

나노스케일 절삭현상의 분자동역학적 시뮬레이션

성인하*(연세대학교 대학원 기계공학과), 김대은(연세대학교 기계공학부),
장원석(한국기계연구원 나노공정그룹)

주제어 : 기계-화학적 나노리소그래피, 분자동역학적 시뮬레이션, 자기조립단분자막, 주사탐침현미경

본 연구에서는 나노스케일 절삭가공(nanometric cutting process)시에 미세 팁과 가공표면사이에서 발생하는 현상들에 대하여 분자동역학적 시뮬레이션을 통하여 살펴보았다. 본 연구의 목적은 실험적으로는 파악하기 어려운 극미세 가공에서 발생하는 나노트라이볼로지적 현상을 이해하고, 이를 토대로 기계적 가공에 기반하여 개발된 ‘기계-화학적 나노리소그래피(Mechano-Chemical Scanning Probe Lithography)’ 공정을 개선, 발전시키는데 있다. 기계-화학적 나노리소그래피 기술은 극초박막의 리지스트(resist)를 미세탐침을 이용하여 기계적 가공으로 제거하고, 이로 인해 표면으로 드러난 모재부분을 화학적 에칭에 의해 추가로 가공하여 원하는 패턴형상을 얻어내는 기술이다. 따라서, 고품위의 극미세패턴을 얻기 위해서는 접촉하중, 가공속도, 탐침형상 등 최적의 가공조건을 도출해내는 것이 중요하며, 이를 위해 탐침-표면간 상호작용 및 가공표면에서 어떠한 현상이 발생하는가를 이해하는 것은 필수적이다.

본 연구에서는 결정면, 가공방향/속도, 리지스트의 유무 및 종류, 탐침형상 등 다양한 가공변수들이 패턴 폭 및 형상에 미치는 영향을 고찰하였다. 이를 위하여 시뮬레이션을 위한 가공대상표면은 두 가지로 구성하였다. 하나는 (001), (011), (111)면으로 구성되는 면심입방격자(face-centered cubic) 구조를 갖는 단결정 금속표면으로 구성하였고, 다른 하나는 Fig. 1과 같이 자기조립단분자막(self-assembled monolayer, 이하 SAM)이 (111)면의 금속표면위에 증착된 모델로 구성하였다. SAM은 methyl terminal group을 갖는 single-chain alkanethiol ($\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{SH}$)을 (111)면위에 $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ 구조로 배열시켜 모델링하였다. 탐침은 강체(rigid atoms)로 구속하여 마멸되지않고 외부원자들과만 상호작용이 가능하도록 하였다.

순수 금속표면의 나노리소그래피에 대한 시뮬레이션 결과, 배분력과 절삭력의 비(ratio)로 나타내어지는 마찰계수는 결정면 및 절삭방향에 따라 달라지며, 0.8~1.0정도의 비교적 큰 값을 보였다. 절삭력 및 배분력은 (111)면에서 가장 크고 (011)면에서 가장 작게 나타나는데, 이러한 결과는 각 결정면내에서의 원자밀도 및 원자간 거리와 매우 밀접한 상관성이 있는 것으로 고찰되었다. 더불어, 패턴형성과정에서 전위(dislocation)의 생성에 의한 미세소성변형이 일어남을 슬립선(slip line)들로 확인할 수 있었다.

1-Hexadecanethiol SAM이 증착된 표면에 대한 시뮬레이션에서는 탐침의 형상에 따라 SAM분자들의 반응 및 패턴가공양상이 매우 크게 달라짐을 알 수 있었다. 또한, 절삭속도가 커짐에 따라 SAM분자들이 재정렬되기가 어려워져 SAM분자들의 마멸이 심하게 일어나는 경향을 나타내었다. 본 연구의 시뮬레이션 조건하에서는 탐침과 금속모재가 접촉하기 위한 최소하중은 7.4 nN이었으며, 이는 SAM분자의 길이와 분자수가 커질수록 증가하였다.

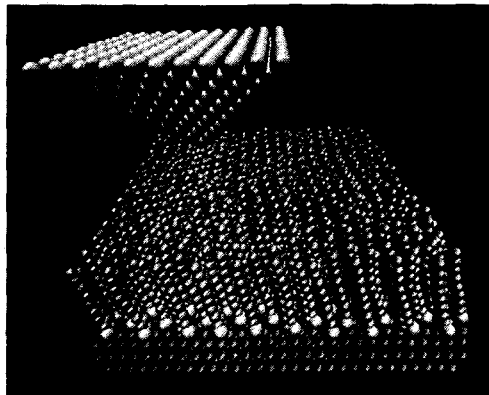


Fig. 1 System model comprised of a nano-probe and the self-assembled monolayer on a FCC (111) metal substrate