

자유 공간과 GaAs(110) 표면에서의 알루미늄 성장의 초기 상태

이재열

한국전자통신연구소 기초기술연구부, 대전 305-606

알루미늄 cluster의 성장과 GaAs(110) 표면에서의 알루미늄 박막 형성을 일차 원리 계산에 의한 시뮬레이션을 통해 조사한다.

20개 이하의 작은 Al cluster들은 에너지 준위들 사이의 간격이 잘 분리되어 있어 잘 정의된 구조를 갖고 있다. 이 크기에서의 cluster 구조는 Al이 금속결합을 하기보다는 공유 결합을 하기 때문에 cluster를 구성하는 원자의 개수에 크게 의존한다. 보다 많은 원자들로 구성된 cluster의 경우에는 두개의 구조 즉 cuboctahedron과 icosahedron (그림 1. 참조)이 다른 구조들 보다 안정한 것으로 알려져 있다. 작은 크기의 금속 cluster들은 icosahedron 구조를 선호하나, cluster의 크기가 증가하여 bulk에 접근함에 따라 bulk의 구조와 같은 cuboctahedron 구조를 갖게 된다. Al cluster의 경우 다른 금속들 보다 높은 twinning 에너지를 갖기 때문에 icosahedron으로부터 cuboctahedron의 전이가 일찍 일어날 것으로 예상된다. 13, 19, 55 개의 Al 원자들로 구성된 cluster들을 중심으로 구조와 에너지를 계산함으로써 구조 전이와 구조의 특성에 대해 조사한다.

일차 원리 계산에 의하면, 두 구조들 사이의 에너지 차이가 매우 적어서 55 - 147 개 정도의 원자들로 구성된 크기의 cluster에서 전이가 일어난다. 가장 안정된 구조는 대칭성을 유지하고 있는 이상적인 형태이기 보다는 찌그러진 형태를 이루고 있다. 이 구조에 대해 실험으로 알려진 이온화 에너지와 전자 친화도를 계산하여 실험치와 비교한다. 55개의 원자로 구성된 cluster의 경우에는, 여러개의 서로 다른 형태이나 비슷한 에너지를 갖는 구조들이 simulated annealing으로 부터 얻어졌다. 이 크기의 cluster에서는 에너지 준위의 밀도가 높아 구조가 매우 "floppy"하고 녹는 점이 낮다.

반도체 표면에서의 금속 박막의 성장은 기판과 금속 원자와의 상호작용으로 인해 자유 공간에서의 성장과는 다르다. 진공증착 방법에 의해 금속 원자를 반도체 표면에 증착시키면 금속 원자들 사이의 상호작용이 기판과의 상호작용 보다 강하고 표면에서 쉽게 diffusion 하기 때문에 cluster를 형성한다. 그러나 아주 적은 양의 금속 원자가 증착된 경우 즉 초기의 성장 상태에 대해서는 명확히 알려져 있지 않다. 금속 원자를 atom deposition 방법에 의해 반도체 표면에 증착시키면 Fermi level의 pinning이 일어나지만 cluster deposition 방법을 이용하는 경우에는 이러한 현상이 사라지는 것으로 알려져 있다.⁽¹⁾

GaAs(110) 표면에서의 Al 박막 성장에 대해서 일차 원리 계산에 의한 시뮬레이션을 수행하였다. 1/8 - 1 monolayer Al 증착을 고려하였다. 흡착된 Al 원자는 하나의 표면 Ga 원자와 두개의 표면 As 원자들로 구성되는 삼각형의 중앙에 위치할 때 가장 안정하다. Adiabatic trajectory 계산 방법으로 구한, 표면에서의 Al 원자의 diffusion barrier는 약 0.75

eV이다. 그러므로 상온에서 Al 원자는 쉽게 표면 이동할 수 있다. 두개의 원자들이 흡착된 경우에는 쌍을 이루는 구조가 각각 흡착된 경우 보다 안정하다. 이 쌍에서 Al 원자들 사이의 거리는 Al dimer에서 보다 훨씬 멀어서 기판을 통하여 서로 상호작용을 한다. 또한 cluster를 형성하는 것이 epitaxial growth 보다 에너지 관점에서 선호하는 것으로 나타났다. GaAs(110) 표면에 8개의 원자로 구성된 cluster의 증착을 시뮬레이션하였다. 이 시뮬레이션 결과를 토대로 cluster deposition에서 Fermi level pinning의 부재에 대해 논의한다.

(1). G. D. Waddill, I. M. Vitomirov, C. M. Aldao, and J. H. Weaver, Phys. Rev. Lett. 62, 1568 (1989).

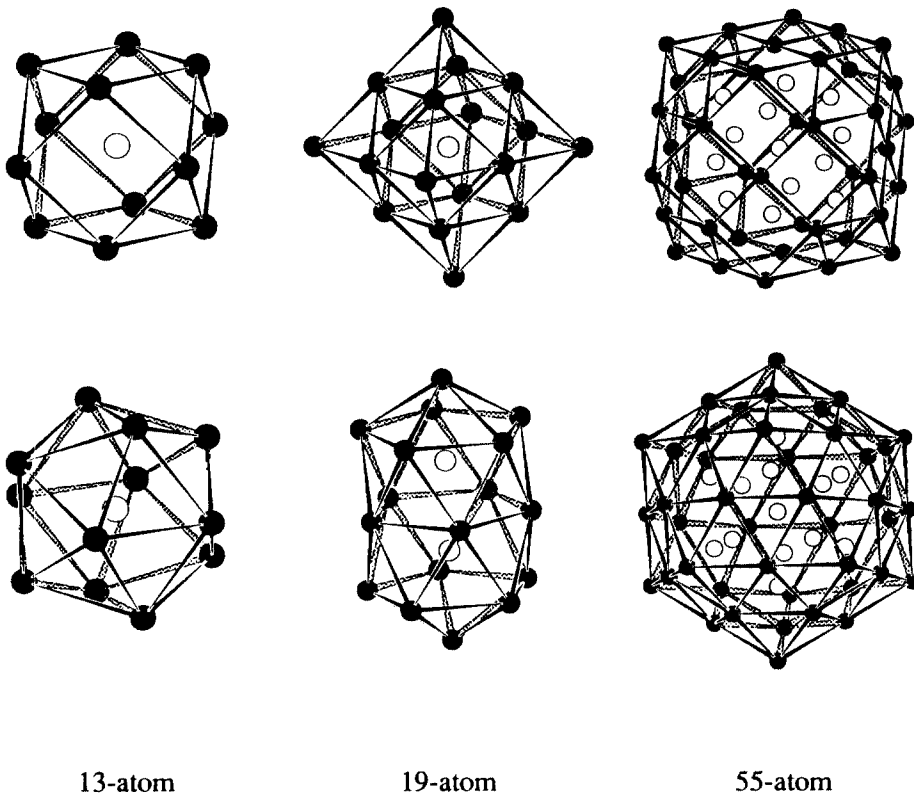


그림 1. Cuboctahedron (상단)과 icosahedron(하단) 구조