

【S-15】

Al(001) 표면상 Co adatom 의 확산 및 침투 현상 전산모사

김치호, 김윤석, 김한철*, 정용재
한양대학교 세라믹공학과, *한국표준연구원

지난 수년간 박막 접합의 계면에서 발생하는 원자의 거동과 그로 인해 결정되는 계면 구조에 관한 연구가 활발히 진행되어 왔다. 과학, 기술적으로 이와 같이 크게 관심이 집중되고 있는 이유는 박막 접합이 소자로서 적용되었을 때 얻어낼 수 있는 전자기적 물성이 계면의 구조적 특성에 크게 영향을 받기 때문이다. MRAM (magnetic random access memory) 혹은 자기 헤드 등과 같은 스핀트로닉 소자에 응용되는 Co/Al₂O₃/Co 박막 접합의 경우 터널링 자기-저항 (TMR) 이 발생되며, 이러한 자기적 특성 역시 자성체 층과 절연체 층의 접합인 MTJ (magnetic tunneling junction) 의 계면 형상, 즉 계면내 원자 거동에 의해 결정되는 접합의 구조적 문제와 직접적인 관련이 있다.

우리는 TMR 응용 스핀트로닉 소자에 적용되는 MTJ 의 계면 특성 및 계면 내 원자 거동을 분석하기 위하여 자성체 층을 구성하는 원자 중 하나인 Co 와 절연체인 Al-oxide 층을 모델로 하여 그와 직접적인 관계가 있는 Al (001) 기판상 Co 증착에 대한 연구를 *ab initio* DFT (density functional theory) 를 이용하여 수행하였다. Al (001) 기판 표면상의 on top 과 bridge, 그리고 hollow 위치에 각기 Co 를 증착 시킨 결과 에너지적으로 가장 불안정한 곳은 on top 위치가 아닌 bridge 위치였다. 이는 on top 증착시에 일어나는 기판 Al 원자들의 큰 위치 이동 때문으로 분석되었다. Co 원자들이 치환 (substitutional) 위치로 침투되었을 때의 증착 에너지를 계산한 결과, 표면상의 가장 안정적인 증착 위치였던 hollow 위치에서 보다 안정적이었다. 이로부터 표면에 증착된 Co 는 치환 위치로 침투하려는 성향이 강함을 알 수 있었다. Co 와 Al 간에 형성되는 결합 또한 다른 증착 방식에 비하여 수가 많고 그 힘이 강한 것으로 분석되었다.