

Sputter-induced compositional modulations by atomic rearrangement in a Co-Cu binary system

김병현^{1,2}, 김상필¹, 이광렬¹, 정용재²

¹한국과학기술연구원계산과학센터

²한양대학교신소재공학부

이온 빔을 이용한 타겟 표면의 패턴 형성은 공정이 비교적 단순함에 비해 매우 다양한 응용 가능성이 제기되면서 활발히 연구가 되고 있다. 특히, 이 공정은 나노 크기의 dot 혹은 ripple 구조를 전 영역에 걸쳐 고르게 분포시키는 수단으로 주목받고 있다. 최근, V. B. Shenoy 등은 이원계 시스템에서 두 물질간의 스퍼터링 수율과 표면 확산도의 차이가 자발적인 상 분해를 발생시킬 수 있다는 가능성을 이론적으로 제시하였다 [1]. 이온충돌에 의한 표면원자의 sputtering과 이에 의한 표면 불안정성을 표면 확산 등에 의해 완화시키려는 relaxation 과정으로 이 현상을 설명하는 기존의 나노 구조 형성 모델로부터, 그들은 합금 계에서 ripple이 형성될 경우 top과 valley에 서로 다른 물질들이 축적될 것을 예측하였다. 그러나, 이런 모델은 이온충돌에 의한 표면 원자의 재배치를 원자수준에서 정확히 기술하지 않았다는 한계를 가지고 있다.

본 연구에서는, 원자수준의 거동을 가장 빠르고 비교적 정확히 모사할 수 있는 분자동역학을 이용하여 가상의 $\text{Co}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}$ 합금 시스템에서 Ar 원자의 충돌로 인한 표면 원자들의 재배열 및 조성 변화의 메커니즘을 정량적으로 연구하였다. Shenoy 등의 이론적 예측과는 달리, Ar 원자 충돌이 일어남에 따라 면상에서의 조성 변화가 거의 관측되지 않은 반면, 표면 top layer와 second layer 사이에 Cu 조성의 차이가 심해지는 현상이 일어나는 것이 관찰되었다. 이 현상은 $\text{Co}_{0.5}\text{Cu}_{0.5}$ 합금에서의 Ar 원자의 충돌에 따른 Cu와 Co의 원자 재배열 수율의 차이로 이해할 수 있었으며, 재배열 현상이 스퍼터링을 이용한 표면 원자들의 조성 변화에 매우 중요한 요인임을 입증하기 위한 이론적 분석을 수행하였다.

[1] V. B. Shenoy, W. L. Chan and E. Chason, Phys. Rev. Lett. 98, 256101 (2007).