

## Compositional modulation by sputter-induced atomic rearrangement in Co-Cu binary system

김병현<sup>1,2</sup>, 김상필<sup>1</sup>, 이광렬<sup>1</sup>, 정용재<sup>2</sup>

<sup>1</sup>한국과학기술연구원 계산과학센터, <sup>2</sup>한양대학교 신소재공학부

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 dot나 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 조성 변화를 정량적으로 조사하였다. Ar 원자 충돌이 일어남에 따라 표면 top layer와 second layer 사이에 Cu 조성의 차이가 심해지는 현상이 일어나지만, 면상에서의 조성변화는 거의 관찰되지 않았다. 이는 Shenoy 등의 이론적 예측과는 상반된 결과이다. 이 현상은 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).

## Solid state phase transition of Ni nanoclusters investigated by molecular dynamics simulation

Minwoong Joe<sup>1,2</sup>, Sang-Pil Kim<sup>1</sup>, and Kwang-Ryeol Lee<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Computational Science Center, Future Fusion Research Laboratory, Korea Institute of Science and Technology, Seoul 136-791, Republic of Korea

<sup>2</sup>Department of Physics and Astronomy, Seoul National University, Seoul 151-747, Korea

Solid state phase transition of Ni nanocluster of about 1 nm in diameter from cuboctahedron to icosahedron at  $T = 1100$  K was investigated by means of molecular dynamics (MD) simulation. From the view point of energetics, initial cuboctahedron structure has duality in stability: face-centered-cubic structure of its bulk is more stable than that of the icosahedron bulk. However, surface structure of the cuboctahedron is unstable with respect to that of the icosahedron surface composed of only {111} planes which are the mostly packed surface. This energetic duality causes a competition between the surface and the bulk phase. During MD annealing at  $T = 1100$  K where the transition from cuboctahedron to icosahedron occurs without melting of the cluster, the radial distribution function reveals that the interior atoms first lose their crystal structure, and transform to icosahedron structure while the surface still remains as the cuboctahedron surface structure resulting in an increase of the total energy of the system. Transition of the surface structure to icosahedron then follows to decrease the total energy of the system. The solid state transition that proceeds from the cores toward the surface is thus contrary to the previous findings during freezing molten nanoclusters [1]. Atomic scale transition were analysed in detail for the better understanding of the solid state transition in Ni nanoclusters.

[1] H.-S. Nam et al, Phys. Rev. Lett., 89, 275502 (2002).