

전위의 생성 및 상호작용에 관한 나노 역학 해석

이영민[†] · 김성엽* · 전석기** · 임세영**

Nano Mechanics Analysis of Dislocation Nucleation and Interaction

Youngmin Lee, Sung Youb Kim, Sukky Jun and Seyoung Im

Key Words : Nanolithography(나노리소그래피), Molecular Dynamics Simulation(분자동역학 전산모사), Dislocation Interaction(전위 상호작용)

Abstract

Molecular dynamics simulation of nanolithography by AFM is conducted to study nucleation of various defects, and their subsequent development and interactions as well. During nanolithography via AFM, dislocation loops are emitted along the top surface, and resourceful defect interactions such as, formation of voids chain via the motion of a jog, and creations of extended nodes and Lomer-Cottrell Lock are observed.

1. 서 론

나노과학(Nanoscience) 및 나노기술(Nanotechnology)의 발전과 더불어 나노스케일의 크기를 갖는 박막 구조물에서의 기계적인 결함, 파괴, 마찰 등의 현상들에 대한 다양한 연구들이 광범위하게 수행되고 있다. 특히, atomic force microscopy(AFM)를 이용한 나노리소그래피(nanolithography)는 나노스케일에서의 박막 구조물의 기계적 특성을 연구하는데 널리 사용되고 있는 중요한 실험적 방법이다. 나노리소그래피를 이용하여 박막의 마찰계수, 마모(wear), 접촉 미끄러짐(contact slide), 박막과 기판 사이의 접착강도(adhesion between the film and substrate) 등을 측정할 수 있다[1,2]. 특히 기계적 나노리소그래피는 패터닝 구조물이나 quantum dot(QD), inplane-gate transistor(IPGT), single electron transistor(SET) 등과 같은 나노 구조 및 소자를 제작하는 유력한 방법으로 주목 받고 있다[3-5].

금속 박막이 나노리소그래피에 의해 변형을 하게 되면 박막 내부에는 많은 결함들이 발생하게

되고, 이런 결함들은 박막의 특성에 영향을 미치게 된다. 이러한 결함의 형성 과정과 발달 과정을 이해하는 것은 나노 구조 및 재료의 특성 해석뿐만 아니라 나노 소자의 설계 및 제작에 있어서도 중요한 이론적 기초가 되며, 더 나아가 더 큰 스케일에서의 결함, 파괴, 마찰 등의 현상 이해에도 도움이 된다. 아직까지 실험적 방법으로는 박막 구조물의 내부에서 발생한 현상들을 관찰하기가 거의 불가능하기 때문에, 최근에는 전산모사를 통한 연구가 많이 수행되고 있다. 특히 분자동역학과 같은 원자스케일의 전산모사 기법을 이용하여 나노리소그래피의 전산 모사가 많이 수행되고 있다. Mulliah 등[6]은 (100)면에 대해 다이아몬드 탐침을 이용하여 나노스크래치 전산모사를 수행하여, 탐침의 방향에 따른 마찰력과 pile-up 현상을 비교하였다. Fang 등[7]은 구리 (111)면에 대해 나노리소그래피 과정을 전산모사를 통해, 스크래치 과정에서의 마찰력과 pile-up 현상을 해석하였다. 이들은 모두 박막 표면에 초점을 맞추고 전산모사를 수행하였다. Zarudi 등[8]은 실리콘에 대해서 실험과 전산모사를 수행하였는데 탐침이 지나간 자리 아래로 결정구조가 비정질화 되는 현상을 관찰하였다. 이와 같이 아직까지 금속박막의 나노리소그래피 과정에서 발생하는 재료 내의 결함 발생과 발달 과정 및 그에 의한 박막의 물성치 변화 등은 아직까지 연구가 미미한 실정이다.

본 연구에서는 대용량 컴퓨터의 도움을 받아

[†] KAIST 기계공학과 대학원
E-mail : minicook@kaist.ac.kr
TEL : (042)869-3068 FAX : (042)869-3095

* KAIST 기계공학과 대학원

** KAIST 기계공학과

알루미늄으로 이루어진 박막에 대해, 나노리소그래피 과정을 분자동역학을 이용하여 전산모사 하였다. 구조물 내부의 결함의 생성과 발달과정에 초점을 두고 전산해석을 수행하였으며, 그 과정에서 나타나는 결함들간의 상호작용을 설명하였다.

2. 전산 모사 조건과 박막의 모델링

나노리소그래피를 위한 모델과 스크래치의 방향을 Fig. 1에 나타내었다. 나노리소그래피 전산모사를 위하여 두 가지 모델을 준비하였다. 첫 번째 사용한 모델의 크기는 $47.9(\text{nm}) \times 24.2(\text{nm}) \times 14.7(\text{nm})$ 이고, 원자의 개수는 1,037,232 개이다. 두 번째 사용한 모델의 크기는 $105.5(\text{nm}) \times 51.9(\text{nm}) \times 18.2(\text{nm})$ 이고, 원자의 개수는 6,060,600 개이다. 모델의 평면방향인 x 와 y 방향으로 주기적인 경계조건을 부여하였고, z 방향에 있는 위 면과 바닥 면에 대해서는 자유 경계조건을 부여하였다. 또한 나노리소그래피 과정에서 탐침에 의해 받는 외력으로 인한 박막의 강제운동을 방지하기 위해서 외력과 동일한 크기를 갖고 방향이 반대인 체적력을 모든 원자에 균등하게 분배하였다. 이로 인해 시스템 전체가 기계적 평형상태에 있게 하였다. 전산모사 시간 간격은 $5(\text{fs})$ 를 사용하였고, 시스템의 온도는 $1(\text{K})$ 를 유지하도록 하였다.

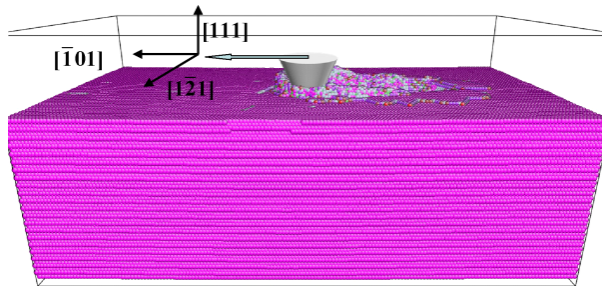


Fig. 1 Simulation model and scratching direction of Al nanolithography.

3. 스크래치 결과 결함들의 생성과 움직임 연구

나노리소그래피 과정에서 관찰되는 주요한 현상으로는 박막 표면에 알루미늄 원자가 쌓이는 pile-up 현상과 박막 내부에서 관찰되는 많은 결함들이 있다. 결함에는 표면을 따라서 글라이드 하는 전위 루프와 박막 내부에서 바닥 면으로 글라이드하는 전위 루프, 그리고 스크래치 표면 아래에 풍부하게 나타나는 점결함이 있다. 그리고 threading 전위와 비정질 구조를 관찰할 수 있다.

3.1 Pile-Up 현상

알루미늄 박막을 탐침으로 스크래치 하면 탐침의 앞과 양쪽 옆으로 원자가 수북이 쌓이는 pile-up 현상이 일어나게 된다. 스크래치의 깊이가 깊어질수록 pile-up 되는 원자의 양이 많아지는 것을 관찰할 수 있다. 스크래치의 깊이가 깊어질수록 pile-up 되는 원자의 양이 더욱 증가한다는 것은 이전의 연구들에서도 보고 되었던 현상이다.

3.2 전위 루프의 글라이드

나노리소그래피 과정도중 내부에서 전위루프가 글라이드 하는 현상을 관찰할 수 있었다. 전위루프가 글라이드 하는 모습은 두 가지 경우로 나눌 수 있는데, 한가지는 표면을 따라서 글라이드 되는 것이고, 하나는 바닥을 향해 글라이드 되는 것이다. 두 가지의 전위루프의 글라이드 하는 순간의 모습을 Fig. 2에서 원을 이용하여 표시하였다. Fig.2에서 a로 표시된 것은 박막 표면을 따라서 글라이드 되는 전위루프의 표면방출(surface emission) 현상이고, b로 표시된 것은 박막 내부로 글라이드 되는 전위루프의 내부방출(bulk emission) 현상이다.

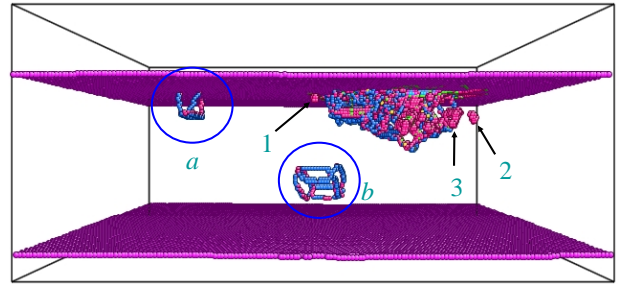


Fig. 2 Various defects inside Al film.

3.3 공공, 공공 체인, 공공 클러스터

나노리소그래피 과정도중에 표면과 그 바로 아래에 잔여 점결함이 풍부하게 나타난다. 이와 같은 잔여 점결함은 jog의 이동과 같은 전위의 상호작용을 통해서 생성된다.

Fig.2에서 숫자 1로 표시된 결함은 대표적인 잔여 점결함의 예이다. 이 점결함은 공공(vacancy)으로서 완전한 결정 구조에서 원자가 하나 빠져서 생성된다. Fig.2에서 숫자 2로 표시된 결함은 여러 개의 공공이 서로 결합하고 있는 형상인데, 공공 체인(vacancy chain)이나 공공 클러스터(vacancy cluster)를 이루고 있다. 실제로 나노리소그래피의 과정에서 단일 공공 외에도 공공 체인과 공공 클러스터를 풍부하게 관찰할 수 있다. 공공 체인이 jog의 이동에 의해 생성된다는 것은 이론적으로 알려져 있다[9, 10].

공공이나 공공 체인 등과 같은 잔여 결함은 전

위루프와 달리 움직임이 없다. 나노리소그래피 과정에서 스크래치가 진행되면서 생성되는 전위루프는 일반적으로 이동을 하여 경계면에서 사라지게 된다. 하지만 공공 등은 전위 루프와의 특별한 상호작용이 없는 이상 박막 내부에 그대로 남아 있게 된다. 잔여 결함의 운동성(mobility)이 전위루프의 운동성보다 현저하게 작기 때문이다. 따라서 나노리소그래피 과정과 그 이후에, 잔여 결함인 공공과 공공 체인 등이 전위루프보다 기계적, 전기적, 자기적, 광학적 특성 등 박막의 물성치에 더 큰 영향을 미친다고 볼 수 있다.

3.4 Threading 전위

나노리소그래피 과정 중에 위 면과 바닥 면을 이어주는 전위를 관찰할 수 있는데, 이를 threading 전위라고 한다. Threading 전위 또한 부분 전위형태로 존재한다. 스크래치 깊이가 깊은 경우에만 관찰된다. 스크래치 깊이가 깊지 않은 경우는 전위가 풍부하게 발달하지 않아 바닥 면에 닿기가 어렵기 때문이다. 나노리소그래피 과정에서 발견되는 threading 전위는 대부분 나사전위(screw dislocation)이다. 이러한 threading 전위가 이동을 하면서 서로 상호작용을 많이 일으킨다. 서로 상호작용하여 공공도 형성하고 생성된 전위의 절단 현상도 일어나게 된다.

3.5 비정질 구조

Fig.3 은 (111) 표면을 $[\bar{1}01]$ 방향으로 스크래치 하였을 경우 탐침이 지나가면서 잘린 양쪽 표면을 나타낸 그림이다. 그림 Fig.3 (b)에서 나타난 표면(스크래치 방향으로 볼 때 왼쪽 면)은 대부분 (010) 면이다. 반면에, Fig.3 (a)에서 나타난 표면은 그에 해당하는 낮은 Miller 지수가 없다. 대칭성을 고려하여 계산하면 근접한 가장 낮은 Miller 지수는 $(2\bar{1}2)$ 에 해당한다. 여기서 나타난 표면은 비정질 구조(amorphous)를 이루고 있다. 이와 같은 구조가 나타나는 것은 탐침의 각도와 깊이에 관련이 있다. 탐침의 각도에 대응하는 낮은 Miller 지수가 있는 경우에는 표면에너지를 낮추기 위해 정형화된 표면이 나타나지만, 대응하는 낮은 Miller 지수를 갖는 표면이 없을 경우, 표면원자들이 제각각 표면에너지를 낮추므로 비정질 구조가 나타나는 것이다. 이러한 비정질 구조는 Fig.3 에서 보는 바와 같이 아주 얇은 층으로 나타난다. 원자층으로는 2-8 개 층에 불과하며 이는 0.5-2nm 에 해당한다.

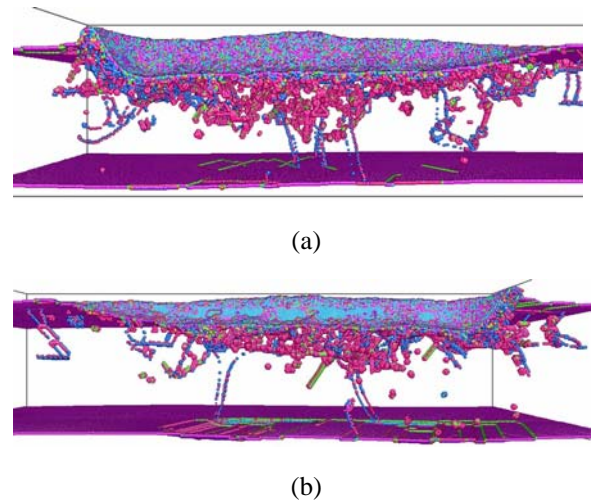


Fig. 3 Cross-sectional views of the surface.

나노리소그래피의 과정에서 탐침의 형상에 따라 다양한 구조를 갖는 표면이 생성된다는 사실은 아주 중요하다. 왜냐하면 서론에서 언급한 바와 같이 나노리소그래피가 나노스케일에서의 패터닝 구조나 평면게이트 트랜지스터, 단일전자 트랜지스터 등의 나노소자를 개발하는데 유망한 방법으로 주목받고 있는데, 이러한 나노구조 및 나노소자들은 모두 재료의 표면 성질을 이용하는 것이기 때문이다. 나노리소그래피에 의해 무정형구조가 생성되고 그에 따라 스크래치 된 표면의 성질이 원래 표면의 성질과 크게 달라진다는 점은, 화학적 증착(chemical deposition)과 같은 방법을 이용하여 패터닝 구조를 생성할 때에 더욱 중요해진다. 적절한 탐침의 형상과 스크래치 방향의 선택을 통해, 국소적으로 원하는 표면성질을 갖도록 나노리소그래피를 실제로 구현할 수 있는 가능성이 있다.

4. 결함들간의 상호작용

나노리소그래피 과정에서 공공 등과 같은 잔여 결함의 생성과 전위루프의 방출 외에 관찰할 수 있는 중요한 결함 메카니즘은, 전위루프간의 상호작용과 전위루프 및 공공 클러스터 사이의 상호작용이다. 실제로 전산모사 과정에서 나타나는 공공이나 공공 체인의 많은 부분이 서로 다른 미끄러짐 면을 따라 이동하는 두 전위 또는 전위루프가 서로 상호작용하여 생성되는 것을 관찰 할 수 있다.

4.1 전위루프간의 상호작용

Fig.4 에 두 전위루프가 서로 상호작용하여 jog 와 kink, extended node 를 형성하는 과정을 나타내었다. Jog 는 전위가 다른 미끄러짐 면 위에 스텝을 이루면서 존재하는 것이고, kink 는 전위가 같은 미끄러짐 면 위에서 스텝을 이루면서 존재하는 것

이다. Extended node 는 부분전위가 서로 상호작용하여 세 branch 이상의 부분전위가 한 지점에서 만나는 현상을 말한다. Fig.4 (a)에서와 같이 서로 다른 (111) 미끄러짐 면상에서 서로 다른 방향으로 이동하는 두 부분전위는 Fig.4 (b), (c)에서와 같이 서로 상호작용하여 jog 및 kink, extended node 와 같은 국소적인 전위를 생성하게 된다. 이와 같은 두 전위의 상호작용은 extended node 오른쪽에 있는 두 branch 의 전위루프가 서로 상호작용하여 하나의 새로운 전위루프가 되어 이동하고 Fig. 4 (d)에서와 같이 두 개의 전위루프로 나뉘어 분리됨으로써 끝나게 된다. Jog, kink, extended node 와 같이 널리 알려진 두 전위루프의 상호작용 메카니즘은 나노리소그래피 전산모사과정에서 아주 활발하게 진행된다. 스크래치의 깊이가 깊어짐에 따라 전위루프가 풍부하게 발달하기 때문에 더욱 자주 관찰된다.

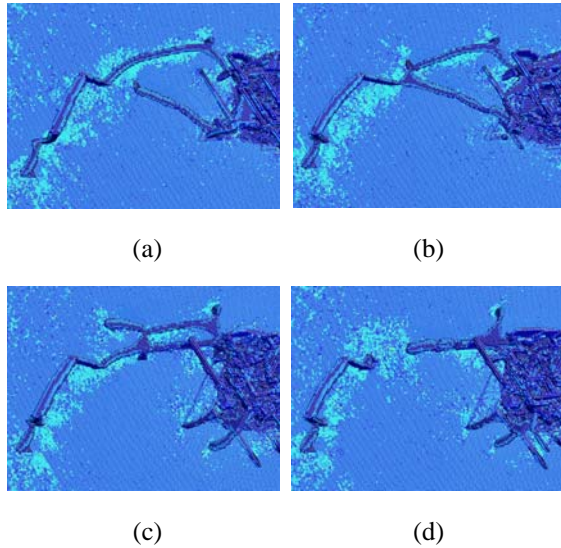


Fig. 4 Interaction of two partial dislocations

4.2 Jog 의 이동에 따른 공공의 생성

Fig. 5 에서는 두 전위루프가 서로 상호작용하여, 공공 체인을 형성하는 과정을 나타낸 것이다. Fig. 5 (a) 에서처럼 두 개의 서로 평행한 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 미끄러짐 면에서 서로 다른 방향으로 진행해온 두 전위루프는 Fig.5 (b) 에서와 같이 서로 상호작용하게 되고, 그 결과로 jog 를 이룬다. 그럼 Fig. 5 (c)에서와 같이 생성된 jog 가 이동함에 따라 반대쪽으로 공공을 형성하게 되며, 계속적인 이동을 통해 공공이 한 방향으로 늘어나게 된다. 즉, 공공 체인을 형성하는 과정을 관찰할 수 있다. 공공 체인의 형성과정은 Fig. 5 (d)에서와 같이 다른 수직 벡터를 갖는 $(1\bar{1}\bar{1})$ 미끄러짐 면 위에서 이동하는 세 번째 전위루프와의 상호작용에 의해 끝나게 된다. 동일한 수직벡터를 갖는 서로 평행한 두 미끄러짐 면 위에서 진행하는 두 전위루프의 상호작용을 통해

jog 가 형성되며, 이 jog 의 이동을 통해 연속적인 공공이 생성되게 된다. 서로 수직벡터가 다른 두 미끄러짐 면 위에서 이동하는 두 전위루프는 서로 상호작용 시 새로운 두 개의 전위루프를 형성하면서 기존의 전위루프를 절단하는 역할을 하게 된다.

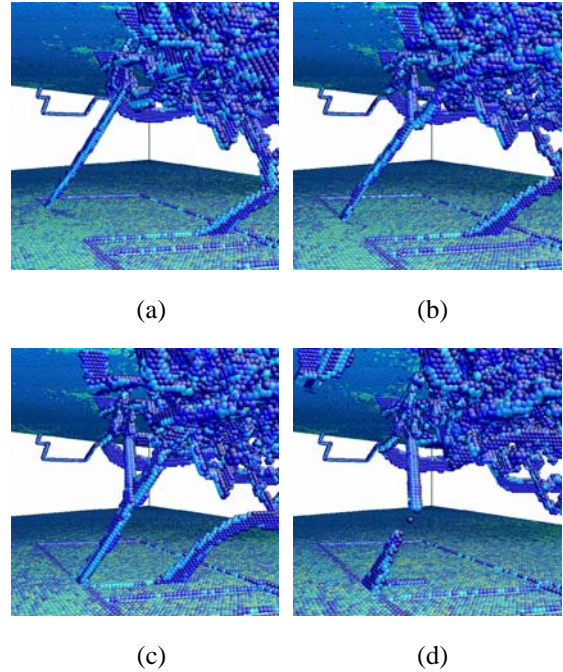


Fig. 5 Formation of a void chain due to motion of jog

4.3 전위의 상호작용에서 Lock 의 형성

Fig.6 에서는 서로 다른 수직벡터를 갖는 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 미끄러짐 면과 $(1\bar{1}\bar{1})$ 미끄러짐 면 위에서 진행되는 두 전위루프가 서로 상호작용하여 locking 되는 현상을 나타내었다. $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 미끄러짐 면 위에서 전위 루프의 이동방향은 $\langle \bar{1}01 \rangle$ 방향이 되고, 이 전위 루프는 $\frac{a}{6}\langle \bar{2}\bar{1}1 \rangle$ 과 $\frac{a}{6}\langle \bar{1}12 \rangle$ Burger's 벡터를 갖는 두 개의 Shockley 부분 전위 루프로 이루어져 있다. $(1\bar{1}\bar{1})$ 미끄러짐 면 위에서 이동하는 다른 전위루프는 $\langle 0\bar{1}1 \rangle$ 의 이동방향을 갖고, $\frac{a}{6}\langle \bar{1}\bar{2}1 \rangle$ 와 $\frac{a}{6}\langle 1\bar{1}2 \rangle$ Burger's 벡터를 갖는 두 개의 Shockley 부분 전위 루프로 이루어져 있다. FCC 구조에서 서로 다른 미끄러짐 면에서 접근하는 두 완전한 전위루프가 두 미끄러짐 면의 교차선에서 locking 을 일으키는 것을 Lomer Lock 이라 부른다. 또한 서로 접근하는 두 전위루프가 완전한 전위루프가 아니라 Shockley 부분 전위루프인 경우에는 Lomer-Cottrell Lock 이라 부른다. Fig.6 에서 관찰된 역삼각뿔 모양의 결함은 두 Shockley 부분 전위루프가 교차하면서 형성하는

Lomer-Cottrell Lock 이다. 일단 전위루프가 Lock 을 이루게 되면 그 이동성을 잃게 되며, 외부에서의 작용이 없으면 그 형상을 계속 유지하게 된다. Fig.6 과 같은 Lock 은 본 연구의 전산모사 과정에서 자주 나타나며, 오랜 시간 동안 형상과 위치를 유지하면서 고정되는 것을 관찰할 수 있다. 그러다가 탐침이 Lock 근처에 접근을 하면 다시 이동성을 가지고 표면에 테라스만 남기고 이동을 하게 된다.

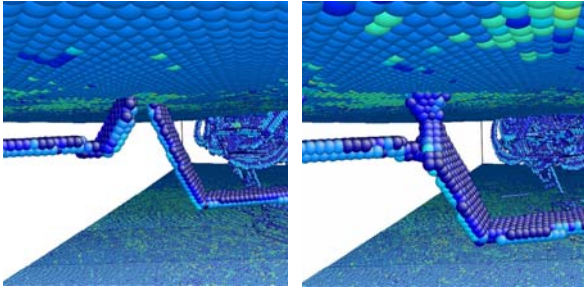


Fig. 6 Formation of locking due to interaction of two partial dislocations

5. 결 론

다양한 전위루프의 발달과정과 상호작용과정, 그리고 전위와 공공(vacancy)의 상호작용과정에 초점을 두어 분자동역학을 이용하여 나노리소그래피 과정을 전산모사 하였다.

나노리소그래피의 과정중에 전위루프의 내부 방출(bulk-emission)과 표면 방출(surface-emission)이 관찰되고, 탐침이 지나간 자리 아래로 많은 수의 공공이 생성되는 것을 관찰하였다. 스크래치 깊이가 깊어짐에 따라 풍부한 전위루프와 공공클러스터가 생성되며, 여러 가지 전위루프 간의 상호작용에 의하여 jog, kink, 확장된 전위노드, locking 과 같은 흥미로운 현상이 관찰된다.

이와 같이 나노리소그래피의 원자수준 전산모사를 통해, 단결정 내의 결함생성과 발달과정에 대한 의미 있는 해석을 수행하였다.

후 기

본 연구는 21 세기 프론티어연구개발사업인 나노메카트로닉스기술개발사업단의 연구비 지원(O2-K14-01-012-1-0)을 통해 수행되었습니다.

참고문헌

(1) Carpick, R. W. and Salmeron, M., 1997, "Scratching the surface: Fundamental investigations of tribology

with atomic force microscopy", Chem. Rev., Vol. 97, pp. 1163-1194.

(2) Komanduri, R., Chandrasekaran, N. and Raff, L. M., 2000, "MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum", Wear, Vol. 240, pp. 113-143.

(3) Dryakhlushin, V. F., Klimov, A. Yu., Rogov, V. V., Shashkin, V. I., Sukhodoev, L.V., Volgunov, D.G. and Vostokov, N. V., 2000, "Development of contact scanning probe lithography methods for the fabrication of lateral nano-dimensional elements", Nanotechnology, Vol. 11, pp. 188-191.

(4) Hyon, C. K., Choi, S. C., Song, S.-H., Hwang, S. W., Son, M. H., Ahn, D., Park, Y. J. and Kim, E. K., 2000, "Application of atomic-force-microscope direct patterning to selective positioning of InAs quantum dots on GaAs", Appl. Phys. Lett., Vol. 77, No. 16, pp. 2067-2069.

(5) Schumacher, H. W., Keyser, U. F., Zeitler, U., Haug, R. J. and Eberl, K., 1999, "Nanomachining of mesoscopic electronic devices using an atomic force microscope", Appl. Phys. Lett., Vol. 75, No. 8, pp. 1107-1109.

(6) Mulliah, D., Christopher, D., Kenny, S. D. and Smith, R., 2003, "Nanoscratching of silver (100) with a diamond tip", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 202, pp. 294-299.

(7) Fang, T.-H., Weng, C.-I. and Chang, J.-G., 2002, "Molecular dynamics simulation of nano-lithography process using atomic force microscopy", Surface Science, Vol. 501, pp. 138-147.

(8) Zarudi, I., Cheong, W. C. D., Zou, J. and Zhang, L. C., 2004, "Atomistic structure of monocrystalline silicon in surface nano-modification", Nanotechnology, Vol. 15, pp. 104-107.

(9) Hull, D. and Bacon, D. J., 2001, "Introduction to Dislocations", Fourth ed., Butterworth-Heinemann.

(10) Hirth, J. P. and Lothe, J., 1982, "Theory of dislocations", Second ed., John Wiley & Sons, New York.