

## Anisotropic redeposition displacement of the substrate atoms during high energy Ar bombardment on Au and Pd substrate

김상필<sup>1,2</sup>, 김세진<sup>1,3</sup>, 조민웅<sup>4</sup>, 김재성<sup>5</sup>, 김도연<sup>3</sup>, 정용재<sup>2</sup>, 이광렬<sup>1</sup>

<sup>1</sup>한국과학기술연구원 계산과학센터, <sup>2</sup>한양대학교 신소재공학부, <sup>3</sup>서울대학교 신소재공학부, <sup>4</sup>서울대학교 물리학과, <sup>5</sup>숙명여자대학교 물리학과

이온 스퍼터를 이용한 타깃 표면에 연속적인 입사는 표면 원자들의 식각과 재배열 등을 통해 다양한 패턴을 형성하는 것으로 알려져 있다. 이러한 패턴은 입사에너지, 입사각도, 표면 방위 등이 주요한 변수가 되며 시간에 따라 동적으로 진화하는 양상을 보여주고 있다. 이 기술은 광학 및 전자기 소자뿐만 아니라, 나노 크기의 molding template 제작 등 다양한 분야로의 응용이 가능하여 많은 주목을 받고 있다. 하지만, 공정이 비교적 단순한 반면 아직까지 현상을 제어하고 이해하는데, 많은 어려움이 있다. 현상을 이해하기 위한 대다수의 이론들은 Sigmund와 Bradley-Harper의 이론에 바탕을 둔, continuum model을 이용하여 해석하는 방식으로 연구되고 있다. 하지만, 아직까지 모든 경우에 ‘universal’ 하게 적용되는 이론은 아직 정립되지 않고, 특정 경우에만 적용되는 ‘case-by-case’ 형식의 모델이 대부분이다.

본 연구는 다양한 계산 기법들 가운데, 원자 수준의 detail한 거동을 효과적으로 볼 수 있는 분자동역학 방법을 이용하여 Ar이온의 Au와 Pd표면에서 충돌 거동을 연구하였다. 분자동역학 결과의 통계적 처리를 통해, 종래 스퍼터링 현상이 단지 식각의 개념이었던 negative deposition만으로 표면 패턴을 해석하는데 한계가 있음을 발견하고, 실제 표면의 패턴을 결정짓는 주요한 요인으로 기판 원자가 표면위로 돌출되어 재배열되는 redeposition 현상이 표면의 instability를 가속하며, Ar 입사에너지, 각도 등에 따른 redeposition의 분포가 최종 패턴의 모양을 예측하는데 중요한 역할을 하는 것으로 확인되었다.