

SEMI 사업부 교육 (동탄 사무소)

XRD 기본 및 박막 측정법 이해

(특별주제 1 – Si (002) 피크와 Si (113) 피크 관련 의문들)

2025. 06. 20

김창수 박사 / 고문

응용기술그룹/한국아이티에스 (Korea ITS)

• 내용

1. XRD 이해

- X-선 및 결정구조, Bragg 회절 법칙
- 분말 XRD: 광학계 및 $2\theta/\theta$ scan, 상분석

2. 박막 ?

- 박막 구조특성 및 측정법

3. X-선 저각입사 (Grazing Incidence, GI) 박막 측정법

- X-선 저각입사 (GI) ?
- 평행빔 광학계 (Parallel Beam Optics)
- GI 박막 측정법 이해 및 응용
 - GI-XRD (GID)
 - In-plane XRD
 - XRR (X-Ray Reflectivity 측정)

4. High Resolution XRD: HRXRD

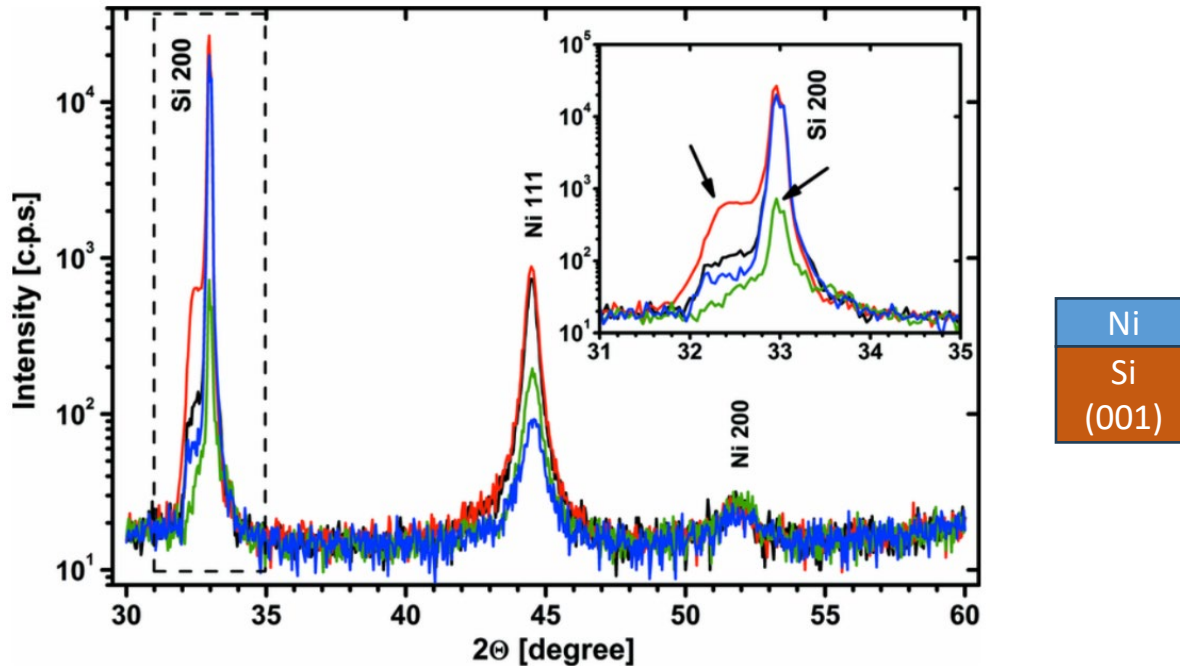
- X-선 회절 이론: 동역학 이론 (Dynamical Theory) vs. 정역학 이론 (Kinematical Theory)
- 고분해능 의미?
- Rocking curve 측정/분석
- RSM 측정/분석

5. 정리

- 특별 주제

- Si (001) 기판의 XRD 측정시 흔하게 만나는 의문 1

왜 Silicon (001) 기판에서 (002) 회절 peak ($2\theta_B = \sim 33^\circ$)이 나타나는가 ???



Si (001) 기판 위에 성장한 Ni 박막에 대한 XRD profile

• 회절빔의 강도

- (분말법) 회절빔의 강도 (Intensity of Diffracted X-rays): I

$$I = I_0 \cdot |F_{hkl}|^2 \cdot p \cdot A \cdot \frac{(1 + \cos 2\theta)}{(\sin 2\theta \cos \theta)} \cdot e^{-2M}$$

- I_0 : 입사빔의 강도
- F_{hkl} : 구조인자 (structure factor)
- p : 다중도인자 (multiplicity factor)
- A : 흡수인자 (absorption factor)
- $(1 + \cos 2\theta)/(\sin 2\theta \cos \theta)$: Lorenz-Polarization factor
- e^{-2M} : 온도인자 (temperature factor)

• Extinction Rule (소멸 규칙/선택 규칙)

• 나올 수 없는 회절 피크 (Forbidden reflections)에 대한 규칙

- Forbidden reflections (금지된 회절/반사) :

- Bragg 회절조건이 만족되어도 구조인자 (structure factor)가 0 (zero) 가 되어 회절이 소멸

- 정역학 (운동학) 회절 이론 (Kinematical Diffraction Theory) 적용: 분말

$$n\lambda = 2d \sin \theta_B$$

회절강도 (Intensity): $I \propto |F|^2$

구조인자 (structure factor)

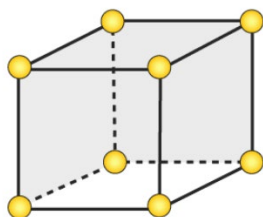
$$\sum_{n=1}^N f_n e^{2\pi i(hu_n + kv_n + lw_n)} \equiv F_{hkl}$$

Bravais Lattice	Reflections which <i>may be present</i>	Reflections <i>necessarily absent</i>
Simple	all	None
Body centred	(h + k + l) even	(h + k + l) odd
Face centred	h, k and l unmixed	h, k and l mixed
End centred	h and k unmixed <i>C centred</i>	h and k mixed <i>C centred</i>

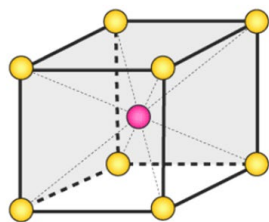
Bravais Lattice	Allowed Reflections
SC	All
BCC	(h + k + l) even
FCC	h, k and l unmixed
DC	h, k and l are all odd or all are even (h + k + l) divisible by 4

구조인자에 의한 각 결정구조에서의 Extinction Rule

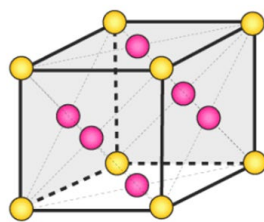
Extinction Rule (소멸 규칙):



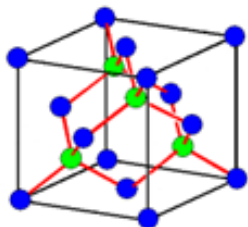
Simple cubic unit cell



Body-centred Cubic Unit Cell (BCC)



Face-centred Cubic Unit Cell (FCC)



Diamond cubic (DC) Structure

Cannot be expressed as $(h^2+k^2+l^2)$

$h^2 + k^2 + l^2$	SC	FCC	BCC	DC
1	100			
2	110		110	
3	111	111		111
4	200	200	200	
5	210			
6	211		211	
7				
8	220	220	220	220
9	300, 221			
10	310		310	
11	311	311		311
12	222	222	222	
13	320			
14	321		321	
15				
16	400	400	400	400
17	410, 322			
18	411, 330		411, 330	
19	331	331		331

구조인자에 의한 각 결정구조에서의 Extinction Rule
- 허용되는 회절면 -

<https://slideplayer.com/slide/3866193/>

구조인자 F_{hkl} : Diamond cubic structure (예: Si)

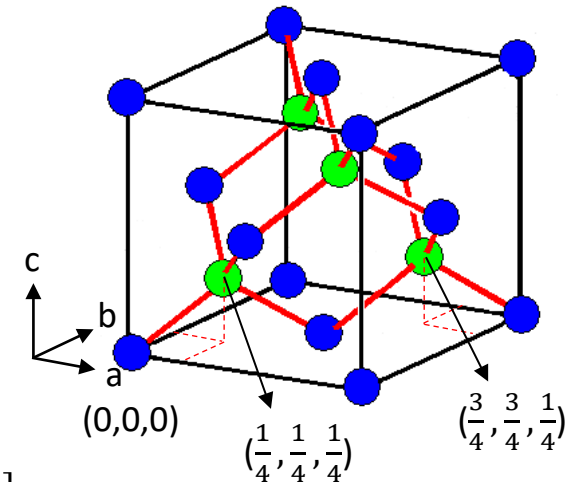
Unit cell (단위포)에서 원자 위치

$$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$$

$$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right)$$

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^8 f_n e^{-2\pi i(hu_n + kv_n + lw_n)} = f[1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{k+l} + (-1)^{h+l}] \\ \times [1 + (-i)^{h+k+l}]$$

$$F_{hkl} = 0, \quad h, k, l \text{ mixed} \\ \neq 0, \quad h, k, l \text{ all even or all odd} \\ = 8f, \quad h + k + l = 4N \\ = 4(1 \pm i)f, \quad h + k + l = 2N + 1 \\ = 0, \quad h + k + l = 4N + 2$$



Crystal structure of Diamond cubic

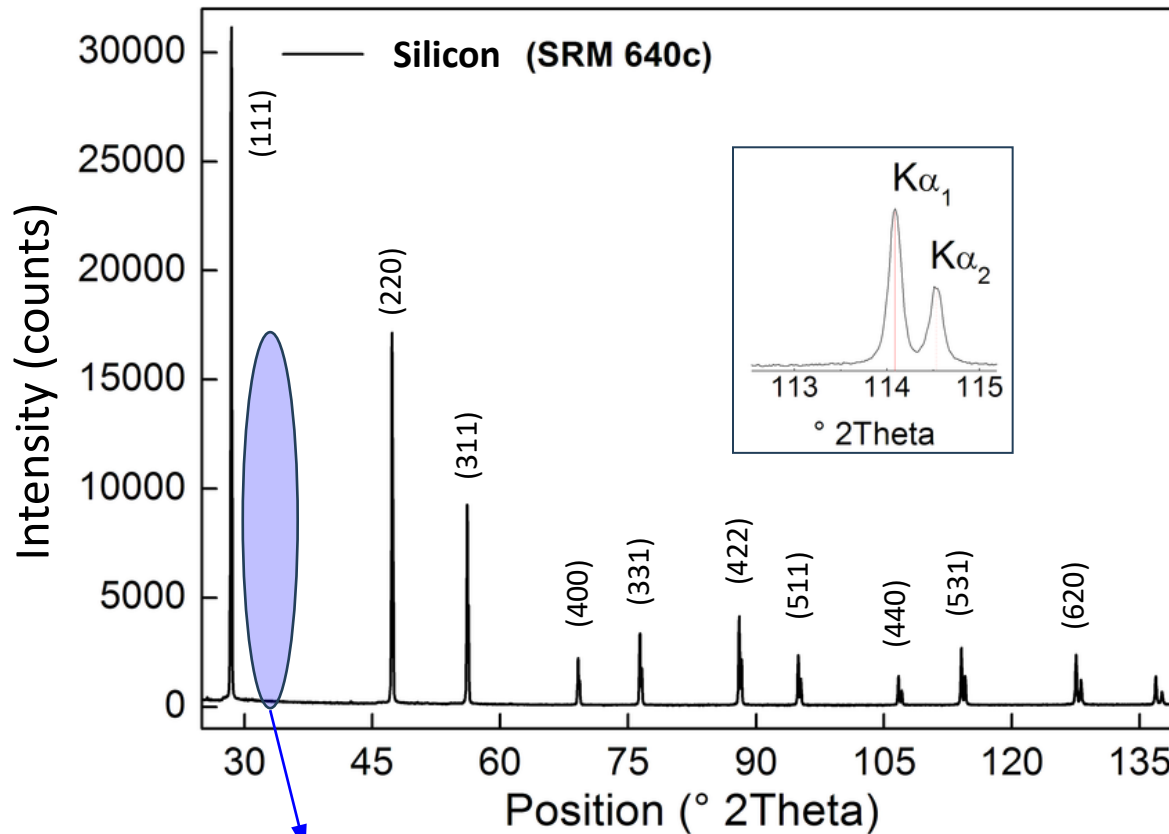
f : 원자산란인자
 h, k, l : 면지수
 N : 정수

$N = 0$ 일 때,

$F_{002} = 0 \rightarrow (002)$ 면은 forbidden reflection임

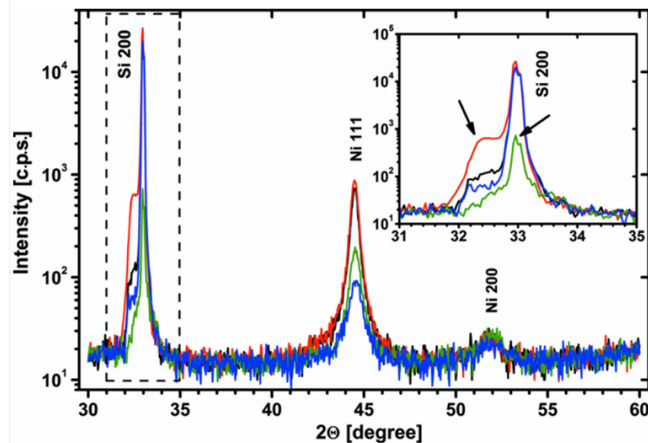
(111), (220), (311), (400), (331), ... 등의 회절피크가 나타남

X-선 회절패턴: Si 분말

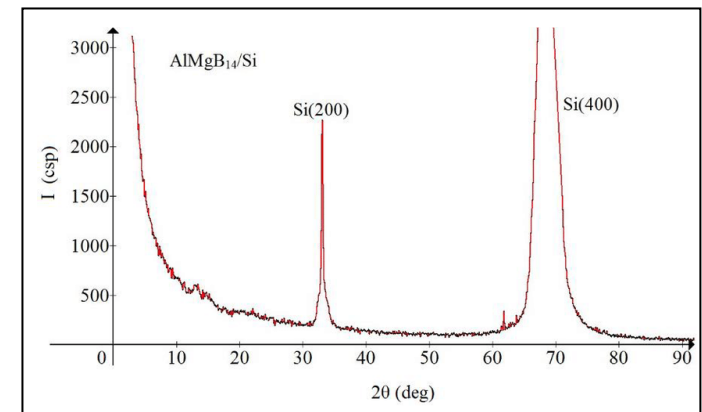


$2\theta_B \cong 33^{\circ}$ 의 (002) peak: missing !!!

왜 Silicon 단결정 기판에서 (002) 회절 peak ($2\theta_B = \sim 33^\circ$)가 나타나는가 ???



Si (001) 기판 위에 성장한 Ni 박막에 대한 XRD profile

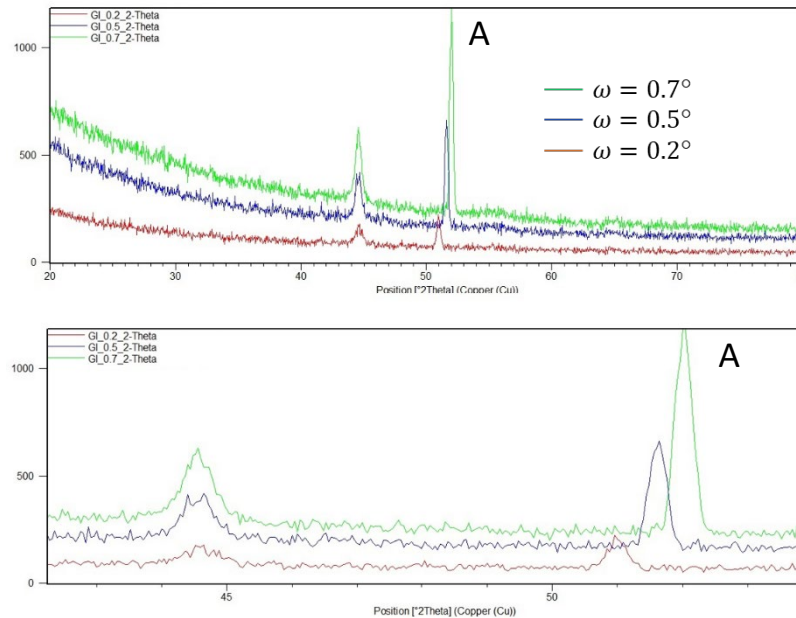


동역학 회절 (Dynamical Diffraction)에서의
다중회절 (multiple diffraction)에 의해,
즉, 정역학 회절 (Kinematical diffraction)의
분말 XRD의 (002)와 같은 forbidden 회절이
단결정 Si에서는 나타나게 됨

같은 원리로,
Si 단결정의 (004) 회절 피크 역시
상당히 강한 회절강도가 나타나게 됨

• Si (001) 기판의 XRD 측정시 흔하게 만나는 의문 2

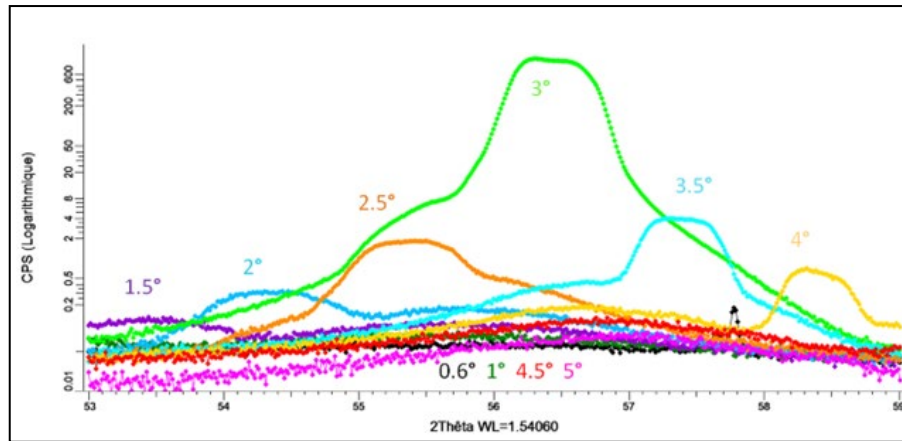
(001) Si 단결정 기판에서 GIXRD (저각입사 2θ scan) 측정에서
입사각 (ω)에 따라 $\sim 51^\circ < 2\theta < \sim 60^\circ$ 에서 피크가 나타나는 경우가 있다.
이 피크의 정체는 뭘까?



$\omega(^{\circ})$	$2\theta(^{\circ})$
0.2	51.0
0.5	51.6
0.7	52.0

Silicon기판 위의 박막에 대한 XRD Profile
(Peak A가 입사각 (ω)에 따라 peak shift가 나타남)

Peak shift의 다른 예



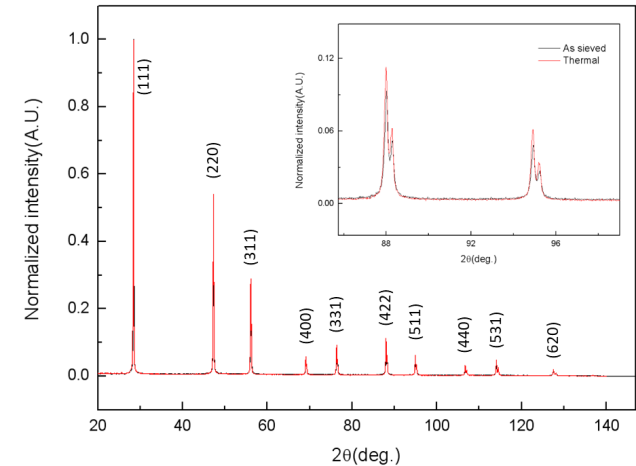
$\omega(^{\circ})$	$2\theta(^{\circ})$
2.0	54.3
2.5	55.4
3.0	56.4
3.5	57.4
4.0	58.4

Silicon (001) 기판에서의
GIXRD 입사각 (ω)에 따른 peak shift



Si (311) 또는 (113) 회절 피크 ($2\theta_B = \sim 56.2^{\circ}$)

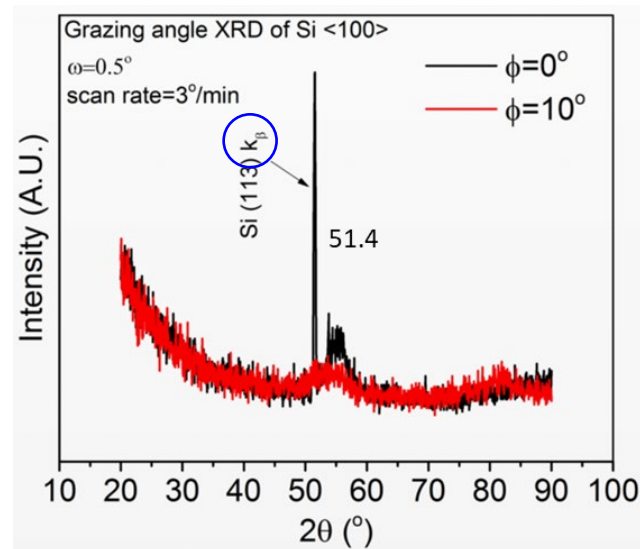
X-선 회절패턴: Si 분말



그러면, 왜 Peak shift ???

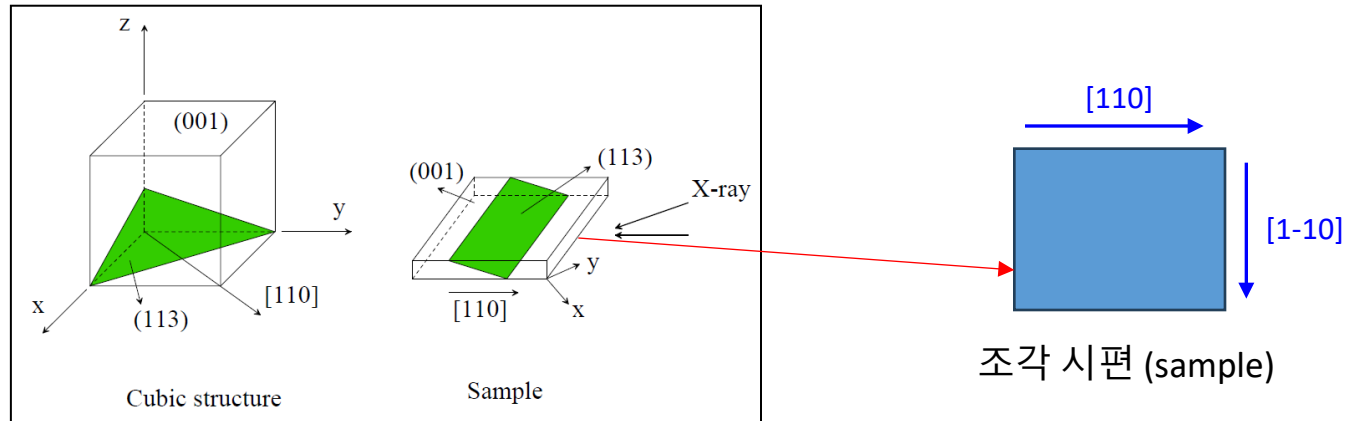
입사각 (ω)에 따른 Si (113) 피크의 XRD profile 에서의 각도 (2θ) 변화

$\omega(^{\circ})$	0.2	0.5	1.0	3.0	5.0
$2\theta(^{\circ})$	50.8	51.4	52.4	56.4	60.4

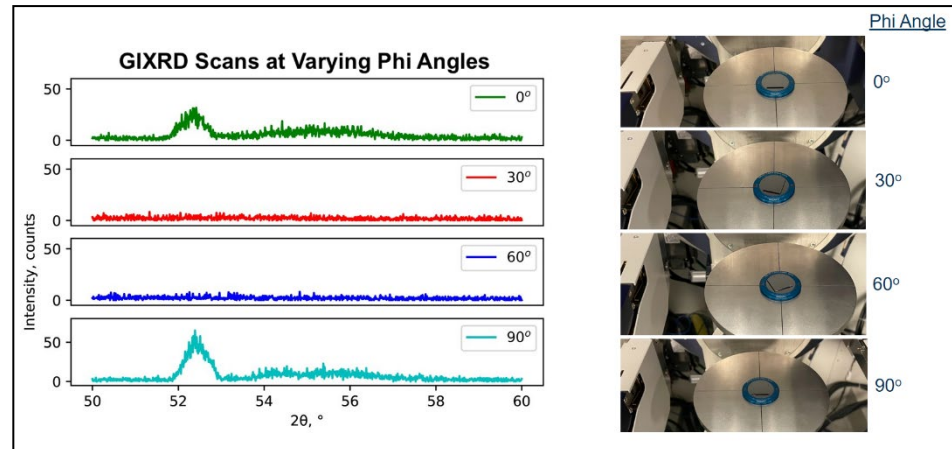
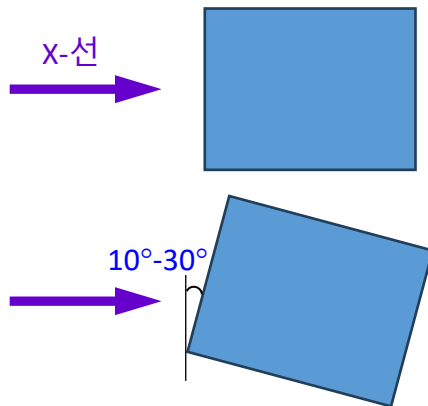


Wrong indexing !!

Si (113) 기판 피크 제거 (Elimination) ?



Si (113) 결정면



https://www.researchgate.net/post/Why_am_I_seeing_the_Si_311_peak_only_during_a_grazing_incidence_measurement (Mark D Losego)

샘플 표면 수직축인 ϕ 축을 약간 (10-30°) 돌려서 측정

THANK YOU FOR YOUR ATTENTION !

Korea I.T.S. Co., Ltd.
Application Group

김창수 박사/고문

010-5545-5323
changsoo.kim@koreaits.com