

On the atomic structure of deposited Ni on Ag(001) surface

이규섭<sup>1</sup>, 김상현<sup>2</sup>, 민항기<sup>1</sup>, 서지근<sup>3</sup>, 김재성<sup>4</sup>

<sup>1</sup>홍익대 물리학과, <sup>2</sup>성균관대 물리학과, <sup>3</sup>한국 표준과학 연구원, <sup>4</sup>숙명여대 물리학과

1. 서론

P(1x1) IML(Mono-Layer)에 해당하는 Ni을 Ag(001) 표면에 증착하였을 때, Thompson et al.은 Ni의 exchange splitting energy ( $\Delta E_{ex}$ )가 같은 양의 Ni이 Cu(001) 표면에서 보여주는  $\Delta E_{ex}$ (=0.32eV)에 비해 무시할 만큼 작음을 ARPES(Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy)를 이용하여 발견하였다. 이와 같이 Ni 원자층의 자성이 기판의 종류에 따라 달라지는 현상을 Hong et al.은[2] first principles spin dependent band structure 계산을 통하여, Ag(001) 위에 증착된 Ni은 overlayer가 아니라 sub-surface layer로 성장함에 기인한다고 주장하였다. 그들의 Total energy 계산 결과에 따르면 Ag/Ni/Ag(001) 계가 Ni/Ag(001) 계에 비해 0.6 eV 낮은 에너지를 가지며, 이때 magnetic moment는 Thompson et al.이 발견한 매우 작은  $\Delta E_{ex}$ 에서 예상되는 바와 같이 0.02 $\mu_B$  이하로 bulk magnetic moment (0.61 $\mu_B$ )에 비해 거의 무시할 만하다. 반면 Treglia et al.은[3] 상온에서 P(1x1)에 해당하는 Ni을 Ag(001)표면에 증착한 후 620K에서 annealing을 하였을 때, Ni Auger peak가 빠르게 줄어 들고 Ag peak가 빠르게 증가하여 동시에 saturation에 도달함을 발견하였다. 그들은 이 실험 결과와 KTBM(Kinetic Tight-Binding Ising Model) simulation 결과에 근거하여 갓 증착된 준 안정적 상태의 Ni 원자가 열에너지의 공급을 받아 표면 두 층의 Ag 원자와 자리바꿈을 통하여 Ag/Ag/Ni/Ag(001) alloy 구조로 전이한다고 주장하고 있다. 이 실험결과는 Thompson et al.의 실험결과와는 달리 Ag(001) 표면위의 준 안정적 Ni원자층과 diffusion barrier의 존재를 예측하고 있다. 그러나 위에서 언급된 두 실험의 표면 Ni층 구조에 관한 예측은 이론적이거나 간접적인 사실에 근거하고 있다. 이에 본 연구진은 Ag(001)의 기판원자와 증착된 Ni원자가 이루는 원자구조에 관한 직접적인 정보를 얻고자 (1) 준 안정적 Ni overlayer의 존재확인 및 원자구조 연구 (2) Ni 증착층의 열적 안정성, 그리고 (3) 표면합금의 생성 및 그 원자구조를 AES(Auger Electron Spectroscopy) 및 dynamic LEED(Low Energy Electron Diffraction) 분석을 통하여 탐구하고자 한다. 더 나아가 (4) Treglia et al.이 주장한 두층의 Ag Capping layer가 'Surfactant'로서의 역할을 연구하고자 한다.

2. 실험방법

본 실험에서는 Ag(001) 시료를 mechanical polishing한 후 UHV chamber내에서 sputtering - annealing(500℃) 과정을 반복하여 sharp한 LEED spot을 얻었다. Evaporation pressure는  $3 \times 10^{-10}$  Torr 이었으며, 분석은 AES 와 dynamic LEED를 사용하였다.

3. 결과 및 고찰

실온에서 P(1x1) IML Ni을 Ag(001) 표면에 증착하였을 때 Treglia et al.은[3] Meta-Stable한 Ni 표면 원자층의 존재를 주장하였다. 그러나 실험적 LEED I/V 특성 곡선은 Ni/Ag(001) 구조, Hong et al.의[2] Ag/Ni/Ag(001) 계와 같은 sub-surface layer 구조로 modeling하여도 의미있게 일치하는 분석 결과를 얻을 수 없었다. 따라서 이것은 surface alloy의 가능성을 예측하게 한다. 이것을 검증하기 위해 이 system에 1000L의 산소를 흡착 시켰으나 LEED pattern상에 어떠한 superstructure도 보이지 않으며 산소 Auger peak도 나타나지 않았다. 참고적으로 Ni은 산소와 매우 쉽게 chemisorption을 하는

대 low coverage에서는 P(2X2), high coverage 에서는 C(2X2) pattern를 보인다.

P(1x1) 1ML Ni/Ag(001)을 300K에서 770K까지 annealing 온도를 시간에따라 단계적으로 변화시키면, 370K 부터는 Ni Auger peak가 계속해서 감소하고 Ag peak은 계속해서 증가하였다. 그리고 annealing 온도를 470K과 620K으로 일정하게 유지하였을 때는 Ni과 Ag Auger peak 빠르게 감소하고 증가하여 saturation에 도달하지만, annealing 온도를 올리면 Ni Auger peak가 계속해서 감소하고 Ag peak는 계속해서 증가하였다. 이것은 Ni이 내부로 계속해서 확산함을 뜻한다. 따라서 Treglia et al.[3]의 결과와는 달리 열적으로 안정한 Sub-surface 구조는 없으며, 확산이 온도에 의한 한계가 있다는 사실로부터 diffusion barrier의 존재를 예측할 수 있다.

Treglia et al.은 1ML Ni/Ag(001)을 620K에서 annealing을 하면 Ni/Ag(001) 계가 Ag/Ag/Ni/Ag(001) 구조로 전이하고, 추가적으로 1ML의 Ni을 증착하여 620K에서 annealing을 하면 Ag/Ag/Ni/Ni/Ag(001)의 구조로 변하여 Ag bi-layer가 surfactant로서의 역할을 수행한다고 주장하였다.

본 연구진의 실험에서도 추가적으로 증착된 P(1X1) 1ML에 해당하는 Ni층이 표면원자층을 이루지 않음을 LEED pattern에서의 산소 흡착구조의 부재와 LEED I/V 결과를 어떤 모델구조로 설명하지 못한다는 사실로부터 floating하는 Ag Capping layer가 surfactant로서의 작용함을 확인 할 수 있었다.

#### 4. 결론

상온에서 증착된 P(1x1) 1ML의 Ni원자층은 dynamic LEED 분석에 의해 meta-stable한 표면 원자층이나, Ag/Ni/Ag(001) 계와 같이 sub-surface layer로 성장하지 않음을 알 수 있다. 이것은 표면근방에서 alloy가 형성되었을 가능성이 있음을 시사한다. 그리고 1ML Ni/Ag(001)을 annealing 하면 370K 이상에서 Ni은 내부로 계속해서 확산하며, Treglia et al.[3]의 결과와는 달리 열적으로 안정된 sub-surface 구조는 없었다. 또한 1ML Ni/Ag(001)위에 추가적으로 1ML Ni을 증착하였을때 Ag가 Capping layer를 이루며 Surfactant로써 행동함을 알 수 있었다.

#### 참고 문헌

- [1] M.A. Thompson and J.L. Erskine, Phys. Rev. B. 31, 6832 (1985)
- [2] S.C. Hong, A.J. Freeman, and C.L. Fu, Phys. Rev. B 39, 5719 (1989)
- [3] B. Aufray, H. Giordano, B. Legrand, and G. Treglia, Surf. Sci. 307-309, 531 (1993)