

## 【NII-01】

### 전산모사 방법을 이용한 비정질 탄소의 구조적 특성

이승협, 이승철, 이광렬, 이규환, 이준근  
한국과학기술연구원 미래기술연구센터

비정질 탄소 박막은 높은 밀도와 경도, 광학적 특성, 화학적 안정성 등 우수한 특성으로 인해 많은 연구가 보고되고 있다. 많은 비정질 탄소 박막 종류 중 ta-C (Tetrahedral Amorphous Carbon)는 다이아몬드와 매우 유사한 특성을 지니면서도 다이아몬드보다 합성이 용이하여 다양한 분야에 응용이 가능하므로 최근 주목을 받고 있는 물질이며 특히 Ta-C의 우수한 물질적 특성을 이해하기 위하여 나노(nano) 크기에서 원자의 거동들을 이해하고자 하는 연구가 많이 진행되고 있다. 그러나 실제 박막합성에서 원자 거동을 이해하는 것은 매우 어려우므로 전산모사 방법을 이용하는 연구가 유용할 것이다. 본 연구에서는 전산모사방법을 이용하여 비정질 탄소 박막을 만들고 구조적 특성을 조사하였다. 이용한 전산모사방법은 분자동역학 방법이며 Tersoff의 탄소에 대한 포텐셜을 사용하였다.<sup>(1)</sup> 비정질 탄소 구조는 열을 가하여 녹인 후 급속히 상온으로 냉각하는 열처리 방법과 임의의 위치에 원자 수를 증가시키는 원자수 증가 방법 그리고 원자를 다이아몬드기판 위에 증착시키는 방법을 사용하였다. 제작된 비정질 탄소 박막구조는 RDF (Radial Distribution Function) 분석, 밀도, sp<sup>3</sup>/sp<sup>2</sup> 비율 그리고 응력 및 에너지거동 등을 분석하였다. RDF 분석을 통해 비정질 탄소구조임을 확인 하였으며 특히 2~2.2Å 영역에서 새로운 peak가 나타나는데 이는 그 영역에서 준안정 상태의 원자가 존재할 수 있는 가능성을 보여주는 것이라고 생각된다. bulk diamond 밀도에 대한 비정질 탄소의 밀도비는 이온빔 증착의 경우가 0.89로 다른 경우인 0.68~0.7에 비해 높게 나타났다. sp<sup>3</sup> 함유량은 열처리 또는 원자 수 증가방법의 경우 약 15~18% 정도인데 비해 이온 빔의 경우 더 높은 함유량을 보여 주었다. 특히 이온빔의 에너지가 40~100 eV 일 때 가장 높은 sp<sup>3</sup> 분율을 보여주어 이온빔을 이용하여 합성한 박막의 sp<sup>3</sup> 분율의 거동과 일치하는 경향을 나타내었다.<sup>(2)</sup>

#### [참고문헌]

1. J. Tersoff, Phys. Rev. Lett, 19, 2879, (1988)
2. J. Robertson, Diamond and Related Materials, 3, 361-368 (1994)