

## 큰 알루미늄 덩어리 증착(large aluminum cluster deposition)에 관한 분자동력학 시뮬레이션

김정원, 최기석, 문원하, 변기량, 최재훈, 김태원, 이강환, 강유석, 황호정  
중앙대학교 전자공학과 반도체연구실

Yamada 등<sup>(1)</sup>의 덩어리 증착에 관한 연구 이후 낮은 기판 온도에서 결정성이 뛰어난 금속박막성장(thin film growth)을 얻을 수 있는 방법으로 최근 덩어리 증착(cluster deposition) 방법에 관하여 많은 연구들이 진행되어 덩어리 충돌이 원자 충돌인 경우와 큰 차이를 보이는 결과를 얻었으며, 덩어리 증착시 기판 내부에 점결함(point defect)이 발생되지 않는다는 중요한 결과를 얻었다.<sup>(2,3)</sup> 금속 덩어리를 사용한 금속박막성장장은 높은 박막성장속도와 뛰어난 구조 재배열 효과를 얻을 수 있으며 기판의 격자손상을 감소시키기 때문에 향후 나노미터 소자 개발에 응용성이 클 것으로 예상된다. 그러나 금속 덩어리와 금속 표면 사이의 상호작용에서 발생하는 기본적인 역학(mechanism)은 분명하게 알려져 있지 않다. 지금까지 알루미늄 덩어리의 원자구조와 특성에 관한 연구는 수행되어졌지만<sup>(4,5)</sup>, 알루미늄 덩어리 증착에 관한 연구는 수행되지 않았다. 본 연구에서는 13~177개로 이루어진 큰 알루미늄 덩어리들의 증착에 관하여 MD(molecular dynamics) 방법을 사용하여 연구하였다.

MD 시뮬레이션을 사용하여 덩어리 증착시 기판 표면과의 충돌 초기에 나타나는 덩어리 내부 원자들의 상관충돌효과(correlated collisions effect)에 의하여 덩어리 크기에 따른 증착 현상과 여러 물리적 현상들을 관찰하였다. 덩어리 총 에너지가 증가할수록 기판의 최고 온도는 증가하며, 덩어리 크기가 클수록 상관충돌효과가 커지기 때문에 덩어리의 총 에너지에 따른 최고 증가 비율은 적어졌다. 시간에 따른 비정렬 원자수(disordered atom number) 비교를 통하여 덩어리가 클수록 구조 재배열이 더 잘 이루어진다는 것을 알 수 있었고, 원자당 에너지가 클수록 덩어리 원자들이 기판 내부로 더 깊이 들어갔고, 덩어리 크기가 클수록 상관충돌효과로 인하여 덩어리 원자들이 기판 내부로 더 깊이 들어가는 것을 알 수 있었고, 덩어리 크기가 클수록 상관충돌 효과는 커지고 더욱 부드러운 증착이 이루어졌으며, 무엇보다도 덩어리 증착시 표면에서 구조 재배열이 잘 이루어지는 특징을 살펴볼 수 있었다. 이러한 알루미늄 덩어리를 생성하여 증착할 수 있을 경우, 뛰어난 재배열 효과를 이용하여 품질이 향상된 반도체 소자를 제조할 수 있을 것으로 사료된다.

### [참고문헌]

1. I. Yamada, H. Taksoka, H. Usui, and T Takagi, J. Vac. Sci. Technol. A, Vol. 4, pp. 722, 1986.
2. H. Hsieh and R. S. Averback, Phys. Rev. B, Vol. 42, pp. 5365-5368, 1990. 9.
3. L. Rongwu and P. Zhengying, Phys. Rev. B, Vol. 53, pp. 4156-4161, 1996. 2.
4. L. D. Lloyd and R. L. Johnson, Chemical Physics Vol. 236, pp. 107-121, 1998.
5. H. Cox, R. L. Johnson, and J. N. Murrell, J. Solid State Chemistry Vol. 145, pp. 517-540, 1999..