

## 주사터널링현미경(STM) 기법으로 확인된 Si(5 5 12)-2×1 호모에피텍시 성장 방법

김희동 · 조유미 · 서재명\*

전북대학교 물리기술학과, 전주 561-765

(2006년 1월 11일 받음)

초고진공 아래에서 주사터널링현미경을 이용해서 495°C의 Si(5 5 12) 기판에 호모에피텍시를 시도하여 층상성장의 미세한 과정을 연구하였다. 최초에는 Si Dimer가 기본블록이 되어 Si(5 5 12) 단위세포 내 (337)과 (225) 부분의 Si Dimer/Adatom 자리에 우선적으로 흡착하여 Si(5 5 12) 단위세포는 Si addimer로 채워진 3×(337) 세부 부분과 1×(113) 세부 부분으로 변한다. 이 과정 중 Si(5 5 12) 단위세포 내 또 다른 (337)에 있는 Tetramer는 Si Dimer를 흡착할 수 있는 Dimer/Adatom 자리로 변환한다. 추가적인 Si 흡착으로 각각의 (337) 부분은 (112)과 (113)으로 나뉘어, 마침내 Si(5 5 12) 단위세포는 3×(112)와 4×(113)의 패킷들로 바뀐다. 이 단계에서 벌집사슬형과 Dimer/Adatom의 1차원 구조의 상호 변환이 선택적으로 일어난다. 기판의 단위세포 주기를 가지는 패킷의 높이는 2.34 Å까지 성장하며, 끝으로 이 패킷 사이의 골짜기가 채워진다. 마지막 단계가 끝나면 균일하고 평평한 Si(5 5 12) 테라스가 복원된다. 본 연구로부터 Si(5 5 12) 호모에피텍시가 단위세포 당 28 개의 Si 원자가 흡착됨으로써 주기적으로 이루어지고, 기판 단위세포 내에서 패시팅이 균일한 오버레이어 필름 두께를 유도하는 데에 결정적 역할을 한다는 점에서 그 성장 방식이 독특하다고 할 수 있다.

주제어 : 주사터널링현미경, 고밀러지수, 규소표면, 동종에피택시

### I. 서 론

반도체 소자의 크기가 점점 작아짐에 따라, 결함이 적은 기판은 나노 소자의 성공률과 직결되어 Si 호모에피텍시 성장 과정을 원자 수준에서 근본적으로 이해할 필요가 있게 되었다. 호모에피텍시는 abrupt한 계면을 형성하여 도핑 농도를 원자 단위로 조절할 수도 있게 할 가능성이 있다. 그런데 재구조된 표면에서 동일한 원자층이 성장할 때 표면의 결함이나 재구조가 그 위에 성장하는 층의 질에 크게 영향을 끼치므로, 호모에피텍시 전에 표면의 평형 상태가 잘 정립되어 있어야 한다.

본 연구에서 다룰 Si(5 5 12) 기판은 (001) 면과 (111) 면 사이에 존재하는 1차원 대칭성을 가지고 있는 면 중의 하나로써, 모든 구성 요소가  $[1\bar{1}0]$  방향의 1차원 구조들로 이루어져 있다. 그림 1은  $(1\bar{1}0)$  면에서 본 Si 결정 격자의 단면을 보여 주고 있다. 왼쪽 위의 원점에서 지수가 붙은 각 점까지의

벡터는 해당 면의 표면에 나란하고  $[1\bar{1}0]$  방향에 수직인 그 면의 단위 벡터가 된다. 여기서 우리는 그림 1의 표에 유의할 필요가 있다. Si 호모에피텍시 성장에서 이미 초고진공 주사터널링현미경(Scanning Tunneling Microscope, STM)을 이용해 Si(111)은 layer-by-layer 성장 모드를, Si(001)은 step-flow 성장 모드로 성장하는 것이 알려져 있다 [1]. 하지만 아직 금속 나노선을 형성하는 형판으로 유망한 긴 주기(5.35 nm)를 갖고 일차원 구조를 가진 Si(5 5 12)의 재구조된 표면에서의 호모에피텍시 연구는 아직 수행되지 않았다 [2]. 두 개의 (337) 부분과 한 개의 (225) 부분으로 이루어진 재구조된 Si(5 5 12) 면은 Baski 등이 2×1로 재구조된다고 보고한 이래, 그 구조에 대한 연구가 지금까지 활발하다 [3-5]. 여러 가지 실험 방법에 의한 Si(5 5 12)-2×1의 연구가 있었지만, 모든 것을 만족스럽게 설명하는 모델은 아직 알려지지 않았다. 최근 2×주기의 Dimer/Adatom 선과 Tetramer 선, 그리고

\* [전자우편] seojm@chonbuk.ac.kr

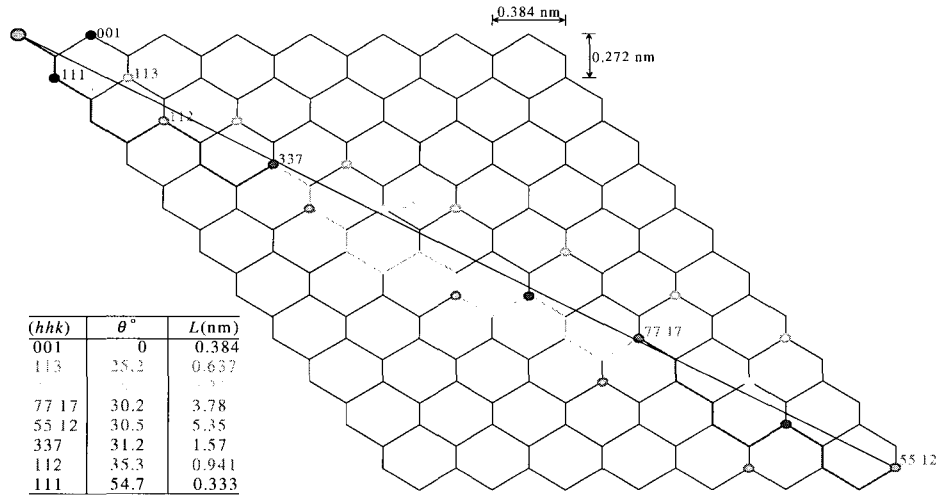


그림 1. Si 결정 구조의 단면도. 왼쪽 위의 원점에서 (h k l) 점을 잇는 벡터는 표면과 나란하고 [110] 방향에 수직인 해당 표면의 단위 벡터이다. 삼입표는 (001) 면에서 켜 각각의 면에 해당하는 각도와 단위세포 길이이다.

1×의 1차원 벌집사슬로 이루어진 새로운 모델을 STM과 제일원리계산을 통하여 제안하였다 [6]. 본 논문에서는 재구조된 Si(5 5 12)-2×1 위에 Si를 적층으로 성장시키면서 그 과정을 STM을 통해 관찰함으로써 어떻게 호모에피택시가 일어나며 이로부터 최근 제안된 Si(5 5 12)-2×1 원자 구조 모델이 얼마나 잘 맞는가를 확인하고자 한다.

## II. 실험 방법

본 실험에서 사용한 시료는 Si(5 5 12) 웨이퍼를 13×3×0.25 mm<sup>3</sup>의 크기로 잘라서 유기 용매로 닦아낸 후 물리브텐으로 만든 시료 홀더에 장착하였다. 이것을 기본 압력이 2×10<sup>-10</sup> Torr인 진공 챔버에 넣었다. 적외선 온도측정기로 확인하여 시료 고정부 자체를 700℃ 이하로 유지하면서 열 두 시간 이상 아웃개싱을 하였다. 그리고 1200℃ 정도에서 압력을 3×10<sup>-10</sup> Torr 이하로 유지하면서 3 초간 짧게 여러 번 순간 가열함으로써 시료 표면의 자연산화막을 제거한 후 900℃에서 상온까지 1℃/s 정도의 속도로 서서히 식혀서 표면의 재구조를 유도하였다. 표면의 재구조를 STM으로 확인한 후 기판의 온도를 495℃로 유지하면서 Si 웨이퍼를 통전가열함으로써 0.1~0.2 Å/min의 속도로 Si 원자를 증착하였다. 증착 후, 2 Å 이상 증착을 했을 때는 515℃에서 3분간 추가적 가열을 통하여 표면을 안

정확시켰다. 본 연구에서 기판의 온도 조절은 기판에 전류를 직접 흐르게 하는 통전가열 방법을 사용하였다. 본 논문에서 제시된 모든 STM의 영상은 바이어스 전압 -1.8~-2.0 V, 터널링 전류 0.5 nA, 스캔 넓이 25 nm×25 nm에서 얻은 filled state이다. 이 때 토포그래피와 함께, 보다 세부 구조를 잘 볼 수 있도록 하는 그것의 error signal을 동시에 구하였다.

## III. 결과 및 고찰

Si(5 5 12) 표면은 (001)에서 (111) 방향으로 30.5° 기울어져 있는데, 1차원 구조를 가진 선의 구조들로만 이루어져 있다. 정석민 등이 제시한 모델에서는 재구조된 Si(5 5 12)-2×1의 한 주기는 그림 2에서 처럼 dimer/adatom(D/A, 2× 주기)으로 이루어진 D(337) 부분, tetramer(T, 2× 주기)로 이루어진 T(337) 부분, dimer/adatom과 tetramer를 모두 포함한 (225) 부분으로 이루어져 있다. 이들 세 부분의 경계는 벌집 사슬(Z) 모양의 5-3-5 고리로 이루어져 있으며, 그 주기는 1×로써 STM 영상에서는 밝게 나타난다 [6]. 단위세포당 dangling bond의 수는 각각의 dimer/adatom, tetramer, 벌집사슬당 네 개씩으로, 따라서 단위세포 전체적으로는 스물 여덟 개이다. 그리고 추가적으로 D(337)과 (225) 위의 dimer/adatom 위에는 addimer가 불규

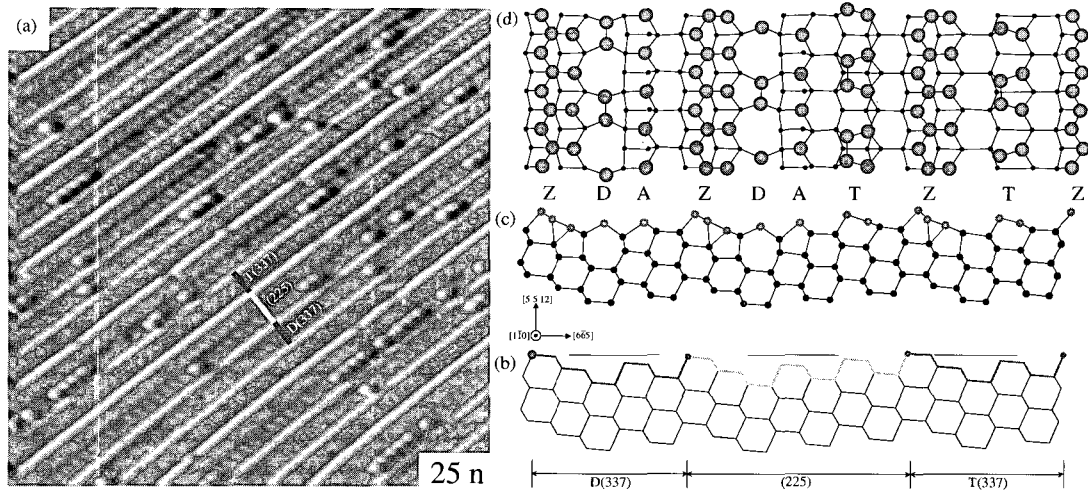


그림 2. 재구조된 Si(5 5 12)-2×1 모델 [6]. (a) 재구조된 Si(5 5 12)-2×1의 error signal STM image. (b) 재구조되기 전 이상적 bulk-terminated Si(5 5 12). (c)와 (d)는 2×1로 재구조화된 뒤의 모습으로 (c)는 옆에서 본 것이고 (d)는 위에서 본 것이다. Z는 벌집모양 사슬을, D는 dimer, A는 adatom, T는 tetramer를 뜻한다. D(337)은 dimer/adatom이 있는 Si(337) 면을, (225)는 dimer/adatom과 tetramer로 이루어진 Si(225)면을, T(337)은 tetramer로 이루어진 Si(337) 면을 나타낸다. 각 경계면은 벌집모양 사슬로 되어 있다.

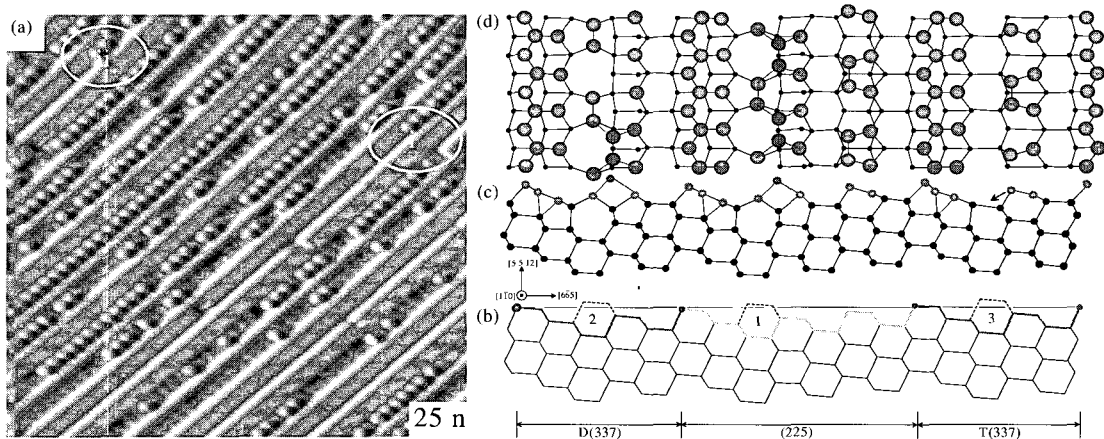


그림 3. Si 원자가 단위 세포 당 두 개 앉았을 때 Si(5 5 12)의 STM image. (a)는 error signal로 타원형으로 둘러싸인 (i) 및 (ii)는 tetramer가 dimer/adatom로 변형되어 addimer가 앉은 곳을 나타낸다. (b)의 1, 2, 3 순서로 addimer가 앉고 (c)와 (d)는 addimer(회색 원)가 앉은 모습을 옆 및 위에서 본 것이다. (c)의 화살표는 tetramer가 dimer/adatom이 될 때 Si 원자가 이동하는 것을 나타낸다.

칙하게 앉아 있다.

이와 같이 재구조된 청결한 Si(5 5 12)-2×1 위에 Si를 증착하면 (225) 부분만의 dimer/adatom 선 위에 addimer 형태로 Si-dimer가 더 많이 앉는다. 이것이 dimer라는 사실은 empty 상태의 STM 상에서 갈라지는 형상에서 확인하였다. 정석민 등의 계산에서도 Si-dimer가 D/A 선 위에 에너지가 가장 낮아진다는 사실을 확인하였다. 다음으로 에너지가

낮은 D(337) 위의 dimer/adatom 위에 addimer 형태로 Si이 앉는다. 이렇게 addimer가 앉으면서 이것이 dimer와 adatom 사이를 좁히고 이에 따라 T(337)에 tensile stress를 작용하여 tetramer는 dimer/adatom이 되어 T(337)은 D(337)로 변형되고, 그곳에도 addimer가 앉기 시작한다. 이러한 T(337)에서 D(337)로의 변형은 그림 3 (c)의 T(337) 내의 화살표처럼 원자 하나가 이동함으로써 tet-

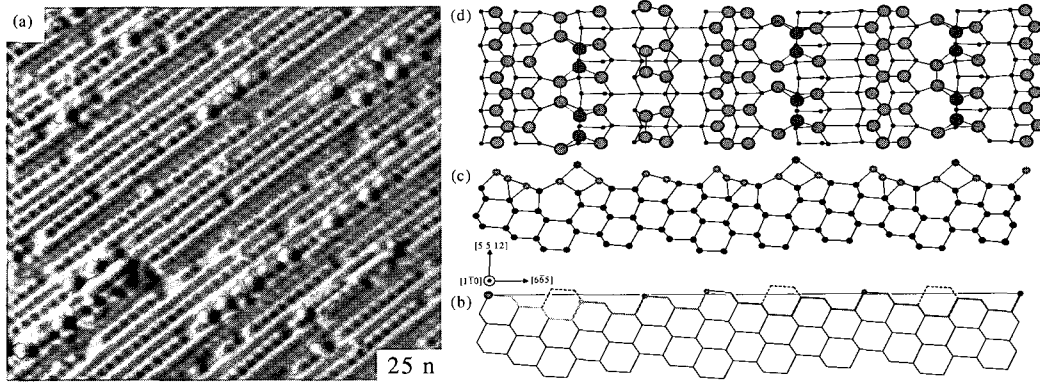


그림 4. Si 원자가 단위 세포 당 열 개 앉았을 때 Si(5 5 12)의 STM image. (a)는 error signal로 4× 주기의 protrusion이 군데군데 보인다. (b)의 점선은 addimer가 앉는 위치를 나타낸다. D(337)은 (112)과 (113)으로 나눌 수 있음을 알 수 있다. (c)와 (d)는 addimer(회색 원)가 2× 주기로 앉은 모습을 옆 및 위에서 본 것이다.

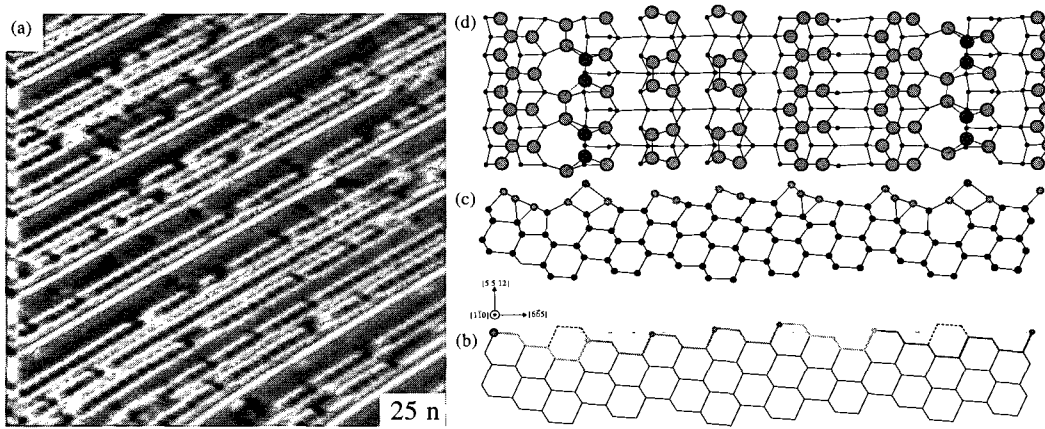


그림 5. Si 원자가 단위 세포 당 열 두 개 앉았을 때 Si(5 5 12)의 STM image. (a)는 error signal로 두 번째 사슬이 형성된 것을 볼 수 있다. (b)의 점선은 addimer가 앉는 위치를 나타낸다. (113)면이 세 주기 이루어졌다. (c)와 (d)는 image 및 정석민 모델[6]에서 추론한 이 때의 원자 모델로 옆과 위에서 본 모습이다. 파란 원은 addimer가 2× 주기로 앉은 것이다.

ramer가 dimer/adatom으로 간단히 바뀐다. 이러한 변형이 일어나는 Si의 증착량은 단위세포 당 두 개가량 흡착될 때 일어난다.

증착된 Si 원자가 단위세포 당 열 개가 되면 그림 4에서 보다시피 (225)의 dimer와 adatom 위에 앉은 addimer가 1× 주기의 사슬이 되고 동시에 D(337)과 (225) 사이의 1× 주기의 사슬은 2× 주기의 tetramer가 된다. 이러한 사슬로의 변형을 위해서는 최초의 D/A 자리에 네 개의 Si 원자(두 개의 addimer)가 더해져야 한다. 이렇게 해서 한 주기의 (113) facet이 만들어지고 (337) 세 주기가 연속된다. 이 변형 과정 동안에 (225)의 tetramer가 있던

자리에 addimer가 2× 주기로 앉고, 곳에 따라 그 위에 Si이 더해져 4× 주기가 된 곳이 있다. 그 때 옆의 사슬은 해체가 일어나 tetramer 선이 되는 것을 발견할 수 있었다.

추가적인 Si의 증착으로 Si 원자가 단위세포당 열 두 개쯤 되면 그림 5에서 나타나는 바와 같이 (225)의 tetramer가 있던 자리에 앉은 addimer가 1× 사슬이 되고 이로 인하여 옆의 사슬은 tetramer가 된다. 이는 (113) 세 단위가 facet을 이루고, 마지막으로 이루어진 사슬과 (225)와 T(337) 사이의 사슬이 (112) 한 단위가 된다.

계속하여 Si을 증착하여 Si 원자가 단위세포 당

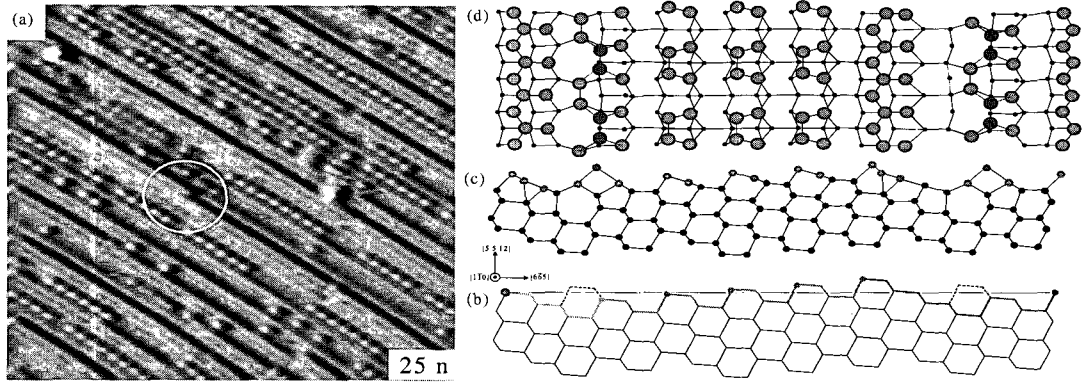


그림 6. Si 원자가 단위 세포 당 열 네 개 앉았을 때 Si(5 5 12)의 STM image. (a)는 error signal로 원 안에서 새로운 사슬이 형성되고 있는 것을 볼 수 있다. (b)는 bulk-terminated 단면이고, 점선은 addimer가 앉는 위치를 나타낸다. (c)와 (d)는 image 및 정석민 모델[6]에서 추론한 이 때의 원자 모델로 옆과 위에서 본 모습이다. 회색 원은 addimer가 2× 주기로 앉은 것이다. (113) facet 네 주기로 이루어졌음을 알 수 있다.

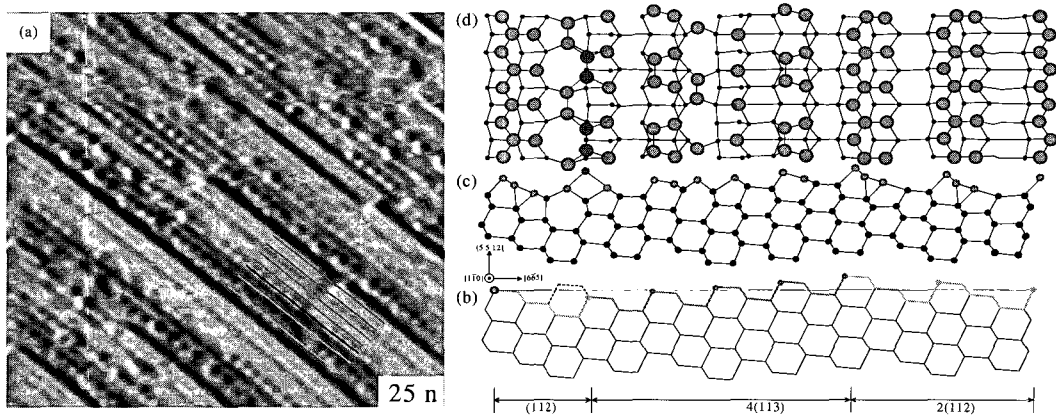


그림 7. Si 원자가 단위 세포 당 열 여섯 개 앉았을 때 Si(5 5 12)의 STM image. (a)는 error signal로 붉은 색은 (113) 주기를, 연두색은 (112) 주기를 나타낸다. (b)는 bulk-terminated 단면이다. 점선은 addimer가 앉는 위치를 나타낸다. (c)와 (d)는 image 및 정석민 모델[6]에서 추론한 이 때의 원자 모델로 옆과 위에서 본 모습이다. Si(5 5 12) 한 주기가 (113) facet 네 주기와 (112) 세 주기의 합으로 바뀌어 산과 골짜기가 주기적으로 나타난다. 여기서는 아직 (112) 가운데 사슬은 미완성인 상태이다.

열 네 개가 되면 그림 6에서 보여 주는 바와 마찬가지로 (225)와 T(337) 사이의 사슬의 (225) 쪽에 새로운 1× 주기의 사슬이 형성된다. 이로 인하여 양쪽에 있었던 사슬은 해체된다. 이렇게 해서 네 주기의 (113) 면이 완성된다.

Si 원자가 단위세포 당 열 여섯 개 증착하면 원래 T(337) 자리에 앉은 addimer가 사슬화되기 시작한다. 그림 7에서는 4× 주기의 나비 모양의 구조가 나타나는 것을 볼 수 있다. 이것이 사슬화되기 직전 모습이다. 여기서 두 번째 주기의 (113)이 tetramer에서 dimer/adatom으로 변형된다. 이것은

(112)면에 사슬이 만들어지면서 장력이 작용하기 때문이다. 이렇게 해서 표면은 Si(5 5 12)의 주기를 그대로 유지한 채 (113) 네 주기와 (112) 세 주기의 산과 골짜기로 이루어진 모양이 된다. 이러한 산의 효과적인 높이는 2.34 Å이다.

그림 8에서는 단위세포 당 Si 원자가 스무 개 증착될 때의 재구조된 STM image이다. 여기서 (112)면을 보면 가운데 사슬이 불규칙적으로 끊김을 알 수 있다. 따라서, 가운데 사슬은 다른 두 사슬들과 원자구조상 다른 구조를 보일 것으로 예상된다. 이는 1차원 구조에서 별집 모양의 1× 주기의 사슬이

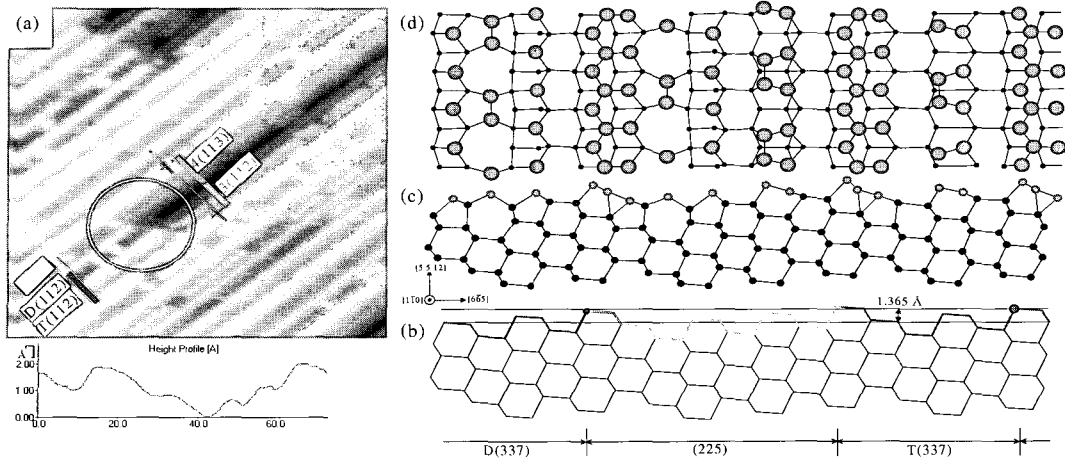


그림 8. Si 원자가 단위 세포 스무 개 앉았을 때 Si(5 5 12)의 STM image. (a)는 topography 및 line profile로 붉은 색은 (113) 주기를, 연두색은 (112) 주기를 나타낸다. 노란 색 원 안은 골짜기를 채우고 있는 곳이다. 채운 뒤의 모습은 (225)는 초록색으로 (337)은 파란색으로 나타내었다. (b)는 bulk-terminated 단면이다. 점선은 addimer가 앉는 위치를 나타낸다. (c)와 (d)는 에피층이 완성된 뒤의 옆 및 위의 모습이다.

외에도 Si(5 5 12)-2×1 구조에 다른 원자 구조의 사슬이 존재할 수 있다는 사실을 알려 주는 증거이다. 그런데 안정된 (112) 면은 넓은 테라스로 존재하기보다는 좁은 면적에서 스트레스를 받을 때에만 나타난다는 사실로 미루어 보아 addimer에 의한 사슬 형성이 상응하는 스트레스를 주는 것으로 생각된다. 그림 8에서 (112) 구조는 Ga으로 야기된 Si(112) 면의 구조와 매우 유사하다. 다만 Ga으로 유도된 것은 가장 높은 곳에 Si 대신 Ga이 들어가 스트레스를 준다는 점이 차이가 있을 뿐이다 [7-9]. Addimer에 의한 스트레스를 풀기 위해 (113)면이 먼저 생기나, 그에 따라 에너지가 높고 불안정한 (112)면이 생기고 이를 해소하기 위해서 골짜기가 메워지면서 (337)과 (225)(또는 (337)+(113)으로 볼 수 있다)로 이루어진 (5 5 12)가 다시 생성되는 것이 그림 8의 STM image의 왼쪽 아래 부분에서 보인다. 그림 8에서 나타난 (112)면에서는 거의 동시에 세 군데에 Si이 올라가면서 일차원적으로 골짜기가 채워지는 모습이 보인다. 이렇게 골짜기가 채워지면서 이웃한 것끼리 서로 만나게 되고 대체적으로 Si(5 5 12)-2×1의 새로운 층이 형성된다. Si 증착 원자가 단위세포 당 dangling bond 수에 해당하는 스물여덟 개가 되면 한 층을 채우게 된다. 이 때 성장한 층의 효과적인 높이는 1.365 Å이 되고, 원래의 Si(5 5 12)-2×1이 전체적으로 D(337) 쪽으로 한 칸 이동한 결과가 된다. 이 모든 단계에서 dangling bond의 수는 스물여덟 개로 일정함을 알 수

있다. 따라서, 성장 과정에서는 표면의 안정적 구조가 dangling bond의 숫자보다는 결과적인 알짜 스트레스에 의해 결정되는 것을 알 수 있다.

지금까지 Si의 증착량을 늘리며 관찰한 결과에 의하면 모든 과정에서 1차원 선이 생기는 우선 순위가 있음을 알 수 있는데, 이를 종합하여 그림 9에서 전체 과정을 높이를 확대하여 개괄적으로 보여 주고있다. Si은 i, ii, iii, iv 순으로 1차원의 선이 완성되면서 산과 골짜기를 이루고, v, vi, vii는 거의 동시에 생성되어 골짜기를 채워 다시 Si(5 5 12)-2×1 재구조가 나타난다. 이때 각 번호는 단위세포 당 네 개의 원자에 해당하여, 이는 총 스물여덟 개의 원자가 처음의 (5 5 12) 면을 회복하는데 필요함을 의미한다. Ga이 Si(337) 표면을 (113)과 (112) 테라스가 교대로 나타나는 구조로 바꾸듯이 Si(337)에 흡착된 Si addimer는 사슬화되면서 스트레스를 유발하여 Si(113)과 Si(112) facet을 이루는 것으로 보인다 [10].

이상의 결과에서 Si(5 5 12)-2×1 호모에피텍시는 495°C라는 비교적 저온에서 수행할 경우 임계 높이가 있는 facet을 먼저 형성하는 아주 독특한 방식으로 성장하고, 이 임계 높이가 한 층의 높이로 결정된다는 사실을 확인하였다. 또한 이 결과는 정석민 등이 제안한 Si(5 5 12)-2×1 모델과 잘 맞아떨어짐을 알 수 있으나 1× 주기의 별집사슬 구조이외의 다른 1× 주기의 사슬 구조가 이 Si(5 5 12) 표면에 존재할 수 있다는 사실을 밝



## Homoepitaxial Growth Mode of Si(5 5 12)-2×1 Confirmed by Scanning Tunneling Microscope (STM)

Hidong Kim, Yumi Cho, and Jae M. Seo\*

*Department of Physics, Chonbuk National University, Jeonju 561-756*

(Received January 11, 2006)

The homoepitaxy of Si(5 5 12) at 495°C has been studied by Scanning Tunneling Microscopy under ultrahigh vacuum. A Si-dimer is the basic building-block and preferentially adsorbs on a unique site, that is, the Si-dimer/adatom site at the (337) and the (225) subsections within the Si(5 5 12) unit cell. The Si(5 5 12) unit cell is faceted to 3×(337) subsections filled with Si-addimers and 1×(113) subsection. In this step the tetramer at the other (337) section within the unit cell is transformed to a dimer/adatom site which can accept Si-dimers. Each (337) section is faceted to 1×(112) and 1×(113), and then finally the unit cell of Si(5 5 12) is faceted to 3×(112) and 4×(113) and forms the facet of effective height, 2.34 Å. In this step, mutual transformation between the honeycomb chain and the dimer/adatom occurs. Finally, the valley between (112) and (113) facets is filled. If once the last step is completed, the uniform and planar Si(5 5 12) terrace is recovered. From the present study, therefore, it can be concluded that the homoepitaxy on Si(5 5 12) is periodically achieved and such growth mode is quite unique since faceting of the substrate-unit-cell plays a critical role for controlling uniformity of the overlayer.

Keywords : Scanning tunneling microscope, High Miller indices, Silicon-surface, Homoepitaxy

\* [E-mail] seojm@chonbuk.ac.kr