

## 금속이혼입된 DLC 박막의 응력 감소 거동 : 제일원리계산

최정혜, 안효신, 이승철, 이광렬

한국과학기술연구원 미래기술연구본부

DLC(diamond-like carbon) 박막은 각종 하드코팅, 생체재료의 표면코팅재 등으로 각광을 받고 있으나 이 재료의 큰 잔류 압축응력은 응용을 가로막는 걸림돌로 작용되고 있다. DLC 박막의 잔류 압축응력을 감소시키는 방법으로 금속의 혼입이 가장 널리 사용되고 있으나, 응력감소의 기구는 완전히 이해되고 있지 못하다.

본 연구에서는 DLC 박막에 금속이 혼입되어 나타나는 응력 감소 효과를 계의 총 에너지와 전자밀도분포의 관점에서 고찰하고자 DMol<sup>3</sup>를 이용한 제일원리계산을 수행하였다. 4개의 탄소 원자로 사면체를 구성하고, 그 중심에 탄소 또는 금속 원자를 넣었으며, 탄소의 dangling bond에 수소원자를 결합시킨 사면체 결합 모델을 사용하였다. 혼입된 금속은 Ti, Mo, Cr, W 등의 전이금속과 Ag, Au 등의 귀금속, 그리고 Al, Si 등이다. 탄소가 사면체의 중심에 있는 경우에는 결합각이 사면체의 평형 결합각으로부터 벗어남에 따라 계의 총 에너지가 급격하게 증가하였다. 반면 중심의 탄소가 다른 금속으로 치환된 경우에는 에너지 증가가 현격하게 둔화되었다. 이를 전자밀도분포의 관점에서 고찰한 결과, 금속과 탄소의 결합이 탄소간의 결합에 비해 결합의 방향성이 낮으며, 이에 따라 비정질 내에서 결합각이 평형 결합각으로부터 벗어나더라도 에너지 증가가 작음을 알 수 있었다.