

# 분자동역학 전산모사를 이용한 탄소박막의 구조해석

글 • 이 승 협 / KIST 미래기술연구본부, 박사과정  
이 승 철 / KIST 미래기술연구본부, 연구원  
이 광 철 / KIST 미래기술연구본부, 책임연구원  
e-mail • krlee@kist.re.kr

이 글에서는 MD 전산모사를 통해 합성거품의 원자규모 해석, 계면에서의 원자혼합 거동, 박막 구조의 원자규모 분석 및 박막 물성과의 관계규명이 가능함을 소개하고, 또한, 탄소에 관한 Tersoff 포텐셜 함수의 한계로부터 포텐셜 함수의 개선이 필요함을 보여준다.

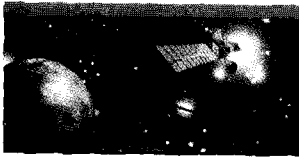
이 글에서는 MD(Molecular Dynamics, 분자동역학) 전산모사를 통해 합성거품의 원자규모 해석, 계면에서의 원자혼합 거동, 박막 구조의 원자규모 분석 및 박막 물성과의 관계규명이 가능함을 소개하고, 또한, 탄소에 관한 Tersoff 포텐셜 함수의 한계로부터 포텐셜 함수의 개선이 필요함을 보여준다.

MD 전산모사 방법에 의한 비정질 경질 탄소 박막 합성거동 연구의 구체적인 예를 통해 MD 전산모사 기법이 재료분야의 연구에서 어떻게 활용될 수 있는가를 살펴본다. MD 전산모사 기법은 시스템이 비평형 상태에서부터 평형상태에 도달해 가는 과정을 직접 추적함으로써 반응역학의 연구에 광범위하게 활용될 수 있으며, 실험적으로 달성할 수 없는 수준의 분석을 가능케 해 준다. 이 글에서는 MD 전산모사를 통해 합성거품의 원자규모 해석, 계면에서의 원자혼합 거동, 박막 구조의 원자규모 분석 및 박막 물성과의 관계규명이 가능함을 소개하고, 또한, 탄소에 관한 Tersoff 포텐셜 함수의 한계로부터 포텐셜 함수의 개선이 필요함을 보여준다.

MD 전산모사는 원자 혹은 분자간의 인력을 표현하는 포텐셜 함수를 사용하여 고전적인 운동방정식으로부터 시스템을 구성하

는 모든 원자들의 거동을 시간에 따라 추적해 가는 모사방법이다. 이 방법은 결정론적인 접근을 사용한다는 점에서 통계적인 접근을 시도하는 몬테카를로(MC : Monte Carlo) 전산모사와 구별된다<sup>(1)</sup>. MD 전산모사는 재료에서 일어나는 현상을 직접적으로 모사하기 때문에 결과의 해석이 용이하고 명료하다는 장점을 가지고 있다. 특히, 시스템이 비평형 상태에서부터 평형상태에 도달해 가는 과정을 직접적으로 추적함으로써 반응역학(reaction kinetics)의 연구에 광범위하게 활용될 수 있다. MD 전산모사는 실험적으로는 거의 불가능한 원자규모에서의 미세구조 발달을 보여줄 뿐 아니라 더 나아가 예측할 수도 있다는데 큰 의미가 있다. 그러나 시스템을 구성하는 모든 원자의 거동을 계산하여야 하므로 실제적으로 계산 가능한 시스템의 크기(원자/분자 수)와 현상을 관찰하는 시간에 한계를 가지고 있다. 또한, 원자 간의 상호인력 포텐셜 함수의 정확성에 결과가 크게 의존하기 때문에 주의가 필요하다.

최근 나노 형상 혹은 나노 구조 재료의 연구가 활발해지면서 MD 전산모사를 이용한 연구의 중요성이 강조되고 있는데, 이는 첫째로 나노 재료에서는 구성원자의 대부분이 표면 혹은 계면에 존재한다는 특성으로 인



해 기존의 이론적 연구나 실험적 연구에 많은 제약이 있기 때문이다. 또한, 원자간 거리에 비해 훨씬 큰 시스템에서의 역학이론에 적용되던 연속체가정(continuum media hypothesis)의 적용 한계에 접근하고 있으며, 통계역학에 기초한 열역학적 해석, 밴드이론에 근거한 전자구조 해석에도 한계가 나타나게 되었다. 따라서, 나노과학에서는 원자 혹은 분자의 거동을 직접적으로 추적하고 이해하는 것이 필요해졌다. MD 전산모사의 역사와 구체적인 구현 방법, 그리고 응용분야에 관한 매우 유용한 해설이 기계저널의 다른 글에 실려 있으므로 참고하기 바란다<sup>(2)</sup>. 이 글에서는 분자동역학을 활용한 재료연구의 예로서 비정질 경질 탄소 필름의 구조발달에 관한 구체적인 MD 전산모사 연구결과<sup>(3)</sup>를 통해 MD 전산모사의 의미와 그 한계를 살펴보고자 한다.

비정질 경질 탄소 필름은 높은 경도와 우수한 광학특성 그리고 뛰어난 내마모 윤활 특성 및 화학적 안정성 등 독특한 물리화학적 물성을 가진 소재이다. 특히, 저온에서 합성이 가능하며, 표면 평활도가 우수하다는 장점으로 인해 절삭가공 공구로부터 디젤엔진 부품, 금형 및 다이, 초정밀 광학부품 및 정보저장 부품에 이르기까지 매우 광범위한 영역에서 소재의 표면물성 향상을 위해 적용되고 있다<sup>(4)</sup>. 그러나 이 필름이 가지고 있는 높은 압축 잔류응력은 필름의 접착력을 저하시키는 주요인이 된다. 따라서 필름의 원자구조 제어를 통해 잔류응력과 물성을 조절하고 기판과 필름간의 계면을 제어하여 접착력을 증진시킴으로써 필름의

안정성을 증진시키는 것이 매우 중요한 연구 분야이다.

일반적으로 박막재료의 원자결합구조와 물성의 관계를 이해하는 것은 박막 공정의 최적화와 응용기술의 개발을 위한 기초가 된다. 특히, 탄소는 실리콘과 달리  $sp^1$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$  hybridization이 모두 가능하기 때문에, 필름 내의 화학결합 형태를 확인하는 것이 물성의 변화를 이해하는데 반드시 필요하다. 그러나 비정질 탄소 필름의 원자결합 구조를 정량적으로 평가할 수 있는 실험적 방법은 매우 제한적이며, 수 nm 미만의 얇은 박막에서는 실험적 분석이 거의 불가능한 실정이다. 또한, 비정질 경질탄소 필름의 합성에서는 필름의 성장표면에서 높은 에너지의 이온충돌이 계속 일어나는데, 이 에너지가 필름의 물성을 결정하는 가장 중요한 변수라는 것이 잘 알려져 있다. 성장표면에 충돌한 이온의 운동 에너지가 필름의 성장원자들에 전달되면서 국부적인 가열과 급랭, 이온의 주입 등 다양한 형태의 반응이 일어나는데, 이는 단순한 화학적 안정상을 형성하는 조건과 크게 다르다<sup>(5-12)</sup>. 또한, 대부분의 박막합성 조건에서는 기판/필름의 계면에서 비평형상이 형성되는데, 이러한 반응상은 필름의 접착력과 필름의 성장 초기 물성, 즉 극미세 박막의 물성에 영향을 미칠 것으로 생각된다. 그러나 현재로서는 이러한 국부적인 반응을 분석하고 평가하는 실험적 이론적 기반이 충분치 않다.

이와 같이 극미세 박막의 구조 분석, 비평형 반응기구 그리고 계면에서의 원자규모 반응을 연구하는데 MD 전산모사가 유용하

게 활용될 수 있다. 본 고에서는 수소를 전혀 함유하지 않은 경질 탄소 필름의 합성을 분자동역학 기법을 이용하여 원자 수준에서 모사하고, 합성된 필름의 구조와 물성을 조사한 예를 통해 MD 전산모사의 의미를 살펴보고자 한다. 합성에 참여하는 탄소원자의 에너지에 따른 탄소박막의 구조변화를 조사하였는데, 이러한 전산모사 결과는 진공여과 아크 증착법에 의한 아모픽 다이아몬드 필름의 합성조건과 유사하므로 실험결과와 직접 비교할 수 있었다.

결정론적인 고전역학을 이용한 분자 동역학 모사에서 모사 결과의 신뢰성은 원자 간의 반응을 표현하는 포텐셜 함수에 크게 의존한다. 본 연구에서는 탄소 원자의 포텐셜 함수로서 Tersoff가 제안한 세입자 포텐셜을 사용하였다<sup>(13)</sup>. 이 포텐셜 함수는 실리콘, 탄소 등 공유결합 특성을 갖는 재료의 결합순서를 고려하여 개발된 것이다<sup>(14)</sup>. 이런 경험적인 포텐셜을 사용할 때에는 본격적인 전산모사에 들어가기 전에 이 포텐셜들이 목표로 하는 전산모사에 적합한지를 시험하게 되는데, 여기서는 다이아몬드의 격자상수, 탄성계수 그리고 결합에너지를 계산하여 실험치와 비교하게 된다. Tersoff 포텐셜 함수는 다이아몬드 구조의 결정구조, 격자상수, 결정면에 따른 표면에너지의 이방성 그리고 다른 구조에서의 결합에너지와 결합거리를 잘 표현해 주고 있었다. 따라서, 이 포텐셜 함수는 비평형상인 필름 형성의 전산모사에도 적절한 것으로 판단할 수 있다.

608개의 탄소원자를 이용하여 4.75 4 4 격자의 다이아몬드 단결정 판(slab)을 형성

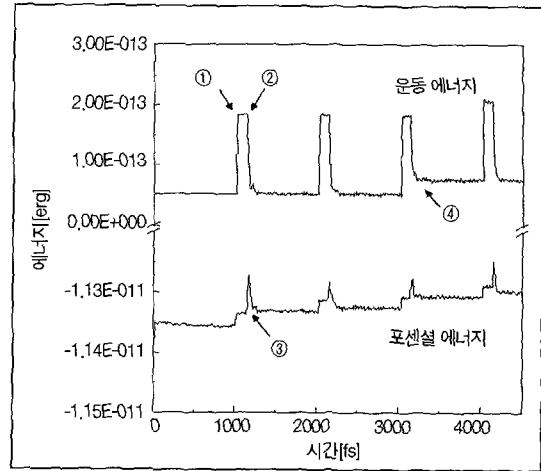
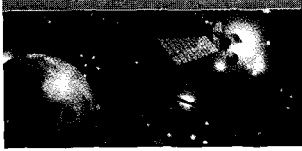


그림 1 50eV의 고속 탄소 입자가 다이아몬드 기판에 반부 충돌하는 과정에서 관찰되는 시스템의 운동에너지와 위치 에너지의 시간에 따른 변화

하여 기판으로 사용하였으며, 고속의 중성 탄소 원자를 다이아몬드의 (100) 면에 수직으로 충돌시켰다. 입사 탄소원자는 기판표면으로부터 5.35nm 떨어진 거리의 임의의 위치에서 형성시켜 일정한 운동에너지를 가지고 기판에 수직으로 입사되도록 하였다. 탄소원자는 1ps 당 한 개씩을 생성하여 증착시켰다. 합성에 사용된 탄소원자의 수는 500개였으며, 입사에너지를 1에서 300eV까지 변화시키면서 생성된 필름의 물성을 평가하였다. 분자동역학 계산의 시간간격 (time step)으로는 입사탄소원자의 운동에너지가 증가함에 따라 0.5fs에서 0.155fs까지 단조 감소시켰다. 모든 반응은 상온에서 일어나도록 입사직적 기판의 온도를 300K로 유지하였다.

그림 1은 50 eV의 탄소원자가 충돌할 때 시스템의 에너지 변화를 측정한 그래프이다. 초기 1ps는 기판의 안정화를 위한 시간



으로 일정한 운동에너지와 위치에너지를 가지고 있지만, 높은 에너지의 탄소이온이 형성되면서(화살표 1) 시스템의 운동 에너지는 고속입자의 운동에너지만큼 증가하며 위치에너지 역시 생성된 탄소원자 때문에 약간 증가한다. 고속입자의 충돌 직전까지 에너지는 일정한 값을 유지하지만, 충돌이 일어나면(화살표 2) 입사된 탄소원자의 운동 에너지는 소멸되지만, 기관원자의 진동이 유발되기 때문에 전체 시스템의 운동에너지 감소는 비교적 완만하게 진행된다. 한편, 충돌 순간 위치 에너지는 펄스(pulse) 형태로 증가했다가 감소하는 거동을 보이고 있는데(화살표 3) 이는 입사된 탄소원자의 충돌에 의해 기관의 원자들이 평형위치로부

터 순간적으로 크게 벗어남을 보여주고 있다. 이러한 펄스 형태의 위치에너지 증가는 입사 에너지가 50eV 이상인 경우에만 관찰된다.

그림 1의 에너지 변화 거동으로부터 충돌에 의한 기관원자의 섭동(perturbation)은 충돌 후 최대 300fs 내에 안정화되는 것을 알 수 있다. 이러한 거동은 입사 탄소의 에너지가 300eV인 경우에도 동일하게 관찰되었다. 따라서, 1ps마다 한 개 썩의 탄소원자를 입사함으로써 지나친 기관의 가열을 유발하지 않는 정상상태(steady state)에서의 반응을 모사할 수 있다. 한편, 시스템의 위치에너지는 고속원자의 충돌이 반복됨에 따라 평형위치에서 벗어나는 원자가 증가하므로 그 값이 증가하다가 일정한 값으로 수렴한다. 이와 같이 MD 전산 모사에서는 시간에 따른 시스템의 운동에너지와 위치에너지를 손쉽게 측정할 수 있으며, 개개의 원자별로도 분석할 수 있다. 이러한 장점은 반응이 일어나는 시점을 평가하고, 반응 후 시스템의 총괄적인 변화를 추적하는데 매우 유용하게 활용되고 있다.

그림 2는 입사에너지 별로 각각 500개의 탄소원자를 증착한 후의 필름 형상을 보여주는 그림들이다. 그림의 점선은 기관의 표면위치를 표시하며, 노란색 원자는 입사된 탄소를 흰색 원자는 기관의 탄소원자를 나타내고 있다. 그림에서 보는 바와 같이 본 실험에서 사용된 에너지 영역에서 필름은 모두 규칙적인 원자배열을 가지고 있지 않은 비정질 구조를 하고 있다. 1eV의 작은 입사에너지로 합성한 경우 그림 2(a)에는 합성된 탄소가 상당히 성구 구조를 가지고 있으며, 기관과의 계면 역시 입사된 탄소에

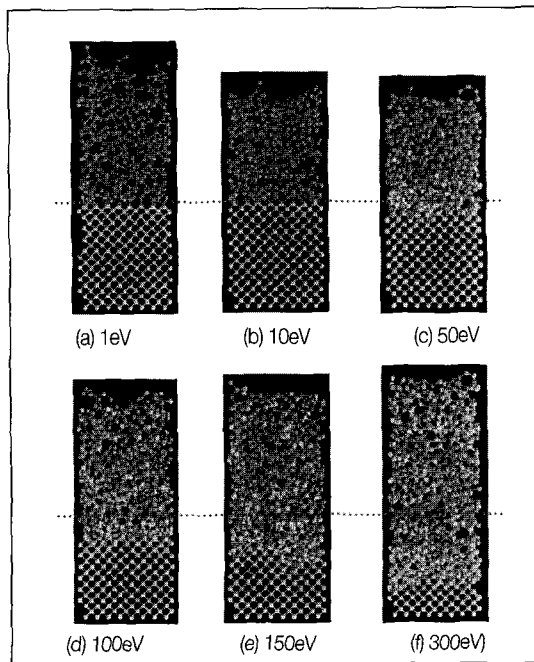
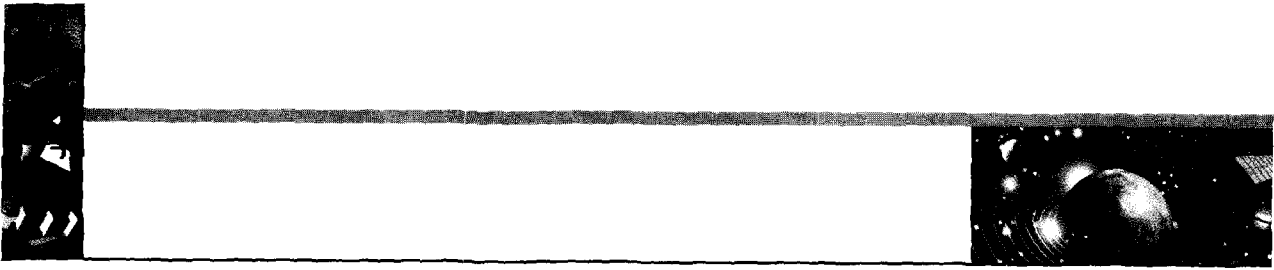


그림 2 고에너지 탄소 원자의 충돌에 의해 형성된 탄소박막의 원자구조.



의해 전혀 영향을 받지 않았다. 이러한 낮은 에너지에서도 합성된 필름은 비정질 구조를 가지고 있는데, 이는 기판의 합성온도가 낮아서 표면에서 탄소원자의 이동도가 작으므로 안정한 결정질의 흑연상을 형성하지 못하기 때문이다. 증착거동을 동영상으로 확인한 결과, 이 조건에서는 입사된 탄소 대부분이 표면에 도달하면 표면의 탄소와 결합한 채 그 자리에서 고정되었다. 입사되는 탄소의 에너지가 10eV인 경우에는 증착층이 좀더 치밀해졌지만, 기판과 박막의 계면은 1eV의 경우와 마찬가지로 원래의 기판형태를 그대로 유지하고 있었다. 그러나 입사탄소의 에너지가 50eV인 경우에는 기판 표면에서 원자혼합이 일어나기 시작하고, 상당수의 입사탄소가 기판으로 침입하면서 기판 표면을 비정질화시키는 것을 볼 수 있다. 이때, 필름의 구조는 고에너지 탄소의 층들이 반복되면서 더욱 치밀해지는 것을 관찰할 수 있었다. 100eV 이상의 높은 에너지에서는 증착 층의 표면에 많은 수의 기판 원자가 관찰될 정도로 현저한 원자혼합이 일어나고 있다. 입사되는 탄소의 에너지가 증가함에 따라 계면에서의 혼합이 증가하고, 따라서 비정질화되는 기판의 표면층 두께가 단조 증가하였다.

이 예는 MD 시뮬레이션에 의해 원자수준에서 박막과 계면의 미세구조 변화를 매우 상세히 분석할 수 있음을 보여주고 있다. 특히, 표면에서 일어나는 증착원자와 모재원자의 거동을 추적함으로써 원자규모에서 계면 혼합거동을 관찰할 수 있게 된다. 그림 2의 전산모사 결과는 높은 에너지의 원자층들을 수반하는 박막 증착 시 계면의 혼

합은 입사되는 원자의 운동량에 의해 발생하는 기판원자의 이동을 통해 일어나고 있음을 명확히 보여준다. 다이아몬드 내 탄소결합의 결합에너지는 7.3eV인데, 원자의 이동이 일어나기 위해서는 기존의 결합을 끊는데 필요한 에너지와 새로운 위치로 이동했을 때 그 위치의 원자결합을 변형시키거나 끊는데 추가의 에너지가 필요하다. 따라서 원자의 이동이 일어나기 위해서는 결합에너지 보다 상당히 큰 에너지가 필요한데, 본 전산모사에서 입사 탄소의 에너지가 10eV 이하인 경우에 계면혼합이 일어나지 않는다는 결과는 이와 잘 일치하고 있다. 실험적으로 이 현상을 규명하기 위해서는 원자규모의 해상도를 갖는 실시간 표면 구조 분석기술이 필요한데, 현재까지 특정한 경우를 제외하고는 이를 구현한 경우는 거의 없다.

그림 3에는 에너지 변화에 따른 증착층의 밀도 변화를 도시하였다. 입사 에너지가 1eV인 경우에는 필름의 밀도가 다이아몬드의 64%로 흑연과 유사한 값을 가지고 있는

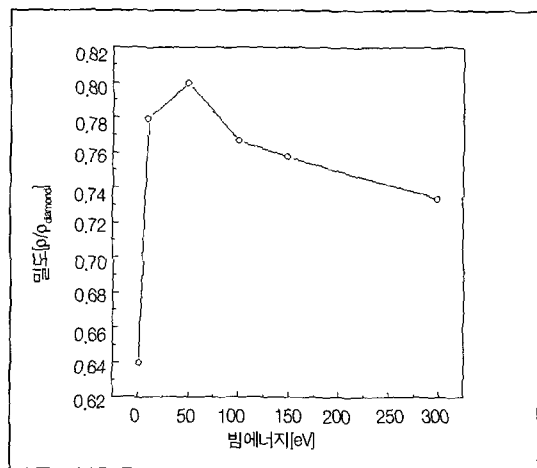
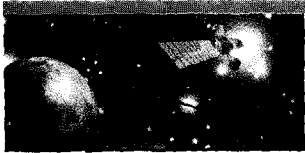


그림 3 입사 탄소의 에너지에 따른 필름의 밀도변화



데, 이 결과는 매우 작은 에너지의 탄소원자 증착에 의해 비정질이긴 하지만 흑연과 매우 유사한 필름이 합성된다는 것을 보여준다. 입사 탄소의 에너지가 증가함에 따라 밀도는 급격히 증가하여 50eV에서 다이아몬드 밀도의 80%에 이르는 최대값을 가진다. 그러나 그 이상의 에너지 구간에서는 박막의 밀도가 오히려 감소하여 300eV에서 다이아몬드의 74%에 해당되는 밀도를

가지고 있었다. 그림 4(a)와 (b)는 각각 입사 탄소 원자의 에너지에 따른 합성필름의 잔류응력과  $sp^3$  복합 결합의 양의 변화를 보여주고 있다. 박막의 잔류응력은 박막 내의 두 원자 간에 존재하는 원자결합 변위 때문에 발생하는 에너지 증가분의 합을 평균 원자부피로 나눈 값으로 표시하였다. 이렇게 계산된 잔류응력은 0K에서의 잔류응력을 의미하며, 정량적으로는 실온에서의 값보다 크게 평가된다. 따라서 본 연구에서 계산된 잔류응력은 정성적인 변화만이 의미를 갖는다고 할 수 있다. 그림 4(a)에서 보는 바와 같이 1eV의 매우 작은 에너지의 원자를 이용하여 합성한 필름은 인장 잔류응력을 가지고 있다. 그러나 에너지가 증가함에 따라 필름의 잔류응력은 압축 잔류응력으로 바뀌며, 밀도와 마찬가지로 50eV의 경우에 최대 압축잔류응력을 가진다. 필름의 밀도와 잔류응력은 필름 내의  $sp^3$  결합 분율과 밀접한 관계를 가지고 있었는데, 그림 4(b)에서 보는 바와 같이  $sp^3$  결합분율 역시 50eV에서 최대값을 가지며 에너지가 더욱 증가함에 따라 단조감소하였다.

이 결과는 필름 내의  $sp^3$  결합이 필름의 물성을 결정하는 중요한 요인임을 잘 보여주고 있다. 탄소원자의  $sp^3$  결합이 증가하면 필름 내 원자의 3차원적 상호결합이 증가하게 되어 필름의 기계적 특성이 향상된다. 그러나 비정질 탄소와 같은 공유결합의 비정질 재료에서 이러한 3차원적 상호결합의 증가는 결합각과 결합거리의 왜곡을 가져오는데 이는 곧 잔류응력의 증가로 나타난다. Ta-C 등 대부분의 다이아몬드 상 카본필름에서 잔류응력과 경도는 동일한 거동

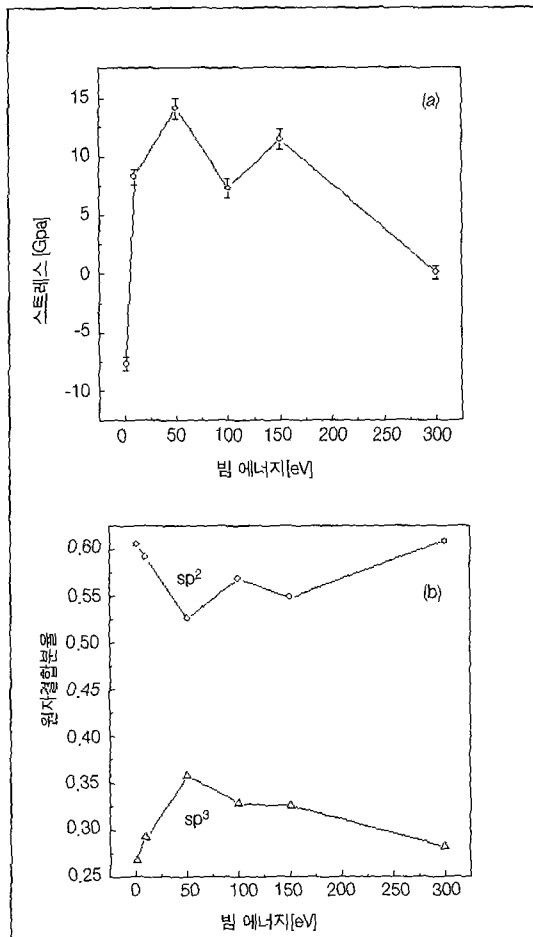
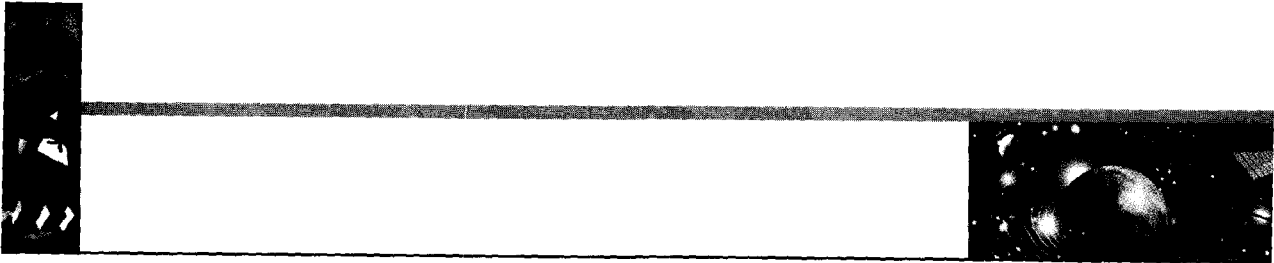


그림 4 입사 탄소의 에너지에 따른 필름의 잔류응력(a) 및 원자결합분율(b)



을 보이는데, 이는 이들 물성이 필름 내 원자의 3차원적 상호결합의 증가라는 공통적인 구조적 특성에 의존하기 때문이다. 이와 같이, MD 전산모사를 통해 필름의 구조와 물성과의 관계에 대한 원자 혹은 분자수준에서의 심도 높은 분석이 가능해진다.

Shin 등은 진공여과 아크 증착 법에서 바이어스 전압에 따른 탄소 필름의 잔류응력 변화를 평가하였다<sup>(15)</sup>. 진공여과 아크 증착 공정에서는 아크에서 발생하는 탄소원자의 99% 이상이 이온화되기 때문에, 본 전산모사와 매우 유사한 조건에서의 필름합성이라고 할 수 있다(본 연구에서는 모든 입사 원자에 동일한 운동 에너지를 부여함으로써 100% 이온화된 경우를 모사하고 있다). Shin 등은 기판에 도달하는 탄소이온의 에너지를 변화시키기 위해, 기판에 직류 바이어스(DC bias)를 인가하면서 잔류응력의 변화를 조사하였다. 기판의 바이어스 전압이 50 내지 100V일 때 잔류응력은 약 7GPa의 최대값을 가지고 있었으며, 밀도 역시 바이어스 전압에 대해 잔류응력과 동일한 거동을 보이고 있었다<sup>(15)</sup>. 이 실험결과는 그림 4의 전산모사에 의한 물성 변화와 정성적으로 잘 일치하고 있다. 이는 MD 전산모사에서 사용한 포텐셜 함수와 전산실험 조건이 실제의 실험을 잘 반영하고 있다는 의미로 해석된다.

그러나 정량적으로는 실험결과와 전산모사 사이에 무시할 수 없는 크기의 차이를 보이고 있다. 전산모사의 경우 입사 원자의 에너지가 50eV일 때 잔류응력과 밀도의 최대값이 나타나는 반면, 실험의 경우 잔류응력과 밀도가 최대값을 보이는 조건에서는

입사원자의 에너지가 약 70eV에서 150eV 구간의 값을 가질 것으로 예상된다. 이러한 차이를 이해하기 위해서는 실험의 경우 무시할 수 없는 양의 중성입자가 합성에 참여하여 평균에너지를 낮추는 역할을 하기 때문이라는 점을 고려해야 한다. 진공여과 아크 소스에서 발생하는 탄소원자는 대부분이 이온화되지만, 높은 밀도의 전자와 함께 기판으로 운송되면서 전자와의 충돌에 의해 중성입자로 변할 가능성이 있다. 또한, Shin 등은 기판에 직류 바이어스를 인가했기 때문에 양성이온의 증착에 따라 형성된 표면전하가 도달하는 이온의 에너지를 감소시켰을 가능성도 고려하여야 한다. 이와 같은 불확실성을 감안한다면, 본 결과는 실험과 매우 잘 일치한다고 말할 수 있다.

본이 글에서는 탄소 박막 합성거동을 MD 전산모사 방법으로 분석한 구체적인 예를 통해 MD 전산모사 기법이 재료분야의 연구에서 어떻게 활용될 수 있는가를 살펴보았다. MD 전산모사는 실험적으로 달성할 수 없는 수준의 분석을 가능케 하는데, 이 글에서는 합성거동의 원자규모 해석, 계면에서의 원자혼합 거동, 박막의 구조의 원자규모 분석 및 박막 물성과의 관계를 추적할 수 있음을 보여 주었다. 그러나 이 글에서 사용한 탄소의 포텐셜 함수의 한계도 관찰되었는데, 예를 들면 계산된 최대 잔류응력의 절대값은 실험적으로 관찰된 것보다 두 배 정도 큰 값이었으며, 필름의  $sp^3$  결합 비율은 최대 37%로 실험적으로 보고되고 있는 60~80%에 비해 현저히 작게 평가되었다. 이와 같은 정량적인 값의 차이는  $\pi$ 결합 간의 상호작용을 고려하지 않는 Tersoff

포텐셜의 한계로서 앞으로 이에 관한 개선이 필요함을 보여준다.

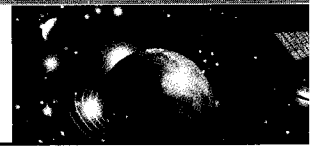
〈후기〉

본 연구는 과기부 21C 프론티어 사업의 나노소재기술개발사업단과 (주) J&L Tech의 재정 지원에 의해 수행되었습니다.

참 고 문 헌

- (1) Raabe, D., 1998, "Computational Materials Science", Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim.
- (2) 박승호, 2003, "분자동역학 시뮬레이션의 응용", 기계저널, Vol. 43, No. 3, pp. 49~57.
- (3) 이승협, 이승철, 이규환, 이광렬, (2003) "분자동역학 전산모사에 의한 비정질 탄소 필름의 합성거동 연구", 한국진공학회지, Vol. 12, pp. 25~34.
- (4) Tsai, H. and Bogy, D.B., 1987, "Characterization of Diamondlike carbon Films and Their Application as Overcoats on Thin-film Media for Magnetic Recording", J. Vac. Sci. Technol., A Vol. 5, pp. 3287~3454.
- (5) Boxman, R. L., Zhitomirsky, V., Alterkop, B., Gidalevich, E., Beilis, I., Keidar, M. and Goldsmith, S., 1996, "Recent Progress in Filtered Vacuum Arc Deposition", Surf. Coat. Technol., Vol 86/87, pp. 243~253.
- (6) Pharr, G. M., Callahan, D. L., McAdams, S. D., Tsui, T. Y., Anders, S., Anders, A., Ager III, J. W., Brown, I. G., Bhatia, C. S., Silva, S. R. P. and Robertson, J. 1996, "Hardness, Elastic Modulus, and Structure of Very Hard Carbon Films Produced by Cathodic-Arc Deposition with Substrate Pulse Biasing", Appl. Phys. Lett., Vol. 68, pp. 779~781.
- (7) Tay, B. K., Shi, X., Tan, H. S., Yangand, H. S. and Sun, Z., 1998, "Raman Studies of Tetrahedral Amorphous Carbon Films Deposited by Filtered Cathodic Vacuum Arc", Surf. Coat. Technol., Vol. 105, pp. 155~158.
- (8) Lossy, R., Pappas, D. L., Roy, R. A., Doyle, J. P., Cuomo, J. J. and Bruley, J., 1995, "Properties of Amorphous Diamond Films Prepared by a Filtered Cathodic Arc", J. Appl. Phys., Vol. 77, pp. 4750~4756.
- (9) Ager III, J. W., Anders, S., Anders A. and Brown, I. G., 1995, "Effect of Intrinsic Growth Stress on The Raman Spectra of Vacuum-Arc-Deposited Amorphous Carbon Films", Appl. Phys. Lett., Vol. 66, pp. 3444~3446.
- (10) Tsui, T. Y., Pharr, G. M., Oliver, W. C., Bhatia, C. S., White, R. L., Anders, S., Anders, A. and Brown, I. G., 1995, Nanoindentation and "Nanoscratching of Hard Carbon Coatings for Magnetic Disks", Mat. Res. Soc. Symp. Proc., Vol. 383, pp. 447~452.
- (11) Anders, S., Diaz, J., Ager III, J. W., Lo, R. Y. and Bogy, D. B., 1997, "Thermal Stability of Amorphous Hard Carbon Films Produced by Cathodic Arc Deposition", Appl. Phys. Lett., Vol. 71, pp. 3367~3369.
- (12) McKenzie, D. R., Yin, Y., Marks, N. A., Davis, C. A., Kravtchinskaia,





- E., Pailthorpe, B. A. and Amaratunga, G. A. J., 1993 "Tetrahedral Amorphous Carbon Properties and Applications", J. Non-cryst. Solids., Vol. 164/166, pp. 1101~1106.
- (13) Tersoff, J., 1988, "Empirical Interatomic Potential for Carbon, with Applications to Amorphous Carbon", Phys. Rev. Lett., Vol. 61, pp. 2879~2882.
- (14) Tersoff, J., 1988, "New Empirical Approach for The Structure and Energy of Covalent Systems", Phys. Rev. B Vol. 37, pp. 6991~7000.
- (15) Shin, J. K., Lee, C. S., Lee, K. R. and Eun, K. Y., 2001, "Effect of Residual Stress on The Raman-Spectrum Analysis of Tetrahedral Amorphous Carbon Films", Appl. Phys. Lett., Vol. 78, pp. 631~633.

**기계용어해설**

**릴리프 벨브(Relief Groove)**

펌프 내부의 실린더 또는 양 베인간의 공간은 흡입부에서 토출부로 전환하는 과정에서 갑작스런 압력 상승 및 하강을 경험하게 되며, 이로 인해 압력 오버슛(언더슛)이나 심한 압력맥동이 발생할 수 있고 이는 진동 및 소음으로 이어질 가능성이 있다. 이를 방지하기 위해 베인 펌프 또는 피스톤 펌프의 측판에 릴리프 그루브 또는 노치를 설치한다. 일반적으로 릴리프 그루브 또는 토치의 단면적 변화가 클수록 압력 변화가 급격하고, 압력 상승 시간이 줄어든다. 이러한 특징을 이용하여 릴리프 그루브 및 노치의 형상을 결정, 설계하여 압력의 급격한 변화를 완만하게 하고, 압력맥동을 저감시킬 수 있다.

**오염계수(Fouling Factor)**

열교환기 운전 중 미세한 입자나 부식생성물, 물에 부유하는 이물질 등이 열교환기의 전열 부위에 침적될 경우에는 정상적인 유체흐름을 방해하고 압력손실, 부식 발생원 등의 작용을 하며, 특히 열교환기의 고유기능인 열성능을 저하시킨다. 이러한 오염 정도를 계수로 나타낸 것을 오염계수라 한다.

**잔열제거 열교환기(Residual Heat Removal Heat Exchanger)**

원자력 발전소에서 잔열제거 열교환기는 원자로 냉각 및 핵연료 재장전 기간 동안 원자로 냉각재의 온도를 정지냉각 온도로 감소시키기 위해 원자로 냉각재계통에서 기기냉각수 계통으로 열을 전달하고 발전소가 재기동될 때까지 정지냉각 온도로 유지시키는 역할을 한다.