

나노공정에서 금속 접합 컴퓨터 시뮬레이션에 관한 연구

A study of computer simulation for metal bonding in nano fabrication process

박성재*, 이세현**

* 한양대 대학원 정밀기계공학과

** 한양대 기계공학과

1. 서 론

나노 크기 이하에서의 분자들의 움직임은 일반 벌크 크기의 움직임 특성과는 다르다. 분자동역학 (Molecular Dynamics: MD) 기법은 분자 사이에 작용하는 힘에 대한 이론적 모델을 응용하여, 각 분자의 시간 및 공간적 거동을 관찰하는 이론적 해석기구이다. 분자동역학 시뮬레이션은 분자 규모의 상세한 미시적인 모형을 위한 방법론을 제시한다. 분자 동역학 시뮬레이션의 이론적 기반은 Newton의 운동법칙과 별다름이 없다.

현재 구리를 사용한 공정이 실리콘 반도체 공정에 중요하게 사용되고 있으며 향후 구리 나노 도선, 나노접합(nano contact)등이 계속 사용될 것이다. 분자동역학에 대해서 이전에는 금에 관한 연구가 대부분이었고 구리에 대해서는 Mehrez 와 Ciraci 의 연구뿐이다. Mehrez 와 Ciraci 는 분자동역학 방법을 적용하여 구리 나노 도선의 항복(yielding)과 파열(rupture)을 길이 확장 속도(stretch velocity)에 따라서 연구하였다. 그러나 그들의 연구에 사용된 나노 도선은 12 또는 13 개의 원자들로 구성된 5개 원자층으로 구성되어 있어서 구리 나노 도선의 파열 역학을 이해하기에 충분하지 못하였다. 또한 구리 나노 접합에 관한 시뮬레이션 연구도 수행되어지지 않았다.

따라서 본 연구에서는 지금까지 사용되었던 일반적인 분자 동역학 시뮬레이션을 사용하지 않고 금속에 있어서 비교적 잘 일치한다고 알려져 있는 Murray 와 Baskes¹에 의해 1983년에 발명된 EAM(Embedded Atom Method)을 이용하

여 구리의 인장강도와 접합에 관하여 시뮬레이션을 통해 연구를 하려고 한다. 따라서 본 연구에서는 EAM 을 이용한 시뮬레이션 알고리즘을 구현하고 구현된 알고리즘을 통해 시뮬레이션을 실시하여 그것이 macro 단위의 실제 구리의 인장강도 측정실험, 접합 실험과 잘 일치하는지를 확인하고 또한 형태 변화도 실험시의 형태변화와 잘 일치하는지를 알아본다.

2. Embedded Atom Method과 분자동역학

2.1 분자역학

원자들 사이의 결합에너지는 원자내의 모든 결합에 대한 상호작용에너지와 결합각에 의한 에너지, 비틀림각에 의한 에너지, 그리고 반데르발스 상호작용에너지와 기타 에너지로 구성된다

2.2 EAM(Embedded Atom Method)

EAM의 기본적인 개념은 금속결합으로 이루어진 물질에는 전자가 구름처럼 존재하게 되는데 그 전자의 밀도는 원자간 거리인 r 에 따라 변한다. 이 전자밀도가 존재함으로써 금속결합이 이루어지게 되고 금속결합의 특징인 fcc 나 bcc, hcc 등의 각각 결합구조를 이룰 때의 에너지가 상태가 최소가 되고 이 구조가 변형이 되려고 하면 다시 그 형태로 돌아가려는 힘이 발생한다는 것이다.

Embedded-atom method 에서 전체 에너지의 계산은 다음과 같다.

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i) \quad (1)$$

2.3 분자동역학

분자동역학의 방법은 앞에서 구해지는 퍼텐셜 V 를 구하고 그리고 나서 분자동역학 모의실험을 위해 상호 작용하는 N 개의 원자들로 구성된 계에 관해서 고전적인 운동방정식의 해를 얻어야 한다. 이 운동방정식들은 여러가지 방법으로 기술할 수 있지만 아마도 가장 기본적인 형태는 Lagrangian 운동방정식일 것이다.

$$m_i \ddot{r}_i = f_i \quad (2)$$

위에서 m_i 는 원자 i 의 질량이고

$$f_i = \nabla L = -\nabla V \quad (3)$$

은 원자 i 의 질량 중심에 미치는 힘의 총합이다. 이 식은 또한 분자 i 에 미치는 힘의 총합 f_i 으로써 분자의 무게 중심에 적용할 수 있다

2.3 분자동역학

운동방정식의 시간-적분 방법들 중 가장 많이 사용되는 방법은 Verlet[1967]에 의하여 처음으로 고안되고 Stromer[1971]에 의하여 사용된 Verlet 알고리즘이다. 이 방법은 2 차 미분방정식에 대한 직접적인 해를 구하는 알고리즘이며 현재의 위치 $r(t)$ 과 가속도 $a(t)$, 그리고 한 순간 과거의 위치 $r(t - \delta t)$ 에 그 기초를 둔다.

$$r(t + \delta t) = -r(t - \delta t) + 2r(t) + \delta t^2 a(t) \quad (4)$$

위의 식을 얻게 되면 분자동역학에서 구한 운동방정식을 이용하여 가속도를 구하게 되고 그 가속도를 위 식에 대입하여 다음 위치를 추적할 수 있다.

3. 결과

3.1 인장실험

인장실험에 사용되는 구리 나노 도선의 형태는 아래의 그림과 같다. 인장실험을 실시하여 단위길이에 걸리는 힘의 크기를 구하면 다음과 같

다.

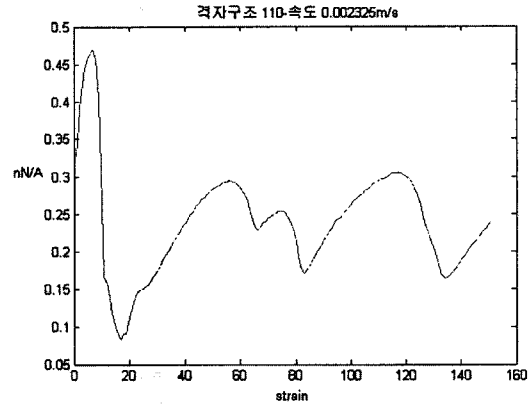


Fig .1 Force per length by strain (v=0.002325m/s)

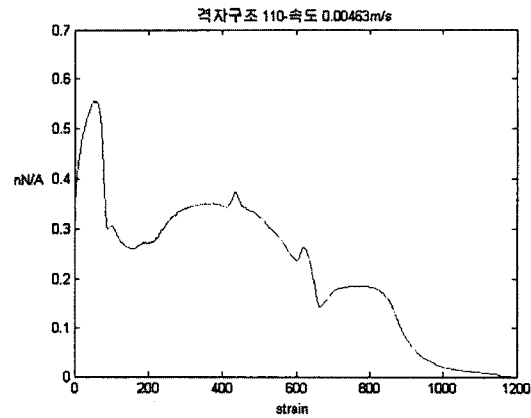


Fig .2 Force per length by strain (v=0.00463m/s)

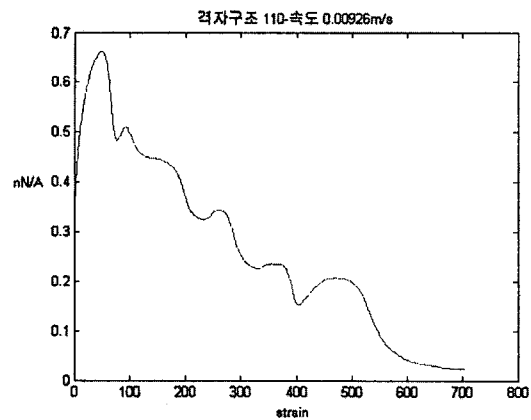


Fig .3 Force per length by strain (v=0.00926m/s)

위의 그림에서 볼 수 있듯이 격자구조 (110)에

서 변형속도가 빨라 질수록 단위 길이 당 걸리는 힘이 커짐을 볼 수 있다. 이는 더 빠른 변형이 이루어지기 위해서는 그만큼 더 큰 힘이 필요하다는 것을 보여준다.

3.2 접합실험

접합에 사용되는 시험 나노 도선은 인장실험에서 사용되었던 격자구조 (110)의 나노 도선이 아니라 격자구조 (100)의 도선의 형태를 사용하였다. 실험은 접합 조건을 압축율이 약 0.1 정도가 되면 접합을 멈추고 인장을 시작한다. 그리고 그 때의 단위 길이에 따른 힘을 구하게 된다. 단위 길이에 따른 접합력은 아래의 그림과 같다.

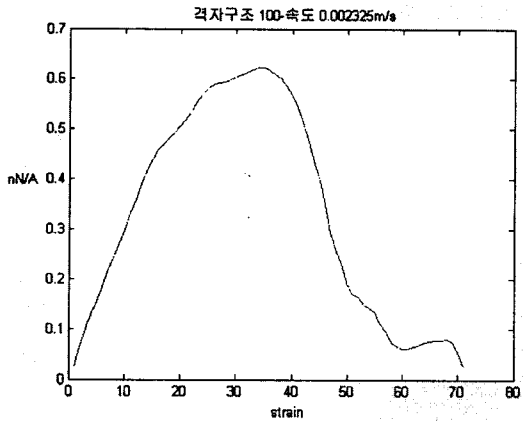


Fig. 4 Force per length by strain ($v=0.002325\text{m/s}$)

4. 결 론

본 연구는 지금까지의 일반적으로 분자동력학에 사용되는 여러 가지 소프트웨어를 사용하지 않고 직접 프로그램을 완성하였다. 그리고 여러 가지 에너지 계산법 중 금속에 가장 적합하다는 EAM을 사용하여 실제와 더욱 비슷한 시뮬레이션을 실시하였다. 구리 나노 도선의 인장강도 실험 결과에서 볼 수 있듯이 변형속도를 빠르게 할수록 더큰힘이 필요함을 알 수 있었고 접합실험에서는 접합이 된 후의 강도는 전에 강도보다 커짐을 알 수 있었다.

참 고 문 헌

1. Murray S. Daw and M. I. Baskes Phys. Rev. Lett. 50, 1285

(1983)
 2. H. Mehrez and S. Ciraci, Phys. Rev. B56, 12632 (1997)
 3. Y. Mishin, Phys. Rev. B63, 224106 (2001)
 4. Y. Mishin, Phys. Rev. B65, 224114 (2002)
 5. H. W. Han, D. J. Kim and H. K. Chang J. Korean Phys. Soc, Vol 41, No 2, 221 (2002)
 6. J. W. Kang and H. J. Hwang J. Korean Phys. Soc, Vol 38, No 6, 695 (2001)
 7. Murray S. Daw Phys. Rev B, Vol 39, No11, 7441 (1989)
 8. J. H. Rose, R. Smith, F. Guinea and J. Ferrante, Phy. Rev. B 29, 2963 (1984)
 9. S. M. Foiles, Phys. Rev. B 32, 7685 (1985)