

분자동역학법을 사용한 실리콘이 첨가된 ta-C의 원자구조변화

김경수*,**, 이승협*,***, 이승철*, 이광렬*, 차필령**, 정용재***

*한국과학기술연구원 미래기술연구본부, **국민대학교 신소재학과

*** 한양대학교 세라믹공학과

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. 최근 ta-C박막에 소량의 실리콘이 첨가되면 ta-C박막의 경도는 유지하면서 잔류응력을 50%이상 감소시키는 효과가 나타난다고 보고되었다.[1] 본 연구는 분자동역학 전산모사를 수행하여 실리콘의 첨가가 ta-C박막의 응력의 감소에 미치는 영향을 원자구조 측면에서 분석하였다. 비정질물질의 원자구조를 분석하기 위해 radial distribution(RDF)과 partial radial distribution(PRDF), neighbor list 및 neighbor사이의 angle distribution등과 같은 분석 방법을 사용하였다. 원자구조 분석결과 실리콘이 존재하지 않은 경우 잔류응력에 가장 큰 영향을 미치는 인자는 준안정상에 해당하는 1.925 Å 거리에 있는 원자들이 가장 큰 것을 알 수 있었으며 실리콘이 첨가되면 높은 잔류응력을 유발하는 준안정상 peak가 현저히 감소하는 것을 알 수 있었다. 또한 원자간의 거리와 각도에 대한 분석을 통해 Si이 0.5 at.% 첨가됨에 따라 neighbor 4개인 그룹의 비율이 감소하였고, neighbor 3개인 그룹의 비율이 증가하였음을 알 수 있었다.

[참고문헌]

1. C.S. Lee, K.-R. Lee, K. Y. Eun, K.H, Yoon, J. H. Han, "Structure and properties of Si incorporated tetrahedral amorphous carbon films prepared by hybrid filtered filtered vacuum arc process", *Diam. Rel. Mater.* 11, 1441 (2002).