

분자동역학을 이용한 Co-Al 시스템의 낮은 에너지 증착 거동 전산모사

Low-energy Deposition Behavior in Co-Al System using Classical MD Simulation

김상필, 이승철*, 이광렬*, 정용재

한양대학교 세라믹공학과

*한국과학기술연구원 미래기술연구본부

소자의 크기가 나노 혹은 원자단위로 작아지면서 기존에 큰 문제로 생각되지 않던 원자 수준의 계면에서 발생하는 현상들이 매우 중요한 문제점으로 부각되고 있다. 특히 전자의 스핀을 제어하는 소자의 경우 박막은 수십 Å 두께로 구성되어 있으며 각 층의 균일성(uniformity) 규칙도(orderness) 또는 적층 순서(stacking sequence)와 같은 박막 형상이 특성에 큰 영향을 미치는 것으로 알려지고 있다. 그러나 수십 Å 두께 박막의 특성을 이해하고 해석하는 것은 실험적인 측면에서는 매우 어려운 일이며, 분자동역학과 같은 원자규모의 전산모사 방법은 이러한 실험적 한계를 극복할 수 있는 기법으로서 매우 훌륭한 방법이며 그 중요성이 강조되고 있다.

본 연구에서는 금속재료에 대해 비교적 정확한 결과를 얻을 수 있다고 알려진 EAM(Embedded Atom Method) 포텐셜을 사용하여 Al 기판 위에 Co의 증착거동과 박막형성 거동을 분자동역학법을 통하여 모사하였다. 전산 모사를 위해 사용된 포텐셜 함수는 Co-Al계의 열역학적 안정상, Co와 Al의 물리화학적 특성을 잘 기술할 수 있음을 확인하였다. 300 K에서 Al(001)에 0.01 eV, 0.1 eV, 1 eV의 매우 낮은 증착 에너지를 갖는 중성 Co 원자를 증착시키면서 계면의 구조변화를 모사하였으며, 계산 결과, 모든 경우 계면에서 증착된 Co 원자와 Al 기판이 수 원자 층에 걸쳐 혼합층을 형성하였으며, 이 혼합층은 Co-Al계에서 열역학적으로 안정된 B2구조임을 확인되었다.

PLD를 이용한 Co-doped TiO₂ 박막의 특성 연구Characteristics of Co-doped TiO₂ Thin Film by Pulsed Laser Deposition

이재열, 최덕균*, 오영제

한국과학기술연구원 박막기술연구센터

*한양대학교 세라믹공학과

Ferromagnetic semiconductor란 호스트 역할을 하는 반도체 물질 내에 자기적 성질을 갖는 불순물이 첨가된 물질로서, GMR이나 Spin-FET 등의 Spintronics 분야에서 주요 재료로 대두되고 있다. 특히 TiO₂는 높은 굴절율과 고유전율, 광촉매 등과 같은 독특한 물리적, 화학적 특성으로 인하여 다양하게 연구되어지고 있다.

TiO₂는 구조적으로 rutile, anatase, brookite 의 세 종류로 나누어지는데, 본 연구에서는 열역학적으로 불안정한 anatase 구조에 초점을 맞추어 진행되었다. TiO₂ 내에 Co를 3~7 w% 첨가해 Ti_{1-x}Co_xO₂를 구성한 후 이를 소결하여 target을 제조하였다. 조성, 온도, 산소량, 압력 등의 공정변수를 제어하여 PLD (Pulsed Laser Deposition) 법으로 증착하였으며, Si(100) 기판 위에 epitaxial 박막을 성장시킨 후 XRD와 FE-SEM을 이용하여 결정상과 미세조직을 관찰하였고, surface morphology를 관찰하기 위하여 AFM을, 그리고 VSM을 통하여 자기 이력곡선 (M-H 커브) 등 Co-doped TiO₂ 박막의 구조적, 자기적, 전기적 특성을 고찰하였다.