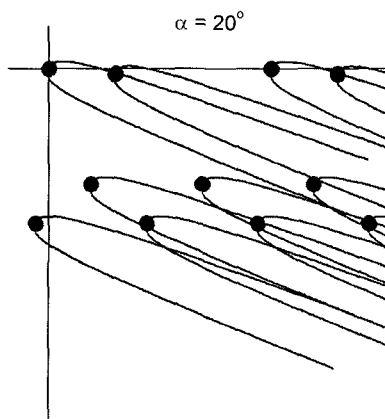


Fig. 6. Schematic views of the shadow cones produced by dimers on the Si(100) surface.

Si 원자에 집속하여 큰 산란강도를 나타낼 가능성도 있으나 Fig. 3에는 그와 같은 집속 효과가 나타나지 않는다. 이는 Fig. 5(b)에 표기한 것처럼 이합체 원자의 위치인 B면이 {011} 면의 중심에서 어긋나 있기 때문인 것으로 생각된다. [011] 방위를 따라서 He<sup>+</sup> 이온을 입사시켜도 이합체 원자 아래에 다른 원자가 자리하지 않으므로 제4층이나 제5층에 대한 집속 효과가 일어나지 않게 되고, 표면 최외층 이합체에 의한 집속효과는 20°에서만 나타나게 된다.

#### 4. 결 론

비행시간형 직충돌 이온산란 분광법을 사용하여 Si(100) 표면의 원자구조를 해석하였다. [011] 방위에 대하여 집속 효과를 조사한 결과 20°, 28°, 46°, 63°, 80° 등의 입사각도에서 집속 효과가 일어났고, 이들은 모두 그림자 원뿔의 계산을 통하여 설명되었다. 28°, 46°, 63° 및 80°에서 일어나는 집속 효과는 표면 최외층에 존재하는 이합체와 관계없는 벌크 구조로부터 산란된 것이며, 20°의 집속 효과가 이합체를 이루는 원자들 사이에서 발생한 산란임을 알 수 있었다.

#### 감사의 글

본 연구는 서울산업대학교 학술연구비 지원에 의하여 연구되었음.

#### REFERENCES

1. I. Stensgaard, L. C. Feldman, and P. J. Silverman, "Evidence of Multilayer Distortions in the Reconstructed Si(100) Surface," *Surf. Sci.*, **102** 1-6 (1981).
2. T. Sakamoto and H. Kawanami, "RHEED Studies of Si(100) Surface Structures Induced by Ga Evaporation," *Surf. Sci.*, **111** 177-88 (1981).
3. K. Yokoyama, T. Ochi, A. Yoshimoto, Y. Sugawara, and S. Morita, "Atomic Resolution Imaging on Si(100)2×1 and Si(100)2×1:H Surfaces with Noncontact Atomic Force Microscopy," *Jpn. J. Appl. Phys.*, **39** L113-L15 (2000).
4. R. M. Tromp, R. G. Smeenk, and F. W. Saris, "Ion Beam Crystallography at the Si(100) Surface," *Phys. Rev. Lett.*, **46** 939-42 (1981).
5. L. C. Feldman, P. J. Silverman, and I. Stensgaard, "Si(001) Surface Studies Using High Energy Ion Scattering," *Nucl. Instr. Methods*, **168** 589-93 (1980).
6. M. Aono, C. Oshima, S. Zaima, S. Otani, and Y. Ishizawa, "Quantitative Surface Atomic Geometry and Two-dimensional Surface Electron Distribution Analysis by a New Technique in Low Energy Ion Scattering," *Jpn. J. Appl. Phys.*, **20** L829-L832 (1981).
7. R. Souda, M. Aono, C. Oshima, S. Otani, and Y. Ishizawa,

- “Thermal Vibration Amplitude of Surface Atoms Measured by Specialized Low-energy Ion Scattering Spectroscopy: TiC(111),” *Surf. Sci.*, **128** L239-L42 (1984).
8. R. Souda, K. Yamamoto, W. Hayami, T. Aizawa, and Y. Ishizawa, “Low-energy  $H^+$ ,  $He^+$ ,  $N^+$ ,  $O^+$ , and  $Ne^+$  Scattering from Metal and Ionic-compound Surfaces: Neutralization and Electronic Excitation,” *Phys. Rev.*, **B51** 4463-74 (1995).
  9. H. Niehus and G. Comsa, “Determination of Surface Reconstruction with Impact-Collision Alkali Ion Scattering,” *Surf. Sci.*, **140** 18-30 (1984).
  10. H. Niehus, “Enhancement of the ICISS Method by Simultaneous Detection of Ions and Neutrals,” *Surf. Sci.*, **166** L107-L110 (1986).
  11. Y. Hwang and R. Souda, “Structure of Epitaxial MgO Layers on TiC(001) Studied by Time-Of-Flight Impact-Collision Ion Scattering Spectroscopy,” *J. Kor. Vac. Soc.*, **6** 181-86 (1997).
  12. Y. Hwang, “Atomic Structure of TiO Epitaxial Layers Deposited on the MgO(100) Surface,” *J. Kor. Ceram. Soc.*, **39** [5] 433-37 (2002).
  13. O. S. Oen, “Universal Shadow Cone Expressions for an Atom in an Ion Beam,” *Surf. Sci.*, **131** L407-L411 (1983).
  14. R. J. Hamers, R. M. Tromp, and J. E. Demuth, “Scanning Tunneling Microscopy of Si(001),” *Phys. Rev.*, **B34** 5343-57 (1986).
  15. J. A. Appelbaum, G. A. Baraff, and D. R. Hamann, “Si(100) Surface Reconstruction: Spectroscopic Selection of a Structural Model,” *Phys. Rev. Lett.*, **35** 729-32 (1975).
  16. D. J. Chadi, “Atomic and Electronic Structures of Reconstructed Si(100) Surfaces,” *Phys. Rev. Lett.*, **43** 43-7 (1979).