

Cr(001)-p-(1X1)-N 표면의 원자 구조 연구

조용필, 이창섭, 정제인*, 홍재화*, 강정수*, 김세훈**

계명대학교 자연과학대학 화학과

*산업과학기술연구소

**한국과학기술원 화학과

1. 서 론

고체 표면의 재배열(reconstruction)유무, 화학흡착 자리, 기판 최상층의 이완(relaxation)에 대한 흡착물질(adsorbate)의 영향등에 관한 연구들에 있어서 정확한 원자 구조를 밝히는 일이 중요하다. 그 이유는 원자들 간의 상호 위치를 아는 것이 표면에서의 원자들의 화학적 결합을 이해하는데 필수적이며, 결국 표면의 물리 화학적인 성질을 규명하는 기초 자료가 되기 때문이다.

본 연구에서는 Cr(001)표면에 대하여 video LEED(저에너지 전자 회절) system을 이용하여 얻은 실험적인 I-V 특성 곡선과 Tensor LEED(TLEED)프로그램을 이용하여 얻은 이론적인 I-V특성 곡선을 서로 비교함으로써, bulk로부터 표면으로 segregation된 질소에 대한 Cr(001)-p-(1X1)-N 표면의 원자구조를 제시하였다.

2. 실험 및 분석 방법

Cr(001)시료를 VSW사의 초고진공 stainless steel chamber내에 장착하였으며, 실험중의 기저 압력은 3.0×10^{-10} mb이하를 유지하였다. 깨끗한 Cr표면을 얻기 위해서 Ar 이온 스퍼터링과 1100K에서의 열처리를 여러번 반복하였다. 시료의 표면이 깨끗한지와 균일한 표면이 얻어졌는지의 여부는 자외선 광전자 분광법(ultraviolet photoelectron spectroscopy ; UPS)과 LEED를 이용하여 확인하였다. 시료의 열처리는 전자선 (e-beam) 가열 방법을 사용하였으며, 온도는 적외선 고온계(pyrometer)를 사용하여 측정하였다. 자외선 광전자 스펙트럼은 동심 반구형 분석기를 이용하여 얻었으며 이때 투과 에너지(pass energy)는 15eV로 일정하게 두었다. 자외선 광원은 He-I(21.2eV)를 사용하였다. LEED 측정을 위하여 VG 사의 후시형(rear view) 4-grid LEED 광학장치를 이용하였다.

Video LEED system은 CCD 카메라와 CCD 카메라로부터 온 아날로그 화상을 컴퓨터가 이해할 수 있는 디지털 화상으로 바꾸는 frame grabber와 LEED 회절 무늬 화상으로부터 반점의 세기(intensity)를 구하는 소프트웨어 (VX-LEED)로 이루어져 있으며[1], TLEED 계산은 범용 공개 소프트웨어를 사용하였다. 본 연구에서 이러한 system을 이용하여 입사 에너지 범위가 40 ~ 240eV이고, 간격이 2eV인 실험적인 I-V특성곡선을 구하였고, TLEED프로그램을 이용하여 실험결과를 분석하였다. 여기서 원자와 전자의 산란을 계산하기 위해 전자간의 파동함수는 각운동량 양자수가 6인 상태까지 고려하였다.

3. 결과 및 토론

Cleaning 과정 중의 Cr(001) 표면에 대하여 얻은 자외선 광전자 스펙트럼에서는 Fermi 준위(E_F)에서 약 2.7eV 아래에 나타난 Cr 3d 전자들에 의한 peak들과 E_F 밑으로 약 6 ~ 8eV 근처에 위치한 N 2p 전자들에 의한 넓은 peak들이 관찰되었는데, 후자는 cleaning 과정에서 Cr의 bulk 속에 있는 질소가 표면으로 segregation된 것으로 해석된다.

입사 전자에너지의 변화에 따른 Cr(001)-p(1X1)-N의 LEED 무늬를 사진으로 관찰한 결과, LEED 무늬의 모양은 그대로 bcc(001) 구조를 유지하고 단지 각 회절법의 상대적인 세기만이 약간 변화하였다. 이러한 관찰로부터 Cr(001) 표면위에 N이 1X1으로 존재함을 알 수 있었다. 본 실험에서는 입사 전자에 수직으로 놓인 bcc(001) 표면에 대한 LEED 실험으로 얻은 빔들 중 (1,0), (0,1), (-1,0), (0,-1)와 (1,1), (1,-1), (-1,1), (-1,-1) 빔 등에 대하여 비교적 대칭성이 양호한 I-V 특성곡선을 얻었다. LEED 분석과정에서 동등한 빔에 대해서는 이들의 세기를 평균하여 처리하였다. LEED 실험 결과로부터 신뢰할 수 있는 구조를 찾기 위해서 예상되는 여러가지 기준구조에 대해 흡착된 질소층과 첫번째층 사이의 층간간격(d_{N1})을 변화시키면서 Pendry R-factor를 분석한 결과, hollow site의 경우 d_{N1} 이 0.22Å 일때 R-factor 값이 0.2105으로 최소화됨을 볼 수 있었다. 이에 대한 실험과 이론적 I-V 특성곡선을 비교한 결과, bulk 속에 있는 질소가 표면으로 segregation되어 Cr(001) 표면에 fourfold hollow site에 위치함을 알았다. 이상의 TLEED 분석결과로부터 Cr(001) 표면의 hollow site에 흡착된 질소에 대한 최적화 구조를 나타내면, hollow site에 흡착된 질소층과 첫번째층 사이의 층간간격(d_{N1})은 0.251Å 이고, d_{12} 은 1.814Å으로 bulk에 비하여 약 26% 팽창하였으며, d_{23} 은 1.410Å으로 약 1.95% 수축하였음을 알 수 있었다.

4. 결론

Cr(001)의 cleaning 과정 중에 관찰한 LEED 회절무늬로부터 Cr(001) 표면위에 N이 1X1으로 존재함을 발견하였다. Video LEED system을 이용하여 Cr(001)-p-(1X1)-N 표면에 대한 실험적인 I-V 특성곡선을 구하였고, TLEED 프로그램을 이용하여 이러한 실험 결과를 분석하였다. 그 결과 N이 Cr(001) 표면위의 hollow site에 흡착됨을 알 수 있었으며, 이 방법을 통하여 R 값의 신뢰도를 가지고 가능한 원자 구조를 제시하였다 또한 이러한 분석방법을 Cr(001) 표면과 Fe/Cr(001) 표면에 대한 LEED 결과의 분석에도 적용하였다.

감사의 글

VX-LEED 프로그램을 제공하여 주신 김재성 교수님께 감사드립니다.

5. 참고 문헌

- [1] 김재훈, 김동준, 이승민, 김재성, 변대현, 민항기, 진공학회지 2, 515 (1993)