

## MEMS 부품 제조를 위한 나노 리소그래피 공정의 3 차원 분자동역학 해석

김영석<sup>†</sup> · 이승섭<sup>\*</sup> · 나경환<sup>\*\*</sup> · 손현성<sup>\*\*\*</sup> · 김 진<sup>\*\*\*</sup>  
(2003년 4월 11일 접수, 2003년 8월 25일 심사완료)

### Three Dimensional Molecular Dynamics Simulation of Nano-Lithography Process for Fabrication of Nanocomponents in Micro Electro Mechanical Systems (MEMS) Applications

Young-suk Kim, Seung-sub Lee, Kyoung-hoan Na,  
Hyun-sung Son and Jin Kim

**Key Words :** 초소형 전자기계기술(Micro electro Mechanical System, MEMS), Molecular Dynamics Simulation(분자동역학 해석), Nano-Lithography (나노 리소그래피), Morse Potential (몰스 포텐셜)

#### Abstract

The atomic force microscopy (AFM) based lithographic technique has been used directly to machine material surface and fabricate nano components in MEMS (micro electro mechanical system). In this paper, three-dimensional molecular dynamics (MD) simulations have been conducted to evaluate the characteristic of deformation process at atomistic scale for nano-lithography process. Effects of specific combinations of crystal orientations and cutting directions on the nature of atomistic deformation were investigated. The interatomic force between diamond tool and workpiece of copper material was assumed to be derived from the Morse potential function. The variation of tool geometry and cutting depth was also evaluated and the effect on machinability was investigated. The result of the simulation shows that crystal plane and cutting direction significantly influenced the variation of the cutting forces and the nature of deformation ahead of the tool as well as the surface deformation of the machined surface.

#### 1. 서 론

초소형 전자기계기술(Micro Electro Mechanical System, MEMS)은 반도체기술, 기계기술, 그리고 광 기술 등을 융합하여 마이크로 단위의 초 미세 부품을 설계, 제작하고 이를 바이오, 정보통신, 운송 및 항공, 광학 등 첨단 미래 산업에 응용하는

기술이다.<sup>(1)</sup> 대부분의 MEMS 부품은 서브 마이크로 스케일 또는 그 이하의 나노 스케일의 정밀도를 요구한다. 이를 구현하기 위해 주로 반도체 공정 기술을 이용한 리소그래피(lithography) 가공기술이 이용되고 있다. 그러나 LIGA, 이온 빔, 레이저 등에 의한 리소그래피 가공 기술들은 수십 나노 미터(nano meter, nm) 까지 패턴가공이 가능한 장점이 있지만 많은 설비 투자와 복잡한 공정이 요구되는 단점이 있어 선택적으로 사용되고 있다.

최근에는 탐침이 재료와의 접촉 또는 비접촉 모드에서 재료의 표면구조를 형상화하거나 탐침과 재료간의 전기적, 화학적, 생물학적 반응을 이용하여 재료 표면의 원자나 분자 배열을 조작하고 재료의 물성평가에 널리 이용되는 SPM (Scanning Probe Microscope)<sup>(2)</sup> 기술의 한 종류인 AFM(Atomic

<sup>†</sup> 책임저자, 회원, 경북대학교

E-mail : caekim@knu.ac.kr

TEL : (053)950-5580

<sup>\*</sup> 한국과학기술원

<sup>\*\*</sup> 한국생산기술연구원

<sup>\*\*\*</sup> 경북대학교 대학원

Force Microscope) 을 이용하여 직접적으로 재료의 표면을 기계적으로 가공하여 나노 구조의 부품을 제조하는 나노 리소그래피(nano-lithography) 기술이 활발하게 연구되고 있다.<sup>(3,4)</sup>

이 기계식 나노 리소그래피 공정기술은 나노미터 크기의 반경을 갖는 다이아몬드 미소 탐침 (tip 또는 probe)을 이용하여 재료 표면을 스크래치 가공하여 나노 스케일 크기의 원하는 형상을 만드는 방법이다. 이러한 기계식 나노 리소그래피 공정은 주로 알루미늄, 구리, 실리콘 웨이퍼 등의 단결정 재료를 대상으로 한다. 그런데 이런 단결정 재료들은 결정방위에 따라 물리적, 기계적 특성이 다른 이방성(anisotropy)을 갖는다.

따라서 기계식 나노 리소그래피 공정을 통한 나노 부품의 가공 시에 결정방위, 즉 결정면(crystal plane)과 가공방향(cutting direction)에 따른 제반 가공특성 - 가공력, 소성변형 메커니즘, 칩 형성 기구와 가공 후 표면 거칠기의 변화 등- 을 파악하는 것은 나노 부품의 가공 정밀도를 향상시키고 가공 공정을 최적화하는 데에 있어서 중요한 의미를 가진다. 그런데 가공되는 깊이가 나노 미터 오더이므로 가공공정의 특성을 실험적으로 파악하는 것은 쉽지않기 때문에 전산 모사해석(computational simulation)이 유용한 수단으로 채용되고 있다.<sup>(3-5)</sup>

수 나노 미터 이하의 깊이로 복수 개의 원자층 만을 스크래치 가공하는 이러한 기계식 나노 리소그래피 공정의 해석에는 연속체 개념에 입각한 기존의 유한요소 해석 적용이 곤란하기 때문에, 원자 레벨에서 나노 재료의 원자 간에 작용하는 상호 포텐셜과 힘에 의한 원자들의 운동 거동을 기술하는 분자동역학(molecular dynamics, MD)기법<sup>(6-11)</sup>이 활용되고 있다. 이 분자동역학 해석은 나노 정도 측정시의 압자 밑에 존재하는 원자들의 소성변형거동,<sup>(12)</sup> 나노 마찰거동,<sup>(13,14)</sup> 크랙 선단의 파괴거동<sup>(15)</sup> 등의 해석에 널리 이용되고 있다. 특히 본 연구와 관련하여 강체 공구를 이용한 구리의 나노 절삭에서의 공구형상에 의한 영향 연구<sup>(16)</sup> 및 가공방향에 따른 가공 후 표면 거칠기에 대한 영향 연구<sup>(17,18)</sup>, 나노 리소그래피 공정의 해석 연구<sup>(4,5,19)</sup> 등은 기초연구로서 주목 받고 있다.

본 논문에서는 AFM 을 이용한 기계식 나노 리소그래피 공정에 대해서 3 차원 분자동역학 해석을 수행하여 다이아몬드 공구와 단결정 구리 재료 간의 상호 작용을 원자단위에서 파악하고, 공구의 형상 및 가공깊이에 의한 가공력의 변화 거동을 파악하였다. 또한 기계식 나노 리소그래피 공정에서의 가공특성에 대한 결정방위와 가공방향의 영

향을 파악하기 위하여 결정방위 면족{(111), (110), (001)}과 가공 방향족 <[-110], [-211], [100]>의 특정한 조합에 대해서 해석을 수행하였다.

## 2. 분자동역학법의 개요

분자동역학법은 다수의 원자, 분자의 입자로 구성되는 가상적인 계에 대하여 입자 간에 상호작용 하는 포텐셜을 이용하여 각 입자에 작용하는 힘을 구하고, 뉴턴역학 따라 각 입자의 운동을 다루는 학문이다. 즉, 분자동역학에서는 뉴턴의 운동방정식을 수치 적분하여 각 시간마다의 입자의 위치  $r_i(t)$ 와 속도  $v_i(t)$ 을 구하고 이 값들로부터 각종 물리량을 구하는 수치 해석적인 방법이다.<sup>(2)</sup>

본 연구에서는 모재인 구리 원자들의 운동을 묘사하기 위하여 원자 간에 작용하는 포텐셜 함수로써 몰스 포텐셜(Morse potential)<sup>(6)</sup>을 사용하였다. 이 몰스 포텐셜은 공유결합에 의해 결합된 두개의 원자 간의 상호작용 에너지의 성질을 잘 나타내는 특징이 있다. 물론 구리 원자에 대해 보다 정확한 포텐셜로서 EAM 포텐셜<sup>(20)</sup>과 같은 다 입자간 포텐셜이 사용될 수 있지만 많은 경우에 계산상의 장점으로 인해 두 물체간 포텐셜이 널리 사용되고 있어 본 연구에서도 몰스 포텐셜을 사용하였다. 한편 나노 리소그래피 공정 중에 온도가 일정한 상태로 유지되고 있다고 가정하였다.

두 원자  $i$ 와  $j$ 사이의 포텐셜  $\Phi(r_{ij})$ 는 아래의 식 (1)과 같이 나타내지며, 두 원자 간에 작용하는 힘  $F(r_{ij})$ 는 이 포텐셜을 거리에 대하여 편 미분한 값으로 식 (2)로 정의된다.

$$\Phi(r_{ij}) = D[e^{-2a(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-a(r_{ij}-r_0)}] \quad (1)$$

$$F(r_{ij}) = \frac{\partial \Phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} = m \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} \quad (2)$$

Fig. 1 과 Table 1 에 각각 식 (1)의 몰스 포텐셜 함수의 형상과 포텐셜 파라미터들을 나타내었다. 원자의 운동을 추적하기 위해 식 (2)의 수치적분에는 수정 베르렛 방법(modified Verlet method)을 사용하였다.<sup>(6,7)</sup> 이 식 (2)의 운동방정식은 2 개의 상미분 방정식이므로 해를 구하기 위해서는 초기 조건으로써 초기의 기준시간  $t=0$ 에서 각 원자의 초기위치  $r_i(0)$ 와 각 원자의 초기속도  $v_i(0)$ 를 해석 목적에 따라 적절히 설정할 필요가 있다. 본 연구에서와 같이 금속 결정체를 대상으로 하는 경우에 초기원자의 위치는 격자구조로부터 결정된다

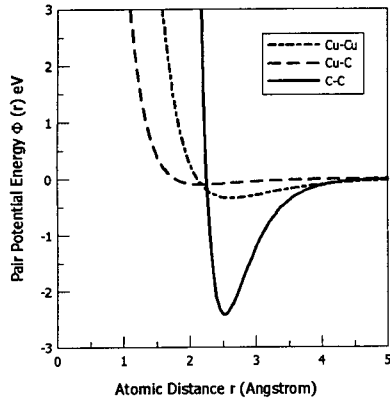


Fig. 1 Curves of various Morse potential

Table 1 Parameters used in the Morse potential

Pair	D [eV]	a [Å]	$r_0$ [Å]	Lattice Constant [Å]
Cu - Cu	0.343	1.359	2.626	3.6153
Cu - C	0.100	1.700	2.200	-
C - C	2.423	2.555	2.522	3.5680

즉, 해석하기 전에 먼저 절대 온도가 영도에서부터 상온(300K)에 이르도록 완화과정을 거치고, 포텐셜과 운동 에너지가 평형상태 (equilibrium state)에 이르렀을 때의 원자위치를 초기 원자위치로 한다. 또한 초기속도의 방향은 균일 난수의 발생에 의해 랜덤하게 설정하고, 초기속도의 크기는 각 원자의 운동에너지( $mv^2/2$ )의 평균이  $3k_B T/2$ (여기서  $k_B$ 는 볼츠만 상수)가 되도록 맥스웰-볼츠만 분포에 따라 결정한다. 본 연구에서는 3차원 분자동역학 해석 시에 요구되는 막대한 계산 시간을 줄이기 위해 일정한 거리 내에 있는 원자만을 대상으로 상호간의 포텐셜과 힘이 작용하도록 하는 입자등록법(bookkeeping method)과 고정거리 컷오프 방법(cutoff method)을 이용하였다.<sup>(6,7)</sup> 각각에 사용된 값은  $r_{BK}=3.5r_0$ 와  $r_c=3.5r_0$ 이다. 또한 해석중에 항상 계의 온도를 일정한 값으로 유지하기 위하여 속도 스케일링 방법(velocity scaling method)을 도입하였다.

### 3. 시뮬레이션 모델과 가공조건

AFM에 의한 나노 리소그래피 공정의 분자동역학 해석에 사용된 모델을 Fig. 2에 나타내었다. 이때 공구는 반구형 형상을 갖는 강체 다이아몬드로 모델링 되었고, 모재는 FCC 구조를 갖는 단결정 금속인 구리로 모델링 하였다. 또한 공구 형상에 따른 영향을 파악하기 위해 공구를 반구형과 원추

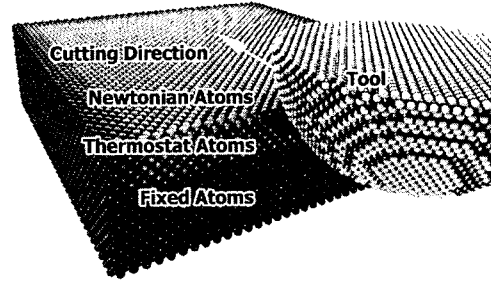


Fig. 2 MD simulation model

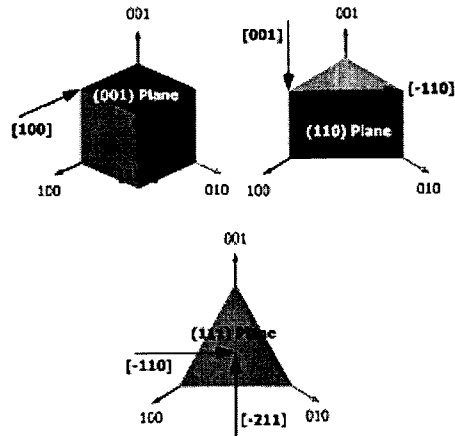


Fig. 3 Crystal orientation and the corresponding forming directions

형(-45° 경사각)의 두 가지로 하였으며, 공구의 가공깊이를 각각 모재의 3층, 5층, 7층(10.8Å, 18Å, 25.2Å에 해당)으로 하여 가공깊이에 대한 영향을 살펴보았다. 한편, 모재는 각각 경계(boundary), 열 제어부(thermostat), 뉴우톤 역학에 따르는 운동부(Newtonian)의 세 부분으로 구성 하였다. 경계부는 모든 원자들의 변위를 영으로 고정된 최외각 두 층의 원자들로 구성하였다. 한편 이에 인접한 세 층으로 구성된 열 제어부의 원자들은 계산 중 특정한 시간 간격으로 원자들의 속도가 속도 스케일링 방법에 의해 제어되어 계의 온도가 항상 300K로 일정하게 유지되도록 하는 역할을 한다.

또한 나노 리소그래피 공정에서 결정방위(결정면의 방향과 가공방향)의 영향을 알아보기 위해 모재를 면족{ $(111)$ ,  $(110)$ ,  $(001)$ }을 갖도록 회전시켜 배치시키고 각각의 경우에 공구의 진행방향을 방향족  $\langle[-110]$ ,  $[-211]$ ,  $[100]\rangle$ 으로 하여 총 6가지의 조합에 대해서 해석을 수행하였다.

**Table 2** Computational parameters used in MD simulation

Configuration	3-D MD simulation	
Workpiece material dimension	38a x 38 a x 11 a (a=Lattice constant, 3.6 Å=0.36nm)	
No. of atoms in workpiece	Crystal setup	
	A	(001)[100] 59062
	B	(001)[-110] 60059
	C	(110)[001] 58182
	D	(110)[-110] 58182
	E	(111)[-211] 58746
F	(111)[-110] 58746	
Tool dimension (a=2.6 Å)	Hemisphere	Tool radius = 25a
	Cone	Tool height = 25a
Depth of forming	0.36nm, 0.72nm, 1.08nm	
Forming speed	200 m/sec	
Bulk Temperature	300 K	

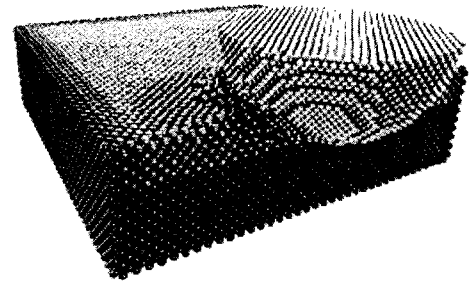
각각의 결정면과 가공방향 Fig. 3 에 나타내었고 그에 따른 가공 조건과 계산에 사용된 파라미터들을 Table 2 에 나타내었다.

#### 4. 시뮬레이션 결과 및 고찰

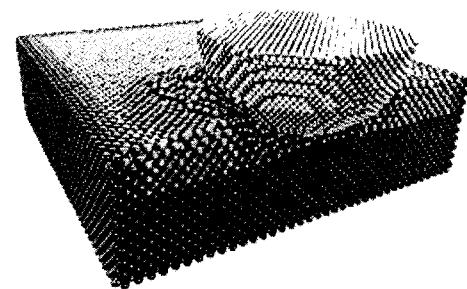
AFM 탐침을 이용한 나노 리소그래피 공정에 대한 분자동역학 해석을 수행하여 공구의 진행 거리에 따른 공구 근방-선단, 밀과 좌우-의 원자들의 거동, 칩 형성기구, 주분력(force, 수평 방향의 힘), 배분력(trust force, 수직방향의 힘) 과 폭 방향력(width-direction force)의 변화 및 소성 영역에서의 전위거동 등을 고찰하였다.

나노 리소그래피 공정에서 반구형 공구 근방의 원자들의 거동을 파악하기 위하여 대표적인 경우로 Fig. 4 (a)-(d)에 가공깊이 1.08nm, (001) 결정면과 가공방향 [100]의 경우에 7ps 의 간격으로 공구가 진행하여 가공이 이루어지는 과정을 나타내었다. 그림으로부터 모재를 가공함과 동시에 공구의 선단에 원자층이 축적되고(pile-up), 공구가 진행하면서 선단에 축적된 원자들이 공구의 측면으로 이동하여 모재 표면에 쌓아 올려지고 있음을 알 수 있다.

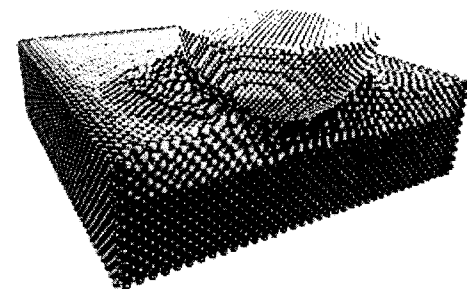
이 (001) 결정면의 [100] 방향가공의 해석으로부터 계산된 주분력, 배분력을 Fig. 5 에 나타내었다. 또한 비교를 위해 (110) 결정면의 [-110] 방향가공의 해석결과를 Fig. 6 에 나타내었다. Fig. 5 와 Fig. 6 으로부터 공구가 재료에 접하여 가공이 시작되는 초기단계에서는 공구에 작용하는 주분력과



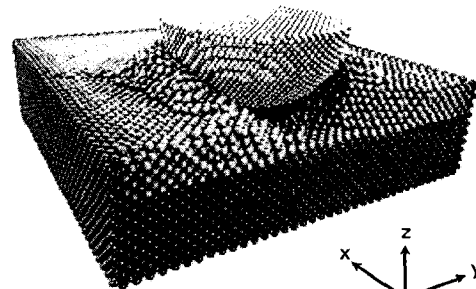
(a) 14ps: 2.8nm



(b) 21ps: 4.2nm



(c) 28ps: 5.6nm



(d) 35ps: 7.0nm

**Fig. 4** Behavior of nano-lithography process (result of (001)[100] simulation)

배분력이 거의 선형적으로 증가하는 것을 알 수 있다. 그러나 공구의 이동 거리가 약 3nm 를 지나서는 공구에 작용하는 힘이 거의 일정한 값에

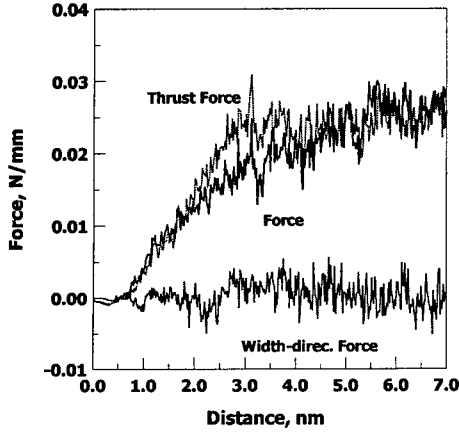


Fig. 5 Force-forming distance curve obtained in (001)[100] simulation

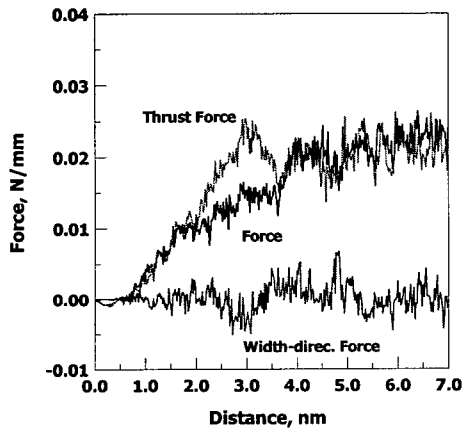


Fig. 6 Force-forming distance curve obtained in (110)[-110] simulation

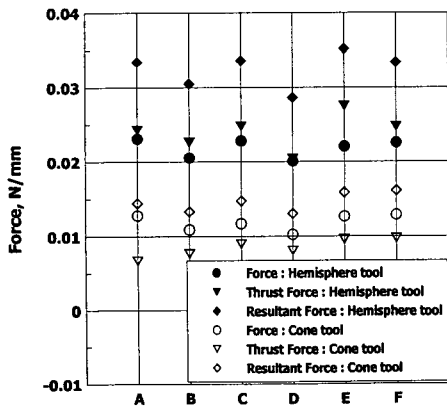


Fig. 7 Variation of force, thrust force and resultant force in MD simulations

수렴하고 있을 알 수 있다. 또한 공구에 작용하는 힘에 심한 진동을 보이고 있는데 이는 가공이 진행됨에 따라 원자들이 공구에 근접하고 또한 공구에서 떨어져 나감에 따라 상호 포텐셜과 힘이 작용하는 원자들의 수가 시시각각 변화하기 때문이다.

Table 3에 반구형 공구와 원추형 공구에 대해서 각각의 결정방위와 가공방향에 따른 해석 결과를 요약하였다. Table 3에 표시한 각 방향의 힘은 공구가 7 nm 까지 이동하였을 때의 평균값을 의미한다. 해석 결과, 주분력과 배분력의 합력으로 평가한 가공력(resultant force)은 Fig. 7에 나타난 것처럼 (111) 결정면의 [-211] 방향가공에서 가장 높은 값을, (110) 결정면의 [-110] 방향가공에서 가장 낮은 값을 갖는다. 또한 결정면의 방향과 관계없이 [-110] 가공방향에서 가장 낮은 가공력을 갖는다는 것을 알 수 있다. 이는 FCC 결정구조인 구리 재료의 슬립방향이 <-110>이고 이 방향에서 슬립 소성변형이 쉽게 일어나기 때문으로 생각된다.

Fig. 8은 (a) (001) 결정면의 [100] 가공방향, (b) (001) 결정면의 [-110] 가공방향 과 (c) (110) 결정면의 [001] 방향가공에 대한 해석 결과로 공구가 7nm 진행한 위치에서 원자들의 변형된 형상과 x-z 단면에서 전위의 거동을 나타낸 것이다. 그림 (a)로부터 (001) 결정면의 [100] 방향가공의 경우는 공구의 밑 부분에서 45° 방향으로 전위가 전파되는 슬립면이 형성되고, 그림 (b)의 같은 결정면에서 [-110] 방향으로 가공한 경우는 모체가 가공방향에 대하여 수평으로 변형되고 전위는 45° 보다 작은 각도로 발생하여 전파됨을 알 수 있다. 또한 그림 (c)의 (110) 결정면의 [001] 방향가공에서는 전위가 가공방향에 대하여 45° 보다 큰 각도로 전파하고 있음을 알 수 있다. 한편 (001) 결정면의 [-110] 방향가공의 경우에 공구 선단에 많은 원자들이 집적되면서 소성변형 영역이 공구 선단의 넓은 영역까지 확장되지만 (001) 결정면의 [100] 방향가공에서는 공구 선단 밑 근처에만 소성변형 영역이 집중되고 있는 것을 알 수 있다.

이러한 결정면과 가공방향에 따른 전위의 생성과 슬립면의 변화는 슬립계의 슬립방향과 가공방향 사이의 각도 차이에 기인하는 것으로 해석할 수 있다.

예를 들어, (001) 결정면의 [100] 방향가공인 경우에 가공방향 [100]과 FCC 재료의 슬립방향족 <-110> 사이의 각도는 45° 이므로 가공방향에 대해 45° 방향으로 슬립면이 형성된다고 해석할 수 있다.

한편 Table 3 에서와 같이 반구형 공구를 이용한 가공의 경우는 원추형 공구를 이용한 경우보다 동일한 깊이로 모재를 가공할 때 더 큰 가공력이 요구된다. 반구형 공구에 의한 가공에서 주분력은

배분력보다 낮은 값을 갖는데, 이는 반구형 공구의 기하학적인 형상으로 예측할 수 있듯이 공구가 진행에 따라 공구 선단에 축적된 원자들보다 공구의 양쪽 옆에 쌓아 올려지는 원자들이 많아져 이들 원자들이 공구에 더 많은 힘을 작용시키기 때문이다. 따라서 원추형 공구의 경우는 가공력이 배분력의 크기에 따라 크게 좌우된다고 볼 수 있다. 또한 반구형 공구의 경우는 주분력과 배분력의 합력으로 나타내지는 가공력의 방향은 모재 원자들을 압축하는 방향으로 작용한다는 것을 알 수 있다. 반면 원추형 공구의 경우는 대부분 주분력이 배분력보다 높은 값을 가지므로 주분력이 가공력의 크기와 가공력의 방향을 좌우한다. 이 결과는 원추형 공구가 반구형 공구의 가공에 비해 모재에 대한 공구의 압축력의 크기가 작다는 것을 의미한다. 따라서 원추형 공구를 이용한 경우가 반구형의 공구를 이용한 경우보다 가공력이 작아진다. 또한 두 경우의 x-z 단면을 비교하면 반구형 공구의 경우가 원추형 공구의 가공보다 소성 영역의 범위가 더 넓고, 더 많은 양의 전위가 발생하

Table 3 Results of MD simulations

Orientation direction	No.	Tool Shape	Force N/mm ( $\times 10^2$ )	Resultant Force	
				Thrust Force N/mm ( $\times 10^2$ )	Force N/mm ( $\times 10^2$ )
A (001)[100]	1	Sphere	2.305	2.427	3.347
	2	Cone	1.276	0.670	1.441
B (001)[-110]	3	Sphere	2.052	2.258	3.051
	4	Cone	1.088	0.767	1.331
C (110)[001]	5	Sphere	2.278	2.476	3.364
	6	Cone	1.167	0.897	1.472
D (110)[-110]	7	Sphere	2.004	2.040	2.860
	8	Cone	1.022	0.806	1.301
E (111)[-211]	9	Sphere	2.202	2.749	3.522
	10	Cone	1.263	0.959	1.586
F (111)[-110]	11	Sphere	2.252	2.468	3.341
	12	Cone	1.285	0.971	1.611

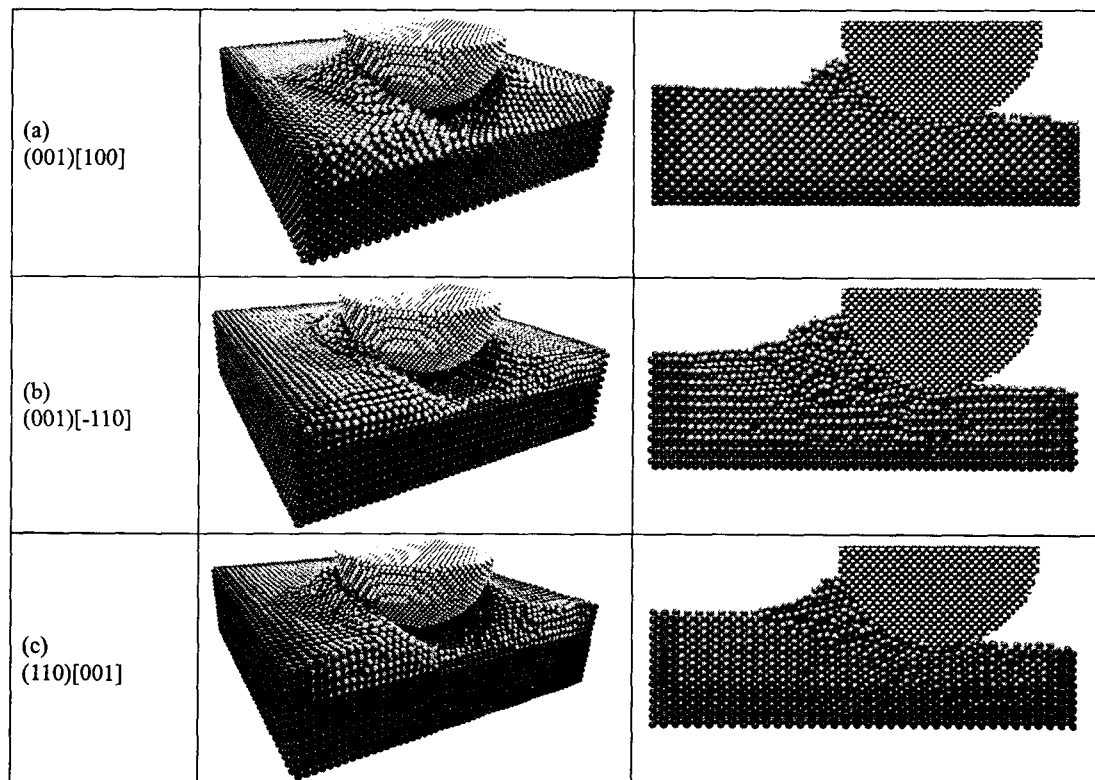


Fig. 8 Results of MD simulation with x-z cross section views of (a) (100)[001], (b) (100)[-110], and (c) (110)[001] simulations

고 있으며 가공된 면의 표면 거칠기가 보다 매끈한 것을 알 수 있다 (Fig. 9).

Fig. 10 은 (001) 결정면의 [-100] 방향가공에서 가공깊이를 각각 모재 원자의 3 층, 5 층, 7 층으로 변화시킨 결과이다. 거시적 절삭공정<sup>(21)</sup>에서와 같이 가공깊이가 깊어질수록 가공력이 거의 선형적으로 증가하며, 세 가지 경우 모두 가공깊이의 증가에 따른 가공력이 증가하는 경향이 일치하는 것으로 보아, 가공깊이는 주분력과 배분력의 비에 영향을 미치지 않는다는 것을 알 수 있다. 즉, 가공깊이를 달리 하더라도 가공력의 크기만 달라질 뿐, 가공력의 방향은 일정하게 유지된다고 해석할 수 있다.

이상에서와 같이 AFM 탐침을 이용한 나노 리소그래피 공정에 대한 3 차원 분자동역학 해석결과로 얻어지는 가공력과 모재의 나노오더 변형거동은 초 미세 초 정밀 MEMS 부품의 제조를 위한 공정의 설계 뿐 아니라 가공할 AFM 탐침의 형상 그리고 탐침을 지지하고 있는 캔틸레버 보의 설계 (강성 및 형상)에 유용한 자료로 활용될 수 있다.

본 연구에서 대상으로 한 3 차원 나노 리소그래피 공정에서의 공구 부근의 3 차원적인 전위 루프 (dislocation loop)의 거동의 고찰에 대해서는 차후의 연구과제로 남겨둔다.

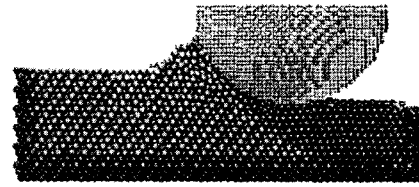
### 5. 결론

분자동역학을 이용하여 나노 리소그래피 공정을 해석하여 다음과 같이 결정면과 가공방향에 의한 영향, 공구의 형상 및 가공깊이 등이 기공특성- 전위생성, 가공력, 소성변형영역- 등에 미치는 영향을 파악하였다.

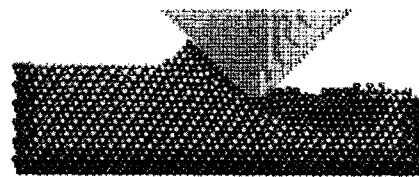
(1) 구리 단결정 재료에 대한 나노 리소그래피 가공 시 재료의 내부에 생성되는 전위와 슬립면의 방향 및 주분력과 배분력 등의 가공력은 결정면과 가공방향에 따라 변화한다. 가공력의 크기는 (111) 결정면의 [-211] 방향가공의 경우에 최대값을 가지며, (110) 결정면의 [-110] 방향가공의 경우에 최소값을 갖는다.

(2) 반구형 공구에 의한 가공의 경우는 동일한 가공깊이와 가공방향의 경우에 원추형 공구보다 더 큰 가공력을 나타낸다. 이는 반구형상의 공구의 경우에 소성영역의 범위가 반구형 공구의 경우보다 넓으며 많은 양의 전위가 공구 주위에 발생하기 때문이다.

(3) 거시적인 절삭공정과 마찬가지로 나노 리소그래피 공정에서도 가공깊이가 증가할수록 가공력은 증가한다. 그러나 주분력과 배분력이 가공깊이



(a) (111)[-211]: hemisphere tool



(b) (111)[-211]: cone tool

Fig. 9 x-z cross section view of (111)[-211] forming simulation with different tool shapes with (a) hemisphere tool and (b) cone tool

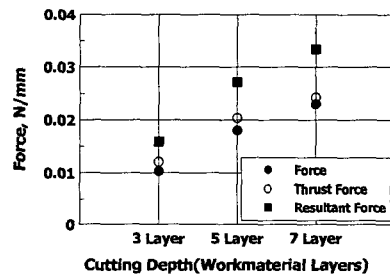


Fig. 10 Variation of forming force, thrust force and resultant force with different forming depth

에 따라 비례적으로 증가함에 따라 두 성분의 합력인 가공력의 방향은 거의 변하지 않는다.

### 후기

이 논문은 과학기술부 2002 나노핵심기반기술개발사업(M10214000237-02B1500-03810)과 산업자원부와 생산기술연구원의 연구비 지원에 의하여 수행되었으며, 이에 관계자 여러분들께 감사 드립니다.

### 참고문헌

(1) Senturia, S.D., 2000, "Microsystem design," Kluwer Academic Publishers, Boston.

- (2) Wiesendanger, R, 1994, "Scanning Probe Microscopy And Spectroscopy," Cambridge Press, Cambridge
- (3) Belak, J., 1990, "A Molecular Dynamics Model of The Orthogonal Cutting Process," *Proc. Am. Soc. Precis. Eng.*, pp. 76~82.
- (4) Fang, T., Weng C. and Chang J., 2002, "Molecular Dynamics Simulation of Nano-Lithography Process Using Atomic Force Microscopy," *Surface Sci.*, Vol. 501, pp. 138~147.
- (5) Ahn, J. and Kim, Y., 2002, "A Study of Nano-Lithography Process Using 3-D Molecular Dynamics Simulation," *Proc. Korean Soc. Tech. Plasticity*, 2002 Fall, Moojoo, Korea .
- (6) Allen, M.P. and Tildesley, D.J., 1987, "Computer Simulation in Liquids," Oxford Press, Oxford.
- (7) Haile, J.M., 1997, "Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods," John Wiley & Sons, Inc. New York.
- (8) Kim, Y., 1999, "Molecular Dynamics Studies for The Generation and the Movement Of Dislocation," *Metals and Materials*, Vol. 5, No. 4, pp. 329~337.
- (9) Kim, Y., 2000, "Microscopic Study for the Behavior of Grain Boundary Using Molecular Dynamics," *Metals and Materials*, Vol. 6, No. 2, pp. 81~87.
- (10) Kim, Y., 1998, "Molecular Dynamics and Its Application to Materials Science (I)," *Trans. Korean Inst. Metal. Mater.*, Vol. 11, No. 6, pp. 671~678
- (11) Kim, Y., 2000, "Molecular Dynamics and Its Application to Materials Science (II)," *Trans. Korean Inst. Metal. Mater.*, Vol. 13, No. 7, pp. 58~70.
- (12) Li, J., Van Vliet, K. J., Zhu, T., Yip, S. and Suresh, S., 2002, "Atomistic Mechanisms Governing Elastic Limit and Incipient Plasticity in Crystals," *Nature*, Vol. 418, pp. 307~310.
- (13) Maekawa, K. and Itoh, A., 1995, "Friction and Tool War in Nano-Scale Machining-Molecular Dynamics Approach," *Wear.*, Vol. 188, pp. 115~122.
- (14) Zhang, L., 1997, "Towards a Deeper Understanding of Wear and Friction on the Atomic Scale-A Molecular Dynamics Analysis," *Wear*, Vol. 211, pp. 44~52.
- (15) Paskin, A., Gohar, A. and Dienes, G.J., 1980, "Computer Simulation of Crack Propagation," *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 44, No. 14, pp. 940~943.
- (16) Kim, J. and Moon, C., 1996, "A Study on Micro Cutting for the Configuration of Tools Using Molecular Dynamics," *J. Mater. Pro. Tech.*, Vol. 59, pp. 309~314.
- (17) Isono, Y. and Tanaka, T., 1997, "Three-Dimensional Molecular Dynamics Simulation of the Atomic-Scale Cutting Process Using a Pin Tool," *J. Japan Soc. Mech. Eng.*, Vol. 63, No. 612, pp. 1814~1821.
- (18) Komanduri, R., Chandrasekaran, N. and Raff, L. M., 2000, "M.D. Simulation of Nanometric Cutting of Single Crystal Aluminum-Effect of Crystal Orientation and Direction of Cutting," *Wear*, Vol. 242, pp. 60~88.
- (19) Kim, Y. and Ahn J., 2002, "Molecular Dynamics Simulation for 3-D Nanometric Cutting," *Proc. USNCTAM 14<sup>th</sup>, Virginia Tech*, Virginia, USA.
- (20) Daw, M. and Baskes, M., 1984, "Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals," *Phys. Rev. B*, Vol. 29, No. 12, pp. 6443~6453.
- (21) Boothroyd, G. and Kight, W.A., 1989, "Fundamentals of Machining and Machine Tools," Marcel Dekker, New York.