

Al₂O₃ 비정질 박막의 원자구조 및 전자구조

Atomic and Electronic Structure of Amorphous Al₂O₃

장현주, 최영민, 류병환, 이재도
한국화학연구원 화학소재연구부 나노물성연구팀

DC magnetron 스퍼터링 방법으로 제조된 박막은 결정질과 비정질이 혼합되어 있을 가능성이 많기 때문에 물성 해석이 어렵다. 비정질 박막의 물성 해석을 위해 비정질 원자구조와 전자구조를 원자모델링과 양자모델링 방법으로 계산하여 측정 실험과 비교하였다. Al₂O₃ 비정질 박막의 원자구조를 분자동역학을 이용한 simulated annealing 방법으로 결정하고, 이를 EXAFS를 이용하여 측정된 원자구조와 비교하였다. 한편 분자동역학으로 구해진 비정질 구조와 단결정 구조에 클러스터 방법을 이용하여 전자구조를 계산하고 이를 XPS 실험 결과와 비교하여 박막의 결정질과 비정질 성질에 대해 분석하였다.

Sr_{0.7}Bi_{2.3}Ta₂O₉ 박막의 상형성속도에 미치는 양이온 치환의 영향

The Influence of Cation Substitution on the Phase Formation Kinetics in Sr_{0.7}Bi_{2.3}Ta₂O₉ Thin Films

곽우철, 이재욱*, 성윤모
대전대학교 신소재공학과
*성균관대 신소재공학과

Sr_{0.7}Bi_{2.3}Ta_{1.7}Ti_{0.3}O₉ (SBTT)와 Sr_{0.7}Bi_{2.3}Ta_{1.7}Zr_{0.3}O₉ (SBTZ) 강유전체박막이 Sr_{0.7}Bi_{2.3}Ta₂O₉ (SBT)에 대한 Ta⁵⁺ 이온의 부분 치환에 의해 제조되었으며 각 박막에 대하여 강유전상인 Aurivillius 상형성 Kinetics가 분석 및 비교되었다. 730-760°C 범위에서 10°C 간격으로 등은 열처리 된 각 박막에 대하여 Quantitative X-Ray Diffraction(Q-XRD) 분석이 행하여졌으며 상형성과 결정성장 특성이 박막 조성과 결정화처리 온도에 크게 좌우됨이 밝혀졌다. Q-XRD 결과에 대하여 Johnson-Mehl-Avrami(JMA) 등온반응속도론을 적용함에 의해 상형성에 필요한 활성화에너지 및 Avrami 지수값들이 정해졌다. SBT박막에 비하여 SBTT와 SBTZ 박막에서는 각각 ~51, 82 kJ/mol의 활성화에너지 감소가 관찰되었으며 이것은 SBTT와 SBTZ 박막의 상형성 Kinetics를 증가시키는 결정적인 요인으로 확인되었다. 활성화에너지 감소에 대한 메커니즘이 이온결함강도 차이를 이용하여 해석되었다. 박막들의 Avrami 지수는 모두 ~1로 정해져서 감소하는 핵생성속도에 확산메커니즘에 의한 1차원적인 결정성장이 예상되어 Tdm이며 이는 SEM(주사전자현미경)으로 확인되었다. SBT박막의 경우는 잔류하는 fluorite상이 그리고 SBTZ박막의 경우는 제 2상인 Pyrochlore 상의 출현이 XRD와 SEM으로 관찰되었다.