

## K/Si(111)계의 표면격자구조에 대한 XPD 분석

이경원, 안기석, 여환옥, 이순보\*, 박종운  
(성균관대학교 물리학과, \* 화학과)

깨끗한 Si(111)7X7표면에 Potassium(K)을 흡착시킨 경우, 기판의 온도와 흡착량의 변화에 따라 K/Si(111)계는 여러가지의 재배열구조를 가지는 것으로 알려져 있다. 그러나, 이들 표면 격자구조에 대한 기판원자와 흡착원자사이의 상대적 위치에 관한 기하학적 구조는 정확히 알려져 있지 않다. 따라서, 본 연구에서는 이 계에서 잘 알려진 표면격자구조 1X1 및 3X1에 대한 격자구조모형을 제시하고자 X-선 광전자회절(X-ray Photoelectron Diffraction)법을 이용하여 연구하였다.

고체표면의 구조를 관측하는 방법으로는 주로 LEED(Low Enwrgy Electron Diffraction)와 RHEED(Reflection High Energy Electron Diffraction)를 사용해 오고 있으나 이들을 이용해서는 표면격자구조의 주기성과 대칭성은 알 수 있으나, 표면원자들의 상대적 위치에 대해서는 구체적으로 알 수 없다. 최근 광전자 회절법을 이용한 표면원자의 상대적 위치 결정에 대한 연구가 활발히 진행되어 오고 있다. 본 연구에서 이 방법을 도입하여 RHEED를 보조장비로 이용하여 K/Si(111)계에서 일어나는 표면 격자구조(1X1, 3X1)의 격자모형 구조를 추정했다.

우선 초고진공 용기(Ultra High Vacuum Chamber)내에서 깨끗한 Si(111)기판 위에 K를 흡착시켜 RHEED를 통하여 주기성을 확인한 후, 이들 각 구조에 대한 광전자의 극 방출각(take-off angle) 및 방위각(azimuthal angle)의 변화에 따른 광전자의 세기를 측정하여 X-선 광전자회절(XPD) 패턴을 얻었다. 한편, 이들 각 구조에 대하여 가정할 수 있는 여러가지 구조모형을 취하여 단일 산란군 이론(single scattering cluster theory)을 적용하여 극 방출각 및 방위각에 따른 광전자의 세기를 computer로 계산하였다. 이렇게 해서 얻어진 실험결과와 이론적 계산결과를 비교, 분석하여 두 결과가 가장 잘 일치하는 것을 각 구조에 대한 표면 격자구조모형으로 결정하였다.