

Cluster Beam 과 고체 표면과의 상호 작용에 관한 Molecular Dynamic Simulation

이민화, 강희재, 황정남*

충북대학교 물리학과
연세대학교 물리학과*

최근에 반도체 기술이 급격하게 발달함에 따라 박막제조 기술의 필요성이 매우 중요하게 대두되었다. 반도체 소자들의 소형화 및 고집적화는 필연적으로 박막 기술의 연구 활성화를 가져왔고 이에 따라 여러가지 박막 제조법이 등장하게 되었다. 에너지를 가진 입자나 클러스터와 고체 표면과의 상호 작용은 이온빔 공정에서 기본이 되고 있다. 특히 약 1 keV 이하의 저에너지를 갖는 이온으로 고체표면을 충격하는 방법은 에칭(etching), 깊이분포도 측정, 박막제작등에서 널리 이용되어 왔다. 이러한 공정들과 관련된 많은 문제들(예를 들어 이온 주입된 이온들의 깊이분포, 반사계수, 스퍼터링 이득, 스퍼터된 원자나 클러스터의 에너지 및 각도분포)에 대한 지식은 저에너지 입자와 고체표면과의 상호작용을 보다 깊이 이해하는데 필요하다. 따라서 이러한 문제들에 관하여 이론적으로나 실험적으로 많은 연구가 되어 왔다. 그러므로 본 연구에서는 cluster beam에 의한 고체 표면에서의 박막 성장 과정을 밝히기 위하여 cluster beam과 고체 표면과의 상호 작용을 molecular dynamic 법에 의하여 연구하였다.

본 연구에서는 에너지를 가진 Au 클러스터를 Au(100)기판 위에 충돌시켰을 때의 결정 성장 과정을 밝히기 위하여 분자 동역학 계산을 하였다. 여기서 Au 클러스터를 선택한 이유는 Yamada 등의 ICB(D Ionized Cluster Beam Deposition) 실험 결과와의 직접적인 비교가 가능할 뿐만 아니라 분자 동역학 계산에서 사용하는 EAM(embedded atom method) potential 이 특히 Au와 같은 FCC 구조의 물질에 잘 맞기 때문이다. 클러스터들의 에너지는 원자당 0.5 eV 에서 2.0 eV 까지 변화시켰다. 한편 시료의 온도 변화에 따른 효과를 알아보기 위하여 시료 온도를 300K 에서 600 K로 변화시켜가며 분자 동역학 계산을 하였다. 따라서 본 연구에서는 EAM(embedded atom method) potential을 이용하여 Au(100) 기판위에 Au 96개의 클러스터를 0.5~2.0 eV의 에너지를 입사했을 때 이온 빔과 고체 표면과의 상호 작용을 시간 변화에 따른 동적인 움직임을 온도 300K 와 600K 사이에서 알아보기 위해 분자 동역학 계산을 하였다

기판 Au는 $12 a_0 \times 5 a_0 \times 12 a_0$ 를 사용하였다. 여기서 a_0 는 격자 상수이다. 더우기, 표면이 relaxation된 후의 마지막 상태에 관심이 있었기때문에 본 계산에서 크리스탈은 Langevin 공식을 통하여 외부의 heat bath로 연결된 것으로 하였다. 표면을 제외한 크리스탈의 모든 측면의 원자들이 이웃하는 원자들의 상호 작용하는 힘과 마찰력, random force등을 받는다. 마찰력은 둘러 쌓여 있는 반 무한대 매질에 미소한 열이 전달되는 것으로 사용하였고, random force는 크리스탈을 주어진 온도로 일정하게 유지하는것으로 사용하였다. 그래서, 충돌하는 원자로부터 발생하는 열이 에너지의 흐름은 전혀 없이 크리스탈 외부로 흐르게

되고(마찰력), 에너지는 random force에 의해 크리스탈에 전달된다. 이와같은 방법으로 주어진 기판의 온도에서 클러스터의 충돌을 연구할 수 있다.

본 연구의 계산 결과로 첫번째로는, 0.5 eV/atom의 에너지를 가지는 이온화된 클러스터 Au 95개를 Au(100) 기판위에 입사시켰을때가 다른 에너지를 주었을때보다 원자 크기의 nucleation 이 발생하고, defect 가 거의 없는 homoepitaxial 박막을 제작할 수 있고, 실험 과 아주 잘 일치함을 알 수가 있었고 둘째로는, 에너지를 전혀 주지 않은 상태에서 이온화된 클러스터 Au 95개를 Au(100)기판위에 입사시켰을때는 클러스터의 결정 구조가 거의 깨지지 않은 상태에서 한 덩어리의 섬을 이루며 표면에 결정이 자람을 알 수가 있었고 셋째로는, 0.5 eV/atom의 에너지를 가지는 이온화된 클러스터 Au 95개를 Au(100) 기판위에 입사시켰을때는 기판 온도가 300 K 와 600 K 사이에서는 전혀 영향을 받고 있지 않음을 알 수가 있었다. 마지막으로 본 연구는 이온 클러스터 빔 증착 (Ionized Cluster Beam Deposition)의 메커니즘을 이해하는데 가장 좋은 방법이라는 것을 알 수가 있었다.