

## Ar irradiation induced atomic rearrangement effect on Pd(001) surface: Molecular dynamics study

김상필, 이광렬

한국과학기술연구원 계산과학센터

소자의 크기가 나노 규모로 작아지면서, 구조 및 형상을 제어하기 위한 다각적인 노력이 제기되고 있다. 그 중 이온빔 스퍼터링을 이용한 표면에 패턴을 형성하는 방법은 지금까지 증착 혹은 표면 처리를 목적으로 사용했던 개념에서 직접적으로 표면의 규칙적인 구조를 매우 단순화된 공정으로 제어할 수 있다는 점에서 많은 주목을 받고 있다. 이와 관련하여, 패턴의 형성 기원에 대한 이론적인 해석은 종래의 연속체 모델을 바탕으로 표면 곡률에 따른 식각의 비대칭성을 이용한 Sigmund's 이론을 기초로 발전되고 있다. 하지만, 분자동역학을 이용한 스퍼터링 거동 해석이 가능해지면서, 이온의 충돌은 표면의 식각 뿐 만 아니라, 일부 원자들이 표면위로 재배열(rearrangement) 되는 현상이 표면 패턴에 큰 영향을 미칠 것이라는 주장이 제기되었다 [1]. 본 연구는 분자동역학 방법을 이용하여 Ar 원자의 Pd 표면에서 충돌 거동을 연구하였다. EAM과 ZBL 포텐셜의 조합으로 원자간 충돌거동을 기술하였으며, 입사에너지와 입사각도에 따른 스퍼터링과 재배열 거동을 정량적으로 조사하였다. 특히, 500 eV의 에너지로 Pd(001) 면에 수직으로 입사한 경우, 재배열 원자들이 충돌 지점을 중심으로 비등방적인 분포를 보이는 것으로 확인되었다. 이상의 결과를 기초로 재배열 분포가 실제 패턴으로 발전하는 과정을 기술하기 위한 방법을 소개하고, 지금까지 결과를 간략히 논의하고자 한다.

[1] N. Kalyanasundaram, *et al.*, Appl. Phys. Lett. 92, 131909 (2008).

## Molecular dynamics simulation of deposition and thermal behaviors of Al atoms on Cu surface

김상필, 이광렬

한국과학기술연구원, 계산과학센터

재료의 자기적 성질을 이용하는 경우, 박막의 품질이나 적층 순서 등이 소자의 성능을 크게 좌우한다고 알려져 있다. 그 중 거대자기저항(Giant Magnetoresistance, GMR)을 이용한 소자에서 전류의 흐름을 국소적으로 제어함으로써 MR값의 획기적인 증가를 보이는 CCP(Current Confined Path) 방법이 제안되었다. 이 방법은 산화물 사이에 전도 경로를 형성함으로써 활용될 수 있는데, 실제 소자 특성은 산화막을 형성되기 전에 원자들 간의 분포나 혼합 거동등에 크게 좌우된다고 알려져 있다 [1]. 하지만, 대부분의 공정이 수 원자층에서 일어나는 현상이라 실험적으로 이해하거나 제어하기가 매우 어렵다. 최근 대규모 분자동역학 계산이 가능해지면서, 종래의 한계로 여겨졌던, 표면에서 독립적인 islands의 형성, grain과 grain boundary의 형성 등을 원자 규모에서 관찰이 가능해졌다. 본 연구는 CCP-GMR 제작 과정의 초기 단계로 Cu박막의 Ta 표면에서의 형성과정과 이어서 증착되는 Al원자의 증착 거동을 원자 수준에서 구체적으로 살펴보았다. 아울러, 700 K의 annealing 과정에서 표면 형상이나 두 원자간 조성의 변화를 조사하였으며, 이 경우, Al과 Cu간 혼합 거동의 메커니즘을 살펴보았다.

[1] J.Y. Soh *et al.*, IEEE Trans. Mag. 42, 2633 (2006).