

# 양전자 소멸 Auger 전자 에너지 측정을 위한 Time of Flight의 분해도 향상에 관한 이론적 연구

김재홍<sup>1\*</sup>, 양태건<sup>1</sup>, 이종용<sup>2</sup>, 이병철<sup>3</sup>

<sup>1</sup>한국원자력의학원 가속기이용기술연구팀, 서울 139-706

<sup>2</sup>한남대학교 물리학과, 대전 500-460

<sup>3</sup>한국원자력연구원 양자광학팀, 대전 980-8577

(2008년 4월 1일 받음, 2008년 6월 18일 수정, 2008년 6월 19일 확정)

저에너지 (수 eV) 양전자 빔을 이용하여 도체나 반도체의 표면/계면의 물리화학적 특성 분석에 독특한 유용성이 보고 되고 있다. 기존의 표면 분석법에 비해 표면의 선택도가 향상되어 반도체 소자의 박막 두께가 얇아지는 최신기술에 적합한 분석법으로 주목을 받고 있다. 물질표면에 조사된 저에너지 양전자는 표면 근처의 image potential에 포획이 되어 표면에 있는 전자들과 쌍소멸하며 Auger 전자를 방출한다. 표면으로부터 방출된 Auger 전자의 에너지를 측정함으로써 원자의 화학적 구별이 가능하므로 검출기의 에너지 분해도가 중요하다. 기존의 ExB 형태의 에너지 측정기는 분해도가 6~10 eV 정도이고 특정한 에너지 영역만을 일정시간 스캔하여 스펙트럼을 측정하므로 측정시간이 길어진다는 단점이 있다. 반면에 Time-Of-Flight(TOF) 시스템은 방출되는 전자들의 에너지를 동시에 검출하므로 측정시간이 단축되어 측정 효율이 향상된다. 에너지 분해도를 높이기 위해서는 측정하고자 하는 전자의 진행거리를 길게 할수록 좋으나, 공간적 제약을 고려한 reflected TOF 시스템과 retarding tube을 이용한 linear TOF 시스템의 에너지 분해도를 이론적으로 시뮬레이션하였다.

주제어 : Auger 전자, 표면분석, TOF 시스템, 에너지 측정기, 양전자 소멸

## I. 서 론

최근 저에너지 (수 eV)의 양전자(陽電子)와 물질의 표면과의 상호작용의 이해가 깊어지면서 고체의 표면을 연구하는데 독특한 분광기(分光器)로서 사용되고 있다[1]. 반도체나 도체 표면에 낮은 에너지로 조사된 양전자들은 대부분 표면 밖에 한 개의 원자크기의 거리에 형성되어 있는 image potential에 포획된다. 포획된 양전자의 수 % 정도는 표면에 있는 원자의 코어(core) 전자와 소멸되고, 그 소멸된 자리에 코어 홀(hole)이 생성되어 불안정한 원자 상태가 된다. 불안정한 원자가 안정화되는 과정에서 X-선 또는 Auger 전자를 방출한다. 이때, 생성된 X-선 또는 Auger 전자의 에너지를 측정함으로써 원자들의 화학적 성분을 분석할 수 있다. 저에너지 (수 eV) 양전자를 이용한 방법은 1000배 정도 높은 에너지를 갖는 (수 keV)전자나 광자를 이용한 방법에 비해 향상된 표면 선택도를 보여준다.[2] 향상된 표면 선택도와 더불어, 에너지가 낮은 양전

자를 표면에 조사함으로써 탄성 충돌에 의해 부가적으로 생성되는 이차 전자의 분포를 줄일 수 있어 signal-to-noise 비율을 향상시킬 뿐만 아니라 표면에 결함 또는 변화의 생성을 줄일 수 있다.

생성된 전자들의 (Auger 전자 포함) 에너지를 측정하는 간단한 방법으로 ExB 에너지 선별기 [3]를 사용하였으나, 에너지 분해도 (6-10 eV)가 낮고 측정시간이 길어지는 단점이 있다. 최근에는 중성자 등 여러 종류의 입자에너지를 측정하는데 사용되는 Time-Of-Flight (TOF) 시스템을[4] 이용하여 높은 에너지 분해도와 측정시간의 단축으로 표면연구에 적용을 하고 있다. 본 논문은 linear TOF 시스템과 reflected TOF 시스템을 비교하는 시뮬레이션 결과를 실험과[5] 비교하여 표면연구에 적용이 가능함을 보고하고자 한다.

## II. 실험

Auger 전자 방출과정은 Fig. 1에 도식화 된 것 같이 가

\* [전자우편] jhkim68@kcch.ac.kr

벼운 원소의 경우는 X-선 방출 단면적보다 훨씬 높아 원소 분석에 효과적이다 [5]. 수직방향으로 전자의 구속에너지의 크기를 나타내며, 아래 방향의 궤도에 있는 전자가 큰 에너지를 갖는다. Fig.1(좌)는 수 keV의 입사전자가 M-shell에 있는 코어 전자를 충돌에 의해 방출시킨다. 코어 전자가 빠진 양의 전하 상태를 코어 홀이라 부르고, 원자가 양의 전하를 띤 불안정한 원자의 상태가 된다. 이때, Valence band에 있는 외각전자가 코어 홀을 채우는 과정에서 발생하는 잉여에너지를 Valence band에 있는 제 2의 전자가 포획하여 물질의 일함수를 극복하고 물질 밖으로 방출하게 된다. 이때 방출되는 전자를 Auger 전자라고 한다. Auger 전자의 운동에너지는 각 원자의 전자가 갖는 궤도에너지에 따라 특징적인 에너지를 갖는다. 예를 들어 위의 과정을 통해 방출되는 MVV Auger 전자가 갖는 에너지는 식(1)과 같이 계산된다.

$$E_{MVV} = E_M - E_V - E_V - \phi \quad (1)$$

여기서  $E_M$  와  $E_V$  는 각각 전자의 구속에너지이다.  $\phi$ 는 물질의 일함수이다.

유사한 방법으로 양전자는 M-shell의 코어(core) 전자와 쌍소멸과정을 통해 코어 홀을 생성한다. (Fig. 1(우)) 그 이후의 과정은 전자를 이용한 과정과 동일하다. 따라서 양전자 소멸과정을 통해서 방출되는 Auger 전자의 에너지도 동일하게 식(1)이 적용된다. 예를 들어, 구리의 M-shell 코어 홀이 생성되고 Valence 밴드에 있는 전자가 코어 홀을 채우고 다른 외각전자가 방출되는 천이과정에서 얻어지는 MVV Auger 피크가 Fig. 2의 스펙트럼에서 보여진다.

탄소 KLL(270 eV), 질소 KLL(360 eV), 그리고 산소

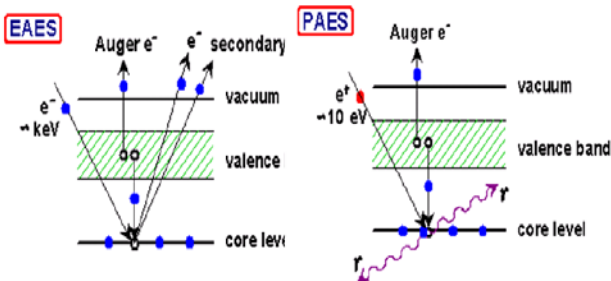


Fig 1. Cu MVV Auger electron emission process [4]. The binding energy of an outer M core level of Cu atom is about 75eV. (EAES : Electron induced Auger Electron Spectroscopy, PAES : Positron-annihilation induced Auger Electron Spectroscopy)

KLL(510eV) Auger 피크가 각각의 원소를 구별 할 수 있는 대표적 신호이다. 본 연구에서도 세 개의 특징적인 Auger peak들에 대해 시뮬레이션을 수행하였다. 실험적으로 얻어진 식(2)에 근거하여 양전자가 특정 궤도에 있는 코어전자와의 소멸률은 수 % 정도이다.

$$p = 600[N(E_b)] (E_b)^{-1.6} \quad (2)$$

여기서  $E_b$ 는 특정궤도의 전자의 구속에너지(eV)이고,  $N$ 은 특정궤도 전자의 수 이다. 식으로부터 전자의 구속에너지가 클수록 양전자와의 소멸율은 감소함을 알 수 있다.

이러한 과정을 통해 구리 표면에서 방출된 Auger 전자의 에너지스펙트럼은 Fig. 2의 (a)전자 빔 이용과 (b) 양전자 빔 이용의 경우가 뚜렷이 구별된다. 전자빔을 이용하는 경우 Cu의 Auger 피크가 높은 이차전자의 분포와 섞여 있는 형상이나, 양전자를 이용하는 경우는, Cu의 Auger 피크가 이차전자와 중첩되지 않고 뚜렷한 신호를 보여주는 장점이 있다. Fig. 2(a)와 같이 전자빔을 이용하는 경우 Auger peak의 구분이 분명하지 않으므로 미분형 스펙트럼 형태로 전환하여 Auger 전자의 에너지를 결정한다. 하지만, 양전자의 경우는 측정된 스펙트럼에서 전자의 에너지를 직접 확인 할 수 있다는 장점이 있다. 하지만, 에너지 분해도가 낮고 측정시간이 길다는 단점이 있다. 이러한 단점을 극복하기 위한 에너지 측정시스템의 개선이 필요하다. 에너지 분해도의 향상과 측정시간의 단축을 위해 Fig. 3 과 같이 전자에너지 측정을 위한 TOF 시스템이 연구되어지고 있다. 본 연구에서는 linear TOF에서 에너지 분해도를 향상하기 위한 전자의 가속에너지 변화와 전자의 유도(drift) 거리를 늘여주는 reflected TOF 시스템을 측정값과 이론적으로 비교하여 최적의 조건을 확립하고자 하였다.

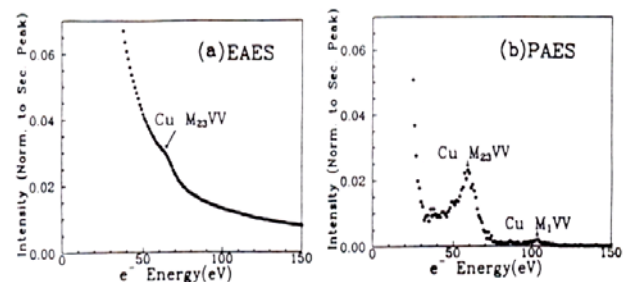


Fig 2. Typical spectra of electrons from Cu(100) surface[2]. (a) A spectrum obtained by employing 3keV electron beam, (b) 25eV positron beam.

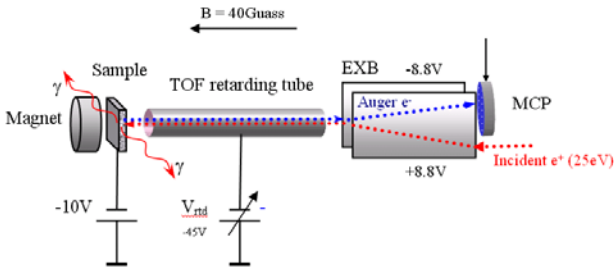


Fig 3. TOF system for measuring the energy of electrons [4]. A red dotted line from right to left represents the path of 25eV positrons, a blue dotted line from left to right indicates travel direction of electrons originated from a sample surface. A TOF retarding tube is located between the sample and a detector.

### III. 결과 및 고찰

Fig. 3은 분석하고자 하는 시료로부터 방출되는 전자의 에너지를 측정하기 위한 TOF[3] 장치의 개략도이다. 샘플과 MCP 검출기 사이에 1.0m의 TOF retarding tube를 설치하여 전자가 이동거리가 1m이다. 전자가 통과하는 시간은 전자의 가속에너지에 반비례한다. 전자의 유동시간과 에너지의 관계는 식(3)와 같이 주어진다.

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{ml^2}{2(t_{stop} - t_{start})^2} = \frac{ml^2}{2t_{flight}^2} \quad (3)$$

여기서  $E_k$ (eV)는 전자의 운동에너지,  $l$ (m)은 유동튜브의 길이 (전자의 유동거리),  $t$ (usec)는 전자의 유동 시간을 나타낸다. 식(3)을 다시 정리하여 전자의 에너지를 유동시간의 함수로 표현하면 식(4)와 같이 정리된다.

$$t = \frac{l}{v} = \frac{l}{\sqrt{\frac{2E}{m}}} = \sqrt{\frac{ml^2}{2E}} \quad (4)$$

$$dE = -\frac{ml^2}{t^3} dt \quad (5)$$

식(4)으로부터 에너지의 분해능은 식(5)와 같이 유도되며, 단위 시간당 (채널당) drift tube의 길이의 제곱승에 비례하고, 유동시간의 삼승에 반비례한다. 즉, 전자의 유동길이 길어질수록 에너지 분해도는 향상되고, 유동시간이

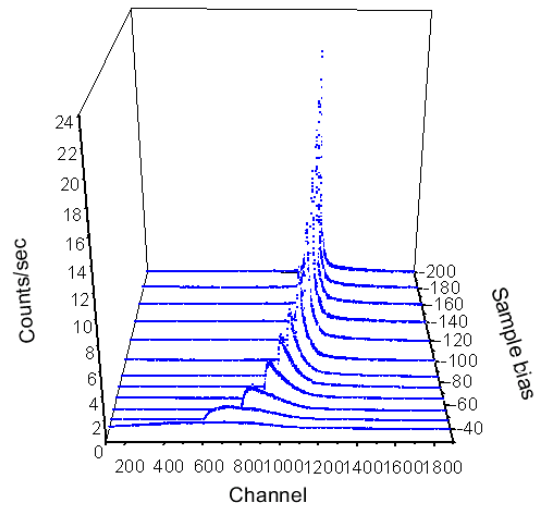


Fig 4. Spectrum of secondary electron distribution from Cu surface [4]. X-axis represents the time of travel of electrons, indicating fast electrons at higher channel number.

짧을수록 분해도는 저하된다.

Fig. 4는 Fig. 3의 TOF 시스템을 이용하여 구리 샘플에서 발생하는 이차전자의 분포를 샘플 전압의 함수로 측정 한 이차전자의 에너지 스펙트럼이다. 샘플 전압을 -40에서 -200eV 까지 변화시키면 (음의 전압을 가하므로 전자가 가속되는 효과를 얻음) 이차전자의 분포는 에너지가 클수록 (가속전압이 높을수록) 유동시간이 짧아지고 (피크가 높은 채널 쪽으로 이동) 분포의 폭이 좁아진다. 단위 채널 당 에너지 변화가 커지므로 에너지 분해도가 저하된다.

Fig. 5는 측정에서 얻어진 이차전자의 스펙트럼 (Fig. 4)

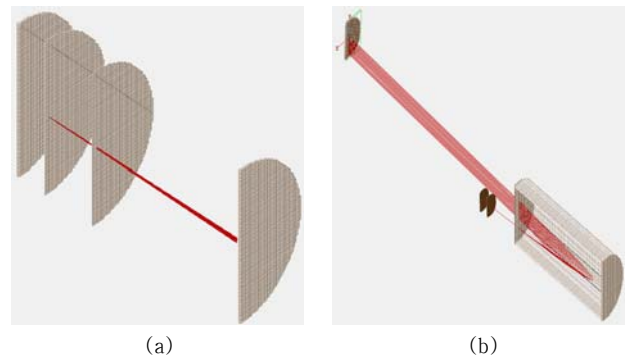


Fig 5. Schematics of a linear TOF system (a) and a reflected TOF system (b) used in this work. In general, TOF system is consist of three parts. From left side, electron generation area, accelerating, and drift zone where is equipotential space. A detector is located at the end of electron's path.

을 이론적으로 비교하기 위하여 linear TOF(a)와 reflected TOF(b)를 구성하여 전사모의를 수행하였다. 일반적으로 TOF 시스템은 세부분으로 구성되는데, 전자 발생 영역 (왼쪽), 전자 가속영역 (중간), 그리고 유동영역 (오른쪽)이다. Fig. 5에서 보여주듯이 측정하고자 하는 전자의 궤도가 일직선인 경우를 linear TOF(a)라 하고, (b)와 전자의 궤도가 굽어진 경우를 reflected TOF system이라 한다. 후자의 경우에 전자의 유동경로가 길어지므로 에너지 분해도가 향상된다. 본 연구에서는 전자의 이동경로를 1 m로 동일한 조건에서 비교하였다.

Fig. 6은 가속전극의 변화에 따른 이차전자의 에너지 분포를 (0.1~5.1 eV, 2.5eV 피크) TOF 유동시간의 스펙트럼을 전사모의 한 결과를 그래프에 도식화 하였다. 식(3)과 식(4)에서 예측 할 수 있듯이, 가속전압이 커질수록 전자의 에너지( $E_k$ )가 증가하여, 운동량이 커져 유동속도가 빨라지므로 유동시간이 짧아진다. 가속전압이 커질수록 이차전자의 에너지 (0~5V) 분포가 왼쪽 (유동속도가 빨라짐)으로 이동하고 폭이 좁아져 단위 시간당 에너지 변화량이 커져 분해도가 저하된다. Fig. 6의 시뮬레이션 결과는 측정 결과와 동일한 경향을 보인다.

Fig. 7은 linear TOF 시스템의 0V의 가속전압을 인가하였을 때의 스펙트럼과 reflected TOF의 스펙트럼을 비교

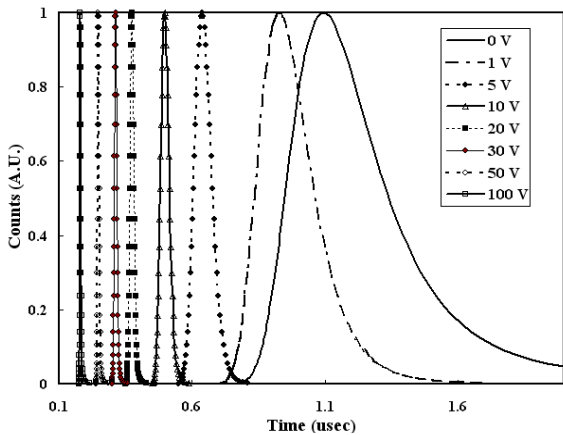


Fig 6. Secondary electron energy distribution as a function of applied sample bias for linear TOF system. The higher sample bias are applied, the narrower distribution of distribution having the peak shift to faster time. In addition, the width of the time distribution becomes narrow making a poor time resolution. In the case of 0V applied at the sample, the time resolution becomes better, however, a small bias was applied practically.

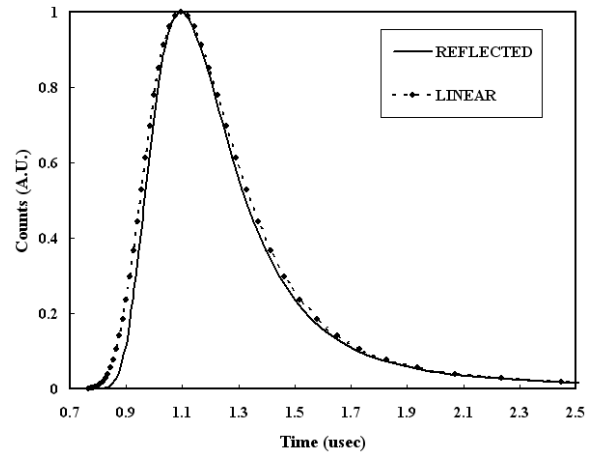


Fig 7. Comparison of electron energy distribution spectra obtained by a linear TOF system (0V applied) (dotted line) and a reflected TOF (solid line). Since the total path of electron's traveling, the TOF spectra is nearly identical. In reflected TOF, a narrower space can be fitted, but the location of detector has to be considered when it is designed when system.

하였다. 전자의 비행거리가 동일한 조건에서 TOF 스펙트럼이 동일하게 얻어졌다. reflected TOF 시스템의 경우에 동일한 공간에서 전자의 경로를 증가 시킬 수 있으므로 TOF의 시간 분해도를 증가 시킬 수 있는 장점이 있다. 하지만, 전자 궤도에 따른 검출기의 위치 배열에 따른 고려가 필요하다.

Fig. 8은 측정하고자 하는 전자의 에너지에 따른 피크의 반폭치(full width at half maximum, FWHM(nsec))를 도표로 나타내었다. Fig. 4의 실험( )과 Fig. 6의 시뮬레이션 결과(-)가 비교적 잘 일치함을 알 수 있다. 현재의 기하학적 배열을 갖는 TOF 시스템의 시간 분해능은 0.15 nsec 정도이다. TOF의 시간 분해능을 향상시키기 위해서 retarding tube에 음의 전위를 인가하여 전자들의 유동시간을 길게 하는 방법이 연구되어지고 있다. 본 연구에서도 동일한 조건에서 탄소 C KLL(270 eV), 질소 N KLL(360 eV), 그리고 산소 O KLL(510eV) Auger 피크의 TOF 스펙트럼을 retarding 전위의 변화에 따른 시뮬레이션을 수행하였다. Fig. 9의 점선은 선형 TOF 시스템 (retarding voltage=0V)과 reflected TOF 시스템에서 얻은 각각의 산소, 질소 그리고 탄소의 Auger 전자 스펙트럼이다. 동일한 조건에서 retarding tube에 -250V를 인가하여 얻은 스펙트럼에서 (Fig. 9의 실선) 각각의 Auger 피크의 구별이 뚜

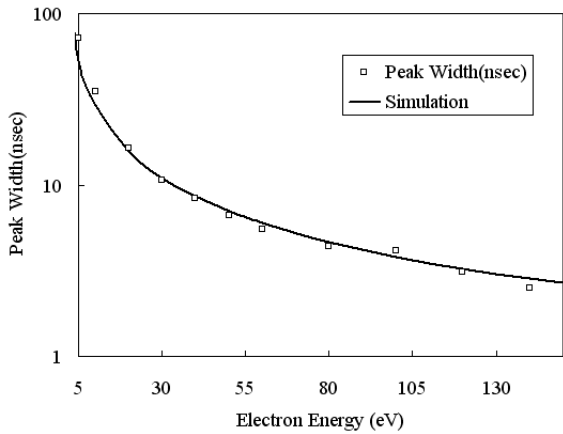


Fig 8. The FWHM of energy resolution as a function of electron energy(eV). The results from Fig. 4 (□) and the simulation result from Fig. 6 (—) are shown in a good agreement within statistical errors.

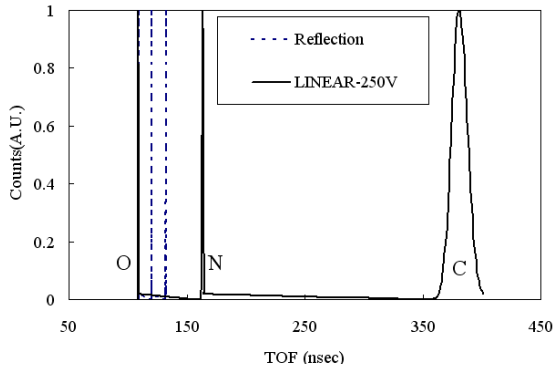


Fig 9. Simulated Oxygen Auger peak(510eV), Nitrogen Auger peak(360 eV), Carbon Auger peak (270 eV) from a linear TOF ( $V_{ret}=0$ , solid line) and reflected TOF(dotted line). By applying retarding voltage with  $-250V$ , the Auger peaks can be distinguished clearly by lowering the their kinetic energies.

렷해진다. 적당한 retarding tube에 전위를 인가하여 TOF 스펙트럼의 시간 분해도를 향상 시킬 수 있다.

결론적으로, 기존의 ExB 에너지 측정기보다 에너지 분해도와 측정률이 높은 장점을 갖는 TOF 시스템의 도입이 가능하다. 동일한 공간에서 linear TOF 보다는 reflected TOF가 전자의 유동경로를 길게 함으로 향상된 에너지 분해도를 갖는다. 선형 TOF 시스템에서도 retarding tube을 사용함으로 TOF의 시간 분해도를 향상시켜 전자들의 에너지를 측정 할 수 있다.

### 감사의 글

본 연구는 원자력기반확충사업 사이클로트론 이용자 지원 및 이용활성화 과제지원으로 수행되었다.

### 참고문헌

- [1] C. Y. Lee, W. N. Kang, Y. Nagai, K. Inoue, and M. Hasegawa, *J. Kor. Vac. Soc.* **17**, 160 (2008).
- [2] Alex Weiss, Rulon Mayer, Mohammed Jibaly, Chun Lei, David Mehl and K. G. Lynn, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2245 (1988).
- [3] Chun Lei, David Mehl, A. R. Koymen, Fred Gotwald and Alex Weiss, *Rev. Sci. Instrum.* **60**, 3656 (1989).
- [4] S. A. Hilbert, B. Barwick, M. Fabrikant, C. J. G. J. Uiterwaal, and H. Batelaan, *Applied Physics Letters* **91**, 173506 (2007).
- [5] Shuping Xie, Ph.D. Dissertation, University of Texas at Arlington (UTA), USA (2002).

## Simulation of Energy Resolution of Time of Flight System for Measuring Positron-annihilation induced Auger Electrons

J. H. Kim<sup>1\*</sup>, T. K. Yang<sup>1</sup>, C. Y. Lee<sup>2</sup>, and B. C. Lee<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Accelerator Application Team, Korea Institute of Radiological and Medical Sciences (KIRAMS), Seoul 139-706*

<sup>2</sup>*Physics Department, Hannam University, Daejeon 361-763*

<sup>3</sup>*Electron Application Team, Korea Atomic Energy Research Institute (KAERI), Daejeon 980-8577*

(Received April 1, 2008, Revised June 18, 2008, Accepted June 19, 2008)

Since the presence of the chemical impurities and defect at surfaces and interfaces greatly influence the properties of various semiconductor devices, an unambiguous chemical characterization of the metal and semiconductor surfaces become more important in the view of the miniaturization of the devices toward nano scale. Among the various conventional surface characterization tools, Electron-induced Auger Electron Spectroscopy (EAES), X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) and Secondary Electron Ion Mass Spectroscopy (SIMS) are being used for the identification of the surface chemical impurities. Recently, a novel surface characterizaion technique, Positron-annihilation induced Auger Electron Spectroscopy (PAES) is introduced to provide a unique method for the analysis of the elemental composition of the top-most atomic layer. In PAES, monoenergetic positron of a few eV are implanted to the surface under study and these positrons become thermalized near the surface. A fraction of the thermalized positron trapped at the surface state annihilate with the neighboring core-level electrons, creating core-hole excitations, which initiate the Auger process with the emission of Auger electrons almost simultaneously with the emission of annihilating gamma-rays. The energy of electrons is generally determined by employing ExB energy selector, which shows a poor resolution of 6~10eV. In this paper, time-of-flight system is employed to measure the electrons energy with an enhanced energy resolution. The experimental result is compared with simulation results in the case of both linear (with retarding tube) and reflected TOF systems.

Keywords : Auger Electron, Positron annihilation, surfaces, TOF system, Energy selector

\* [E-mail] jhkim68@kcch.ac.kr