

[III-26]

Video LEED system과 Tensor LEED program을 이용한 Cu(001) 표면의 구조분석
서지근(연세대), 김재성(숙명여대), 김상현, 민항기, 변대현, 한원근(홍익대), 유재준(서강대)

LEED spot의 I/V 특성곡선으로 부터 구조에 관한 정보를 얻는 dynamic LEED는 표면 근방의 원자 구조를 밝히기 위한 기본적인 방법으로 널리 이용되어 왔다[1]. 본 연구는 video LEED system(VXLEED)과[2] I/V 특성곡선 분석용 공개 소프트웨어인 tensor LEED(TLEED) 프로그램을[3] 이용하여 Cu(001)표면의 구조를 분석한 것이다. 비교적 구조가 알려진 Cu(001)에 VXLEED와 TLEED를 적용하여, 다양한 실험 조건하에서 얻어진 데이터나 분석과정의 modeling과정과 fitting 과정이 원자 구조 예측에 미치는 영향을 체계적으로 이해함으로써 dynamic LEED 분석 결과의 신뢰도 및 오차 한계를 알아내고자 하였다.

본 실험에 사용한 Cu(001) 시료는 mechanical polishing, 그리고 UHV chamber내에서 sharp한 LEED spot을 얻을 때까지 sputtering - annealing (800°C)을 반복하여 얻었다. sample은 입사 beam에 수직하게 놓이게도록 조절하였으며 Helmholtz coil을 이용하여 잔여 자기장을 0.01G 이하로 낮추었다. I/V 특성 곡선은 본 연구진이 개발한 video LEED system을 이용하여 측정하였다. Video LEED system은 CCD 카메라와 CCD 카메라로부터 온 아날로그 애날로그 화상을 컴퓨터가 이해할 수 있는 디지털 화상으로 바꾸는 frame grabber 그리고 위의 LEED pattern 화상으로부터 spot intensity를 구하는 소프트웨어(VXLEED)로 이루어져 있고[2], 이러한 video LEED system으로 beam들의 I/V 특성곡선을 구할 수 있었다.

실험 data의 분석에는 이러한 분석과정을 최적화시킨 TLEED 프로그램이 사용되었다. 분석 프로그램은 기준구조와 이로부터 약간씩 변형된 구조(시도구조)에 대한 I/V 특성 곡선을 이론적으로 계산하고, 실험적으로 측정한 I/V 특성 곡선과 비교하여 가장 근접된 구조(최적구조)를 찾아내는 시행착오적인 방법을 취한다. 최적 구조를 찾는 것은 reliability factor(R-factor)를 최소화 시키는 방법에 의해서이며 이 R-factor로는 Pendry R-factor 등이 이용되고 있다[3].

Cu(100)에대한 실험 결과로 얻어진 동일한 I/V 특성곡선을 기준구조를 바꾸어가며 계산한 결과에 의하면 설정한 기준구조에 따라 전혀 다른 구조를 최적구조로 예측하는 것을 볼 수 있었고, 따라서 국소 범위 안에서의 최적구조가 아닌 global minimum인 최적구조 즉 실험 I/V 특성곡선과 가장 일치하는 최적구조를 찾기 위해서 여러가지 기준구조로부터 시작한 계산이 필요함을 알 수 있었다. 기준구조로는 최근 계산된 first principles calculation에 의한 결과를[4] 사용하는 것이 global minimum인 최적구조를 얻는데 유용함을 보였다.

표면의 기울기, 지자기, LEED screen의 불균질 등의 이유로 beam의 대칭성이 완전하게 나타나지는 않는 실제 실험 상의 한계가 dynamic LEED에 의한 표면 구조 분석에 대한 영향을 보기위해 각 beam을 다른 실험으로 취급하여 계산해 본 결과 본 연구에서 VXLEED system으로 얻은 결과들의 경우 동등한 beam들 사이의 약간의 대칭성 결여에도 불구하고 찾은 최

적구조들이 0.5%이내에서 동일한 구조를 예측하는 것을 볼 수 있었다. 또한 사용한 R-factor에 따른 차이를 확인하기 위해 동일한 실험 결과에 대해 여러가지 R-factor(ROS, R, RRZJ, RMZJ, RPE)를 사용하여 최적구조를 구했다. 분석한 결과로 RRZJ 사용한 분석을 제외한 모든 경우가 1%이내에서 동일한 최적구조를 예측하는 것을 볼 수 있었다.

여러가지 실험 조건과 분석 조건을 통해 얻은 결과를 비교해 보면 Cu(100) 경우, 표면 구조는 표면과 둘째층의 층간 간격이 2%-3% 정도 수축됨을 확인할 수 있고, dynamic LEED 에 의한 구조 분석이 1%의 범위 이내로 수렴하는 것을 볼 수 있었다. 찾은 최적구조가 0.2 Å(10%) 반경 안에서 범위 안에서 실험과 가장 잘 일치하는 global minimum 구조임을 확인할 수 있고(그림 1) 이 것은 다양한 기준구조에 대한 계산과 이들을 비교함으로써 얻어낼 수 있었다.

참고 문헌

- [1] M. A. Van Hove, W. H. Weinberg and C. M. Chan, Low-Energy Electron Diffraction, (Springer-Verlag, Berlin, 1986); K.Heinze, Prog. Surf. Sci, 27, 239 (1988).
- [2] 김재훈, 김동준, 이순민, 김재성, 변대현, 민항기, 진공학회지 2, 515 (1993).
- [3] M. A. Van Hove and S. Y. Tong, Surface Crystallography by LEED, (Springer Verlag Berlin 1979); P. J. Rous, Prog. Surf. Sci. 39, 3 (1992).
- [4] 유재준, (unpublished).

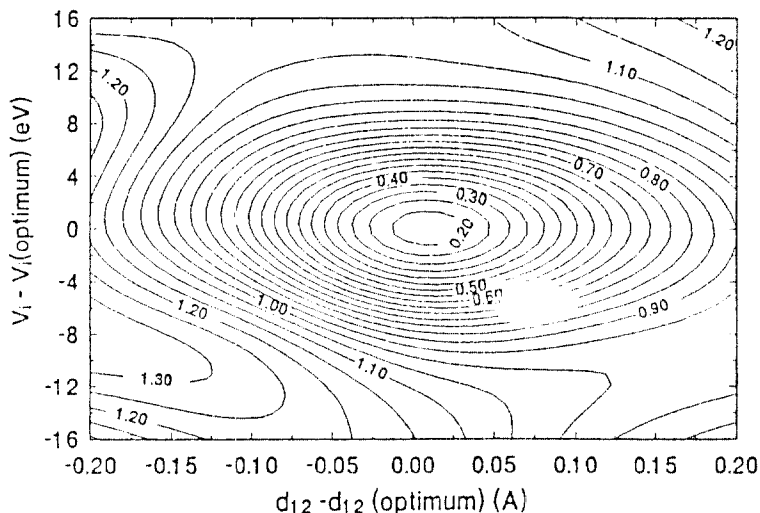


그림 1. 구조에 따른 R-factor의 contour map. 최적 구조를 중심으로 구조(x-축)와 inner potential(y-축)을 변화시켰을 때의 R-factor값을 나타냈다. 사용한 R-factor는 Pendry R-factor이고 x-축은 층간 거리의 변화를 나타내고(단위 Å) y-축의 단위는 eV이다.