

## Cluster Beam과 고체표면과의 상호작용에 관한 Molecular Dynamics Simulation

김종호, 강희재

충북대학교 물리학과

Ionized Cluster Beam Deposition(ICBD)방법은 최근에 반도체, 금속, 유전체, 자성체, 유기물질등의 박막성장에 응용되고 있다. 특히, ICBD는 열증착, CVD, MBE, Ion Plating등 여러 다른 증착법과는 달리 증착하는 동안 Cluster beam의 에너지를 변화 시킴으로써, 낮은 온도에서도 양질의 박막을 성장 시킬수 있는 장점을 갖고 있다. 그러나 아직 ICBD에 의한 박막성장 메카니즘에 대한 이해가 부족하며, 이에 대한 기초 연구가 매우 필요한 실정이다. 그러므로 본연구의 목적은 Molecular Dynamic(MD) 계산을 통하여 ICBD의 성장 메카니즘을 밝혀 내는데 있다. MD계산에서 3차원 통계학 계산으로는 4차 Gear's Predictor-corrector 알고리즘을 사용하였다. Au cluster beam 과 Au(100)면과의 상호작용에는 Embedded Atom Method(EAM) potential을, Si cluster beam과 Si(100)면과의 상호작용에는 Tersoff potential을 사용하였다.

본 연구에서는 ICBD의 초적의 성장 조건을 찾기 위하여 Cluster의 에너지 및 입사각도를 변화 시켜 가면서 상호 작용을 관찰하여 보았다. Au cluster의 경우 수직 입사 조건에서 단위원자당 입사에너지가 2eV이하에서는 입사 Cluster가 핵자를 형성하며 성장함을 보았으나 Cluster빔 원자의 일부가 기판내부에 침투하여 고체 표면에 결함을 형성된 반면, 0.5eV이하에서는 결함없이 성장함을 알수 있었다. Si의 경우에도 입사에너지 및 입사각을 변화시켜 가면서 상호작용을 관찰하였다.