

1. 제목: 4차 B – Si (002) 피크와 Si (113) 피크 관련 의문들

2. 내용:

a. 의문 1: 왜 단결정 Si (001) 기판에서 Si (002) 회절 피크가 나타나는가???

- 정역학 (kinematical) 회절 이론을 적용하는 분말 회절법에서는
 - Diamond cubic 구조의 Si 분말은 회절 피크의 소멸 규칙 (Extinction Rule)에 의하여 $2\theta \cong 33^\circ$ 에서 Bragg 법칙을 만족하는 Si (002) 피크가 나타날 수 없음
 - 그러나 단결정 Si (001) 기판에서는 (002) 피크가 나타남???
- 단결정에서는 동역학 회절 (Dynamical diffraction)의 다중 회절 (multiple diffraction) 현상에 의하여 Si 분말에서의 forbidden 회절, 즉 Si (002) 회절 피크가 나타나게 됨
- 같은 원리로 Si 단결정의 (004) 회절 피크도 분말에서와는 달리 상당히 강한 회절 강도가 나오게 됨

b. 의문 2: 단결정 Si (001) 기판을 GI-XRD로 측정할 때 입사각에 따라 $\sim 51^\circ < 2\theta < \sim 60^\circ$ 에서 피크가 shift되며 나타난다. 이 피크의 정체는??? 또한 왜 shift가 나타나는가???

- Si (113), 또는 Si (311) 피크로 정확한 Bragg 각도는 $\sim 56.2^\circ$
- 사용하는 X-선의 분해능이 충분하지 않으므로 나타나는 샘플의 분해능 띠 (streak)에 의한 회절현상임
- GI-XRD 측정시 X-선 진행 방향에 대하여 시료의 [110] 방향이 $10^\circ \sim 30^\circ$ 를 이루도록 ϕ 를 돌려서 측정하면 피크가 나타나지 않음

3. 교육 배경 및 특징

- Si (001) 기판 위에 증착한 박막의 GI-XRD 측정시 기판에 의하여 종종 나타남
- 박막에서 나오는 피크와 혼란을 막기 위해 ϕ 를 회전하여 해당 피크가 나타나지 않게 함