

## 열처리가 비정질 탄소박막의 원자구조 변화에 미치는 영향에 대한 분자동역학 연구

김경수<sup>1,2</sup>, 이승철<sup>1</sup>, 이광렬<sup>1</sup>, 차필령<sup>2</sup>

<sup>1</sup>한국과학기술연구원 미래기술연구본부, <sup>2</sup>국민대학교 신소재학과

사면체결합을 가지는 비정질 탄소 (tetrahedral amorphous carbon, ta-C)는 높은 경도와 높은 내마모성과 같은 우수한 기계적인 특성이 있지만 높은 박막의 잔류응력으로 인해 박막과 기판 사이의 결합력이 약화되어 박리가 일어나거나 기판 자체가 변형되기 때문에 ta-C 박막의 광범위한 응용에 제한을 받게 된다. A. C. Ferrari 등[1]은 열처리를 통해 ta-C 박막의 잔류응력을 줄일 수 있다고 보고했지만 어닐링 전후의 잔류응력,  $sp^3$  변화 등과 같은 현상학적인 것에 대해서만 설명했고 원자구조의 관점에서 잔류응력을 감소시키는 메커니즘에 대한 연구는 없었다.

본 연구는 분자동역학 기법을 사용해 ta-C박막을 증착시키고 어닐링이 응력감소에 미치는 영향을 원자구조 측면에서 분석하였다. ta-C박막은 내재적인 결정구조가 없기 때문에 통계적인 방법을 통해 박막내의 원자구조의 변화를 관찰하는 것이 필수적인데 본 연구에서는 radial distribution function(RDF)과 Bond Ratio, angle distribution 등의 분석기법을 사용하였다. 원자구조 분석결과 어닐링 전의 박막의 잔류응력에 가장 큰 영향을 미치는 구조는 준안정상에 해당하는 2.0~2.2 Å 거리에 있는 원자들 중 공통 인접원자를 갖고 있는 원자들(유형 I 준안정상)임을 알 수 있었으며, 어닐링 후에는 이와 같은 높은 응력을 가지는 원자의 수가 현저히 감소함을 알 수 있었다. 또한 원자간 거리와 원자 사이의 각도를 분석해 유형 I 준안정상에서 관찰되는 왜곡된 원자사이각이 어닐링을 통해 평형에 가깝게 회복된다는 것을 알 수 있었다.

### [참고문헌]

1. A. C. Ferrari, B. Kleinsorge, N. A. Morrison, A. Hart, V. Stolojan, and J. Robertson, "Stress reduction and bond stability during thermal annealing of tetrahedral amorphous carbon", J. Appl. Phys. 85, 7191 (1999).