

[M-02]

분자동역학을 이용한 Co, Al/Co(111) 나노자성박막 성장거동 전산모사

김상필*,**, 이승철**, 이광렬**, 정용재*

*한양대학교 세라믹공학과, **한국과학기술연구원 미래기술연구본부

박막에서 결정이 성장하는 메커니즘을 이해하는 것은 소자의 크기가 작아짐에 따라 더욱 중요해졌다. 특히 MRAM(Magnetic Random Access Memory)과 같은 스핀전자소자의 다층박막은 수십 Å 두께로 구성되어 있으며, 박막의 균일성(uniformity) 규칙도(orderness)는 소자의 효율과 직결되는 매우 민감한 요소이다. 지금까지 나노 스케일의 박막과 관련되어 증착 초기에 기판에서 성장하는 메커니즘을 규명하기 위한 많은 연구가 있었다. 그러나 수 나노미터 두께 박막의 특성을 이해하고 해석하는 것은 실험적인 측면에서는 매우 어려운 일이며, 분자동역학과 같은 원자규모의 전산모사 방법은 이러한 실험적 한계를 극복할 수 있는 기법으로서 중요성이 강조되고 있다.

본 연구는 MRAM의 자기 터널링 접합(TMR) 공정 가운데 하나인 Co(111) 기판 위에 Al과 Co의 증착거동과 박막성장을 분자동역학법을 통해 정량적인 분석을 하였다. 원자간 포텐셜은 금속재료에 대해 비교적 정확한 결과를 얻을 수 있다고 알려진 EAM(Embedded Atom Method) 포텐셜을 사용하였다. Al/Co(111)의 경우, 증착된 Al원자는 기본적으로 Co(111) 기판 위에서 layer-by-layer 성장을 하는 것으로 나타났으며, 이러한 현상은 증착 에너지보다 기판의 온도가 증가함에 따라 더욱 분명히 나타났다. 하지만, Co/Co(111)의 경우 낮은 증착에너지 (0.1 eV)에서는 매우 심한 island 성장을 보였으며, 이러한 현상은 기판의 온도가 증가하더라도 큰 변화가 없는 반면, 에너지의 증가에 매우 민감하게 반응하여 증착 에너지가 5 eV일 경우 layer-by-layer 성장거동을 나타내었다.