

# Si(111) 표면상의 금속흡착표면구조와 에피택시 성장에 미치는 수소원자의 영향

이상길\*, 井野正三

\*(주)뉴텍코리아 Z2연구소, 동경대학교 물리학과

Si는 다이아몬드구조이며  $SP^3$ 결합을 하고 있고, 그 표면에는 결합이 끊어진 dangling bond 가 많이 존재한다. 그 때문에 표면에 형성하고 있는 구조 및 에피택시 성장에 아주 복잡한 영향을 미친다. 따라서, 수소를 흡착시켜서 이 dangling bond를 없앨 경우, 금속흡착구조 및 에피택시 성장에 어떠한 영향과 효과가 있을까는 대단히 흥미 깊은 문제이다. Oura<sup>(1)</sup> 등은 ion 산란 실험에서 Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag표면상에 수소를 흡착시키면,  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 표면구조가 파괴되고 표면구조로부터 떨어져 나온 Ag는 작은 결정으로 성장함을 밝혔다. 그러나, ion산란에서는 작은결정의 성장과정을 상세히 연구하는 것은 곤란하다. 그래서, 본 연구에서는 이러한 작은 결정의 성장과정의 동적 연구 및 표면구조의 연구에 가장 유력한 수단인 반사고속전자회절(RHEED)를 이용하여 Si(111)표면에 Ag, Pb, In등의 금속을 흡착시켜서, 그때 형성되는 표면구조 및 에피택시 성장에 미치는 수소흡착의 영향에 관한 상세한 연구를 하였다. 그리고, 각도분해광전자분석(Angle-resolved UPS)을 이용하여 금속흡착표면구조에 수소를 흡착시킨 표면의 전자상태를 조사했다.

Si(111)표면에 Ag, In, Pb를 흡착시키면,  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag,  $3 \times 1$ -Ag,  $6 \times 1$ -Ag,  $4 \times 1$ -In,  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -In, incommensurate-Pb,  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Pb등의 표면초구조가 형성된다. 이것들의 표면구조상에 실온에서 수소를 흡착시키면,  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 이외의 구조에서도 표면구조가 파괴되며, 이 표면구조에서 분리된 금속원자는 서로 모여서 작은 결정으로 에피택시 성장함을 밝혔다. 이 과정에 있어서, 수소원자의 흡착시간  $t$  와 표면구조의 RHEED 강도의 변화의 관계를 상세히 측정하였다. 그 결과 가장 큰 특징은, 첫째, 표면구조의 초격자 회절 강도의 감소속도는 일반적으로  $\exp(-At)$ 의 함수적으로 감소하는 것이었다. 여기서 A는 상수가

다. 이것은 금속흡착표면구조가 수소원자에 의하여 거시적으로는 random하게 파괴어 감을 보여주고 있다. 둘째로서, 강도의 감소속도가 흡착금속물질 및 표면초구조의 종류에 따라 크게 다르다는 것이었다. 그래서, 각 구조의 감소속도를 측정해서, 그 상대적인 측정치로부터 금속흡착구조가 수소원자에 의하여 파괴되는 활성화 에너지  $E_h$ 를 정의하고 각 구조간의  $E_h$ 의 차를 구했다.  $E_h$ 의 차는 3 X 1-Ag를 기준으로 했을 경우,  $-0.5(\sqrt{3} \times \sqrt{3}-Ag)$ ,  $-2.5(6 \times 1-Ag)$ ,  $-1.1(\text{incommensurate-Pb})$ ,  $-1.8(\sqrt{3} \times \sqrt{3}-Pb)$ ,  $-1.5(m-\sqrt{3} \times \sqrt{3}-Pb)-0.6(4 \times 1-In)$ ,  $-2.7(\sqrt{3} \times \sqrt{3}-In)$  Kcal/mol였다.

그리고 변화속도는 수소압력에 비례했다.

Si(111)표면상의 수소원자의 흡착은 금속 에피택시 성장에도 큰 영향을 준다는 것을 알았으며, 다음과 같은 새로운 사실을 밝혔다. Pb결정에서는, 수소가 흡착하지 않았을 때는  $(111)_{Pb} // (111)_{Si}, \langle 110 \rangle_{Pb} // \langle 112 \rangle_{Si}$ 의 방위를 갖고 성장했다. 그러나, 수소가 흡착한 표면에서는  $(111)_{Pb} // (111)_{Si}, \langle 112 \rangle_{Pb} // \langle 112 \rangle_{Si}$ 의 방위로 성장했다.  $(111)_{Pb} // (111)_{Si}, \langle 110 \rangle_{Pb} // \langle 112 \rangle_{Si}$ 의 결정이 성장한 표면에 수소원자를 흡착시키면, Pb결정이 파괴되어 평행방위(후자)로 재 성장함을 밝혔다. 이 과정에 있어서의 RHEED 강도의 변화를 동시에 측정함으로써, 변화도중에 1 X 1-Pb 구조가 형성되었다가 다시 파괴됨을 알았다.

또한, 300°C에서는, 수소가 흡착하지 않은 Si(111)표면상에서는 Pb가 2차원적 액체로 존재했으나, 수소가 흡착한 Si(111)표면상에서는 3차원적 액체로 존재함을 알았다. 이 현상은 표면에너지의 차가 원인이라는 것을 알았다.

ARUPS의 결과, 금속흡착표면초구조에 수소를 흡착시킨 표면에는 Si-H bond와 Si-SiH<sub>3</sub> bond가 함께 존재함을 알았다.

1) K.Oura, K.Sumitomo, T.Kobayashi, T.Kinoshita, Y.Tan and F.Shoji: Surface Science lett. 254(1991) 395