

## Molecular dynamics investigation to identify Al atomic behavior on various Cu surfaces

김상필<sup>1,2</sup>, 김영근<sup>3</sup>, M. Sahashi<sup>4</sup>, 이광렬<sup>1</sup>, 정용재<sup>2</sup>

<sup>1</sup>한국과학기술연구원, <sup>2</sup>한양대학교 신소재공학부, <sup>3</sup>고려대학교 신소재공학부, <sup>4</sup>Tohoku University

소자의 크기가 나노 스케일로 작아지면서, 표면 및 계면에서의 결합구조, 혼합과 결합 등이 소자의 성능과 특성을 결정짓는 중요한 요소로 알려지고 있다. 이러한 특성은 특히, 수 나노미터의 초박막 형성을 필요로 하는 GMR 혹은 TMR로 대표되는 자성 소자의 경우, 원자단위 혼합과 결합 등이 소자의 성능에 매우 민감하게 작용되기 때문에, 자성층과 비자성층 사이의 계면 구조 및 각 층의 결정구조에 대한 원자 규모의 제어와 이해가 매우 중요하다. 최근에 새로운 자성소자의 구조로서 제안되고 있는 current-perpendicular-to-plane giant magnetoresistance (CPP-GMR) 현상은 Cu와 Al을 이용하여 nano-metallic channel을 자성층 사이에 형성시키는 것이다. 특히 Cu 표면에 Al 원자의 증착 구조는 이후 산화 공정에 큰 영향을 미치기 때문에, 증착 Al원자의 제어와 거동에 대한 이해는 소자 개발의 단계에서 매우 중요하다.

본 연구에서는 Cu 기판에서 Al 원자의 표면에서 확산 거동에 대한 원자 수준의 이해를 위해 분자동역학 방법을 이용하여 Cu (100), (110), (111)의 매끄러운 표면과 plateau를 포함한 표면에서 Al 원자의 거동을 모사하였다. 계산결과, (100)면의 경우, 표면의 Al원자들이 주변의 원자들과 제한된 범위에서 뭉침을 확인할 수 있었으며, plateau가 존재할 경우, step edge로 Al 원자들이 쉽게 이동하였으며, plateau위의 Al원자들은 서로 뭉치며 좀처럼 아래 step으로 내려오지 못했다. 이러한 현상은 (111)면에서 더욱 분명히 나타났으며, 특히 (111)의 경우는 Al의 확산이 가장 자유로움을 확인할 수 있었다. 반면, (110)면의 경우, 위의 두 면과는 매우 대조적으로 Cu 표면에서 Al 원자의 이동이 거의 발생되지 못하였으며, plateau 역시 Al원자를 응집시키는데 역할을 하지 못하였다. 반면 증착 Al 원자들은 표면의 Cu원자들과 증착과 동시에 exchange 혼합 거동이 매우 활발히 발생되었다. 아울러 이상의 현상을 이해하기 위한 다양한 경로에 대한 energy barrier를 계산하였다.