

[III~29]

ARUPS를 이용한 Si(111)-7×7 표면과 RDE 방법으로 Si(111) 표면 위에 성장시킨 β -FeSi₂의 전자구조

김건호¹⁾, 임태균¹⁾, 박정환¹⁾, 김현수¹⁾, 이정주¹⁾, 강정수²⁾, 홍재화³⁾, 정재인³⁾

¹⁾경상대 물리학과, ²⁾가톨릭대 물리학과, ³⁾RIST

1. 서 론

표면재구성된 Si(111)-7×7 표면의 전자구조에 대하여 많은 ARUPS(angle resolved ultraviolet photoemission spectroscopy) 연구가 이루어졌으며 그 결과 Si(111)-7×7의 표면에 세 가지 표면상태가 존재하는 것이 밝혀졌다. 이러한 표면상태는 DAS(dimer-adatom-stacking fault) 모델에서 adatom의 half-filled dangling bond(S₁)와 back bond(S₃)와 rest atom의 filled dangling bond(S₂)로 알려져 있다. β -FeSi₂는 약 0.8 eV ~ 1.0 eV의 narrow band gap을 갖는 반도체임으로 해서 이론적으로 혹은 실험적으로 이 물질의 전자구조에 대한 연구가 이루어졌다.

본 연구에서는 ARUPS을 이용하여 초고진공에서 원자적으로 깨끗한 Si(111)-7×7의 전자구조를 관찰하고 RDE방법으로 Si(111) 표면 위에 Fe를 약 20Å 정도 증착하여 형성시킨 β -FeSi₂의 전자구조를 Si(111)-7×7의 전자구조와 비교하였다.

2. 실험

실험은 포항산업과학연구원에 설치되어 있는 각분해 광전자 분광 분석기를 이용하여 수행되었다. 기관으로 사용한 실리콘 웨이퍼는 P가 도우핑된 Si(111)으로 비저항은 약 5 Ωcm 였다. 기관에 직류전류를 통전시켜 약 700°C에서 약 15분간 가열한 후 약 1100°C로 수초간 순간가열(flash heating)을 수회 반복하여 표면의 불순물을 제거하였으며 표면재구성된 Si(111)-7×7의 LEED 상과 ARUPS 스펙트럼을 얻었다. 그리고 웨이퍼를 700°C로 유지하면서 Fe를 약 20Å 정도 증착하였다. 증착이 끝난 후 약 5분간 더 가열하여 β -FeSi₂를 형성한 후 다시 LEED와 ARUPS를 측정하였다.

ARUPS 측정은 입사각을 53°로 고정시킨 채 Si(111) 표면 Brillouin 영역(SBZ)의 $\bar{\Gamma} - \bar{M}$, $\bar{\Gamma} - \bar{K}$ 대칭방향을 따라 normal 방향에서 2° 간격으로 측정하였다.

3. 결과 및 고찰

깨끗한 Si(111)-7x7 표면의 photoemission 스펙트럼에서 Fermi 준위 아래 -0.2 eV(S₁), -0.8 eV(S₂), -1.8 eV(S₃)에서 표면상태를 관찰하였으며, -2.0 eV ~ -5.0 eV 영역에서 가전자띠로부터의 직접천이에 의한 bulk band 구조가 확인되었다. S₁과 S₂의 초기에너지 분산은 관찰되지 않

았으며 두 대칭방향 모두에서 S_1 은 방출각이 10° 부근에서 가장 강한 강도를 나타내었으며 방출각이 10° 보다 크거나 작아지면 점차 강도가 감소하였다. 반면 S_2 는 SBZ에서 뚜렷이 구별할 정도의 강도를 나타낸다. S_3 는 초기에너지 분산이 관찰되었으며 band 폭은 약 0.3 eV 정도이었다. 또한 20° 부근에서 가장 강한 강도를 나타내며 방출각이 작아지면 낮은 초기에너지로 분산이 일어나며 점차 사라진다. 방출각이 커지면 높은 초기에너지로 분산이 일어난다. 또한 Fermi 준위 아래 -2.0 eV ~ -5.0 eV 영역에서는 가전자띠로부터의 직접천이에 의한 bulk band 구조가 관찰되는데 방출각이 커짐에 따라 높은 초기에너지로 분산이 일어난다.

RDE(reactive deposition epitaxy)방법으로 형성시킨 β -FeSi₂에서는 Fermi 준위 아래 약 -0.3 eV, -0.9 eV, -1.8 eV 와 -3.9 eV에서 구조들이 관찰되어진다. -0.3 eV의 상태는 -0.9 eV의 shoulder에 위치하여 뚜렷이 구별하기는 어려우나 초기에너지 분산은 관찰되지 않았다. 이러한 -0.3 eV의 상태는 Si adatom의 dangling bond에 의한 상태로 보고된 바 있다. -0.9 eV의 상태는 Si(111)- 7×7 표면의 스펙트럼에 비해 강도가 상대적으로 증가한 것을 관찰할 수 있으며 이는 Fe 3d에 기인한 것으로 보인다. 또한 이 상태는 방출각이 작을 때에는 뚜렷이 보이며 방출각이 약 20° 가 되면 점차 그 강도가 약해진다. 이 상태 역시 초기에너지 분산은 관찰되지 않았다. 그러나, -1.8 eV와 -3.9 eV의 상태는 초기에너지 분산이 관찰된다. 그러나 -0.9 eV와 -1.8 eV는 초기에너지의 위치가 Si(111)- 7×7 과 상당히 유사하며 또한 측정된 광전자에너지에서 cross section이 Fe 3d가 Si 3p에 비하여 10배 이상 크다. 또한 이전에 결과에서 β -FeSi₂가 섬구조로 성장하는 것으로 보고되었다. 따라서 측정된 스펙트럼은 노출된 Si 기판과 β -FeSi₂의 스펙트럼이 섞여있는 것으로 추측된다.

4. 결론

ARUPS(angle resolved ultraviolet photoemission spectroscopy)을 이용하여 초고진공에서 원자적으로 깨끗한 Si(111)- 7×7 의 전자구조를 관찰하고 RDE방법으로 Si(111) 표면 위에 Fe를 약 20 Å정도 증착하여 형성시킨 β -FeSi₂의 전자구조를 Si(111)- 7×7 의 전자구조와 비교하였다.

Si(111)- 7×7 표면의 스펙트럼에서 이미 잘 알려진 세 가지 표면상태를 확인하였으며 Fermi 준위 아래 -2.0 eV ~ -5.0 eV 영역에서 가전자띠로부터의 직접천이에 의한 bulk band 구조를 확인하였다.

β -FeSi₂ 표면의 스펙트럼에서는 -0.3 eV에서 Si adatom에 의한 상태와 약 -0.9 eV의 상태가 Fe 3d에 의한 상태를 관찰할 수 있었으며 초기에너지의 분산은 관찰되지 않았다. 그리고 -1.8 eV과 -3.9 eV의 상태에서는 초기에너지 분산이 관찰되었다.