

<2-5>

분자동역학법을 사용한 나노클러스터의 증착에 관한 연구

A Numerical Study on the Nanocluster Deposition of Au using Molecular Dynamics

의승철, 황농문*, 김도연

서울대학교 재료미세조직 창의연구단, *한국표준과학연구원

화학기상증착법(CVD)의 기구로서 제안된 Charged Cluster Model(CCM)에 의하면, 증착시 작은 크기의 전하를 띤 클러스터가 기상에서 생성되고 이들이 성장의 기본 단위 역할을 한다고 알려져 있다. CCM를 검증하기 위해 기상 핵생성에 대해서는 많은 연구가 진행되었으나 생성된 클러스터가 기판의 표면에 증착될 때 어떤 거동을 보일 것인지에 대해서는 아직 미흡한 편이다.

본 연구에서는 수치적 방법을 사용해 기상에서 생성된 고온의 클러스터가 기판에 증착될 때 증착 초기 어떤 거동을 보일 것인지에 대해 연구하였다. 본 연구에서는 1000 K에서 100개에서 2000개 원자로 이루어진 Au 클러스터가 800 K의 기판에 증착될 때 크기에 따른 증착거동의 변화를 해석하였다.

<2-S> **특별강연**

Preparation and Characterization of Core-shell/SiO₂ nanosize composites by a reverse micelle and sol-gel technique

Dong-Sik Bae, Kyong-Sup Han, James H Adair*

Division of Ceramics, KIST, Seoul 136-791, Korea

*Penn State University, Materials Research Laboratory, PA

Spherical nanometer-sized core-shell/SiO₂ particles have been synthesized within reverse micelles via metal alkoxide hydrolysis and condensation. The size of the particles and the thickness of the coating can be controlled by manipulating the relative rates of the hydrolysis and condensation reaction of organometallic precursors within the microemulsion. Composite particles in the size range of 17-50 nm are produced. As the molar ratio of water to surfactant is increased above, 10, the size distribution broadens. The effects of synthesis parameters, such as the molar ratio of water to surfactant, the molar ratio of water to TEOS and the amount of base catalyst, on the size and distribution of the composite nano size particles are discussed.