

[S-15]

흡착원자의 기울어진 입사에 따른 비대칭적 군집구조 형성에 대한 연구

서지근, 권수미*, 김재성*, 민항기**

초당대학 교양학과, *숙명여대 물리학과, ** 홍익대학 물리학과

최근 들어 물질을 원자 크기 수준에서 제어하려는 나노기술에 대한 관심에 힘입어 박막 성장에 대한 연구도 주목을 받고 있다. 일반적으로 박막 성장은 크게 흡착과 확산 과정으로 구분할 수 있고, 여기서 흡착 과정은 흡착 속도 이외에는 성장 구조에 영향을 미치지 않는 요소로 고려되었다. 그러나 최근의 Poelsema 등의 실험에서는 흡착 원자의 입사각도 성장구조에 영향을 줄 수 있음이 보이고 있다[1]. 이들은 Cu(100) 표면 위에 Cu를 성장시킨 실험에서 glancing한 흡착의 경우 수직인 각도와 다르게 island가 직사각형 모양으로 형성된다는 것을 보고하고 있고, 그 원인으로 island와 흡착원자 사이의 상호작용으로 흡착 원자의 궤적이 휘어져 island 앞쪽 끝 근방에 다량의 원자가 흡착되는 steering에 기인할 것이라 제시하였다. 최근 Zhang 등은 이러한 비대칭적 island가 형성되는 원인이 흡착 원자의 잔여 운동량에 의한 transient mobility라는 보고[2]. 확산속도 방정식으로부터 해석적인 해를 얻어 비대칭적인 island가 형성됨을 보였다. 그러나 확산속도 방정식은 도입된 많은 근사로 실제의 박막 성장 과정과는 차이를 주게되는 결점이 있고 따라서 kinetic Monte Carlo(KMC) 시뮬레이션과 같은 실질적인 모사 계산에 의한 확인이 필요하다. KMC 시뮬레이션은 빠른 계산 속도로 molecular dynamic(MD) 방법으로 거의 불가능한 큰 크기의 원자계에 대한 시뮬레이션까지도 가능하게 하며, 통계적 적절성으로 최근 박막 성장의 연구에 널리 사용되는 방법이다. 그러나 아직 규칙적인 격자 위에서 pseudomorphic 성장의 경우에만 적용되는 단점과 흡착 과정을 모사계산 할 수 없는 문제점이 있다. 본 연구에서는 이러한 단점을 보완하여 MD 방법을 KMC 방법에 첨가하여 흡착 조건에 따른 성장 구조의 변화를 고찰하였다. 즉 흡착 과정은 Lenard-Jones 포텐셜을 이용한 MD 시뮬레이션으로 수행하고 흡착 원자의 확산은 KMC 시뮬레이션으로 시행시키는, MD와 KMC 방법을 결합시켜 기존의 KMC 시뮬레이션에서 계산하기 어려운 입사조건에 따른 차이 계산을 할 수 있었다.

Zhang이 제시한 transient mobility가 없어도 비대칭적인 island가 형성되는 것을 볼 수 있었고, 이것이 island 앞쪽 끝 근방에 원자를 다량으로 흡착시키는 steering에 의한 영향이 원자의 빈번한

확산에 의해서도 사라지지 않는 것에 기인한 것임을 볼 수 있었다. 이러한 steering에 의한 비대칭성이 존재할 island의 크기 또는 island 사이의 평균 간격이 크기를 구하였으며, 온도 의존성, 흡착 원자의 각도 의존성을 봄으로써 steering 효과가 무시될 수 없는 조건을 확인하였다.

- [1] S. Dijken, L. C. Jorritsma, and B. Poelsema, Phys. Rev. Lett. 82, 4038(1999).
- [2] J. Zhong, E. Wang, Q. Niu, and Z. Zhang, Phys. Rev. Lett. 84, 3895(2000).