

입사에너지의 분포에 따른 비정질 경질 탄소 박막의 구조 및 특성: 분자동역학 연구

이승현*,**, 김태영*, 이승철*, 정용재**, D. Brenner***, 이광렬*

*한국과학기술연구원, **한양대학교 세라믹공학과, ***NC State Univ.

진공여과 아크증착법(Filtered vacuum arc)에 의해 증착되는 비정질 경질 탄소박막(tetrahedral amorphous carbon)은 우수한 기계적 특성 및 광학적 특성에 의해 다양한 부품에서의 보호층으로 많이 연구되고 있다. 그러나 박막의 높은 잔류응력은 기판과의 접착력을 저하시켜 응용분야가 제한되기 때문에 잔류응력을 낮추기 위한 연구가 진행되고 있다. 최근에는 원자단위 전산모사 기법인 분자 동역학법(molecular dynamics)을 사용하여 비정질 탄소박막의 잔류응력 거동을 원자 규모에서 분석하는 연구가 진행되고 있다.⁽¹⁾

본 연구에서는 일정한 범위의 입사에너지를 가진 탄소가 증착되어 박막을 형성할 때 박막의 원자구조 및 잔류응력의 변화를 분자동역학 기법을 사용해 해석하였다. 탄소원자의 에너지는 가우스분포를 가진다고 가정하였으며 평균 입사에너지 75 eV 를 기준으로 에너지의 표준편차(σ)의 크기를 변수로 설정하였다. 탄소 원자간 포텐셜은 Brenner가 제안한 원자간 포텐셜을 사용하였다. 형성된 비정질 경질 탄소박막의 평균 밀도는 3.14 g/cm^3 으로 일반적인 실험에서 측정되는 비정질 경질 탄소박막의 밀도와 유사한 값을 보여주었다. 표준편차(σ)에 따른 박막의 잔류응력 거동은 표준편차가 증가함에 따라 감소하는 거동을 보여주었다. 잔류응력의 거동의 변화를 원자의 구조적 관점에서 분석하기 위해 반경분포함수(radial distribution function)를 사용하였다. 약 2.1 Å 영역에서 이차 이웃원자의 위성 peak이 나타났으며 이 peak 위치에 존재하는 원자의 수의 거동이 잔류응력의 거동과 유사한 것을 알 수 있었다. 이 위성 peak의 물리적 의미와 원자구조와의 관계로부터 박막의 잔류응력을 발생하는 원인이 뒤튼어진 원자들의 결합거리와 결합각에 있으며 입사하는 에너지에 따라 이러한 뒤튼린 결합이 변화하는 것을 알 수 있었다.

[참고문헌]

1. S. H. Lee, C. S. Lee, S. C. Lee, K. H. Lee and K. R. Lee, Surf. Coat. Technol., 177-178, 812, (2004)