

## 나노 단위 금속 원자의 인장 및 접합 공정 시뮬레이션

박성재\*(한양대 대학원 정밀기계공학과), 이세현(한양대 기계공학과)

### The simulation of tensile and bonding process in nano-size

S. J. Park(Precision Mechanical Eng. Dept. HYU), S. H. Rhee(Mechanical Eng. Dept., HYU)

#### ABSTRACT

Recently, the research of the nano technology has been done on a lot of area over the world. Especially, the interest of them is much higher for semiconductor companies and other super accuracy processing area. In this thesis, we have approached the characteristic of the tensile and bonding of copper, frequently used to nano wires, by molecular dynamics simulation. And the simulation was done by EAM, Embedded Atom Method which has the most highest accuracy for metal. Then the feature of copper at atom space is understood through the simulation of nano wire.

**Key Words :** 분자동력학(Molecular Dynamics), EAM(Embedded Atom Method), 분자역학(Molecular Mechanics), 유한차이방법(Finite Difference Method)

#### 1. 서론

나노 크기 이하에서의 분자들의 움직임은 일반 벌크 크기의 움직임 특성과는 다르다. 분자동력학(Molecular Dynamics; MD) 기법은 분자사이에 작용하는 힘에 대한 이론적 모델을 응용하여, 각 분자의 시간 및 공간적 거동을 관찰하는 이론적 해석기구이다. 분자동력학 시뮬레이션은 분자규모의 상세한 미시적인 모형을 위한 방법론을 제시한다. 분자동력학 시뮬레이션의 이론적 기반은 Newton의 운동법칙과 별다름이 없다.

진정한 의미의 첫번째 분자 동력학 시뮬레이션은 1956년 Alder와 Wainwright에 의한 강체구 집합체의 동력학에 관한 것이다. 그리고 물질재료의 모형에 관한 첫 번째 분자 동력학 시뮬레이션은 1959년 Bookhaven의 Vineyard의 연구 그룹이 수행한 복사선 방사에 의한 Cu 결정의 손상에 관한 연구이다. 이후 1964년 Rahman에 의하여 실제 액체에 관하여 분자동력학 시뮬레이션이 이루어졌다. 그리고 이 원자 분자의 시뮬레이션이 시도되고 곧바로 물분자에 관한 시뮬레이션에 관한 연구가 흥미 있는 과제로 떠올랐다. 또한 탄화수소, 단백질, 작은 강체 분자들 등 화학적 원자단위 크기의 실험

이 필요한 거의 모든 분야에서 분자 동력학 시뮬레이션은 사용되고 있다.

현재 구리를 사용한 공정이 실리콘 반도체 공정에 중요하게 사용되고 있으며 향후 구리 나노도선, 나노접합(nano contact)등이 계속 사용될 것이다. 분자동력학에 대해서 이전에는 금에 관한 연구가 대부분이었고 구리에 대해서는 Mehrez와 Ciraci의 연구뿐이다. Mehrez와 Ciraci는 분자동력학 방법을 적용하여 구리 나노 도선의 항복(yielding)과 파열(rupture)을 길이 확장 속도(stretch velocity)에 따라서 연구하였다. 그러나 그들의 연구에 사용된 나노 도선은 12 또는 13개의 원자들로 구성된 5개 원자층으로 구성되어 있어서 구리 나노 도선의 파열 역학을 이해하기에 충분하지 못하였다. 또한 구리 나노 접합에 관한 시뮬레이션 연구도 수행되어지지 않았다.

따라서 본 연구에서는 지금까지 사용되었던 일반적인 분자 동력학 시뮬레이션을 사용하지 않고 금속에 있어서 비교적 잘 일치한다고 알려져 있는 Murray와 Baskes1에 의해 1983년에 발전된 EAM(Embedded Atom Method)을 이용하여 구리의 인장강도와 접합에 관하여 시뮬레이션을 통해 연구를 하려고 한다. 따라서 본 연구에서는 EAM을 이용

한 시뮬레이션 알고리즘을 구현하고 구현된 알고리즘을 통해 시뮬레이션을 실시하여 그것이 macro 단위의 실제 구리의 인장강도 측정실험, 접합 실험과 잘 일치하는지를 확인하고 또한 형태 변화도 실험시의 형태변화와 잘 일치하는지를 알아본다.

## 2. Embedded Atom Method 과 분자동역학

### 2.1 분자역학

분자 역학은 분자의 에너지를 분자의 구조에 대한 함수로 표현하는 방법이다. 분자 역학에서는 분자를 구성하는 원자들 사이의 '결합'에 대한 고전적인 이해와, 직접 결합하지 않고 있는 원자들 사이의 '반데르발스 힘 (van der Waals force)'을 사용하여 분자의 에너지를 계산해 낸다.

원자들 사이의 결합에너지는 원자내의 모든 결합에 대한 상호작용에너지와 결합각에 의한 에너지, 비틀림각에 의한 에너지, 그리고 반데르발스 상호작용에너지와 기타 에너지로 구성된다.

### 2.2 EAM(Embedded Atom Method)

앞에서 분자역학을 이용하여 원자 시스템 전체의 포텐셜 에너지를 구하는 방법을 소개했다. 하지만 일반적인 무기, 유기 화합물질과는 다르게 금속 결정구조를 갖는 물질에 대해서는 위에서 소개한 분자 역학을 이용한 전체의 포텐셜 에너지 계산 방법보다 Murray 와 Baskes1 에 의해 1983 년에 발전된 EAM(Embedded Atom Method)을 이용한 에너지 계산 방법이 더욱더 정확함이 알려져 있다.

EAM 의 기본적인 개념은 금속결합으로 이루어진 물질에는 전자가 구름처럼 존재하게 되는데 그 전자의 밀도는 원자간 거리인  $r$  에 따라 변한다. 이 전자밀도가 존재함으로써 금속결합이 이루어지게 되고 금속결합의 특징인 fcc 나 bcc, hcc 등의 각각 결합구조를 이룰 때의 에너지가 상태가 최소가 되고 이 구조가 변형이 되려고 하면 다시 그 형태로 돌아가려는 힘이 발생한다는 것이다.

Embedded-atom method 에서 전체 에너지의 계산은 다음과 같다.

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V(r_{ij}) + \sum_i F(\bar{\rho}_i) \quad (1)$$

여기서  $V(r_{ij})$  는 원자 상호 포텐셜 에너지이고 형태는 다음과 같다.

$$V(r) = E_1 \{ \exp[-2\alpha(r-r_0)] + 2\exp[-\alpha(r-r_0)] \} \quad (2)$$

$F$  는 전자밀도( $\rho_i$ )의 변화에 따른 격자형성 에너지이다. 전자 밀도( $\rho_i$ )는 원자 핵 주변에 전자들이 존재하는 확률적인 값들로서 다음과 같이 표현이 된다.,

$$\rho(r) = \{ a \exp[-\beta_1(r-r_{03})] + \exp[-\beta_2(r-r_{04})] \} \quad (3)$$

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho(r_{ij}) \quad (4)$$

여기서 전자밀도를 계산할 때 지금 수행되는 물질이 구리이므로 구리의 결정 구조인 fcc 구조에서 구해진 각 원자 당 전자밀도를 아래의 식과 같이 1로 표준화하는 작업이 필요하다.

$$\bar{\rho} = \frac{\sum_{j \neq i} \rho(r_{ij})}{\sum_{j \neq i} \rho_0(r_{ij})} \quad (5)$$

(여기서,  $\sum_{j \neq i} \rho_0(r_{ij})$ 는 fcc 격자구조 일 때의 각

원자당 전자밀도의 합)

이 작업을 수행한 후에 다음의 격자형성 에너지 식을 사용할 수 있다.,

격자 형성 에너지  $F$  는 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$F(\bar{\rho}) = F^0 + \frac{1}{2} F^2 (\bar{\rho}-1)^2 + \sum_{n=1}^4 q_n (\bar{\rho}-1)^{n+2} \quad (6)$$

위 식은  $\bar{\rho} < 1$  이고  $\bar{\rho} > 1$  는 다음과 같다.

$$F(\bar{\rho}) = \frac{F^0 + \frac{1}{2} F^2 (\bar{\rho}-1)^2 + q_1 (\bar{\rho}-1)^3 + Q(\bar{\rho}-1)^4}{1 + Q(\bar{\rho}-1)^3} \quad (7)$$

식 (7)은 금속결합의 물리적인 개념을 기초로 하여 형성된 식이다. 위의 두식에서 보면 알 수가 있듯이 격자 형성 에너지와 전자밀도, 그리고 원자간 거리는 상호 연관되어있는 것을 알 수가 있다. 결국 격자 형성 에너지도 원자거리의 함수이다.

### 2.3 분자동역학

분자동역학의 방법은 앞에서 구해지는 퍼텐셜  $V$  를 구하고 그리고 나서 분자동역학 모의실험을 위해 상호 작용하는 N 개의 원자들로 구성된 계에 관해서 고전적인 운동방정식의 해를 얻어야한다. 이 운동방정식들은 여러가지 방법으로 기술할 수 있지

만 아마도 가장 기본적인 형태는 Lagrangian 운동방정식일 것이다.

$$\frac{d}{dt}(\partial L / \partial \dot{q}_k) - (\partial L / \partial q_k) = 0 \quad (8)$$

여기서 Lagrangian 함수  $L(q, \dot{q}_k)$  는 계의 운동 에너지  $K$  와 퍼텐셜 에너지  $V$  로 정의되며 즉

$$L = K - V \quad (9)$$

일반화된 좌표  $q_k$  와 그것의 시간 도함수  $\dot{q}_k$  의 함수이다. 직교 좌표  $r_i$ , 그리고  $K$  와  $V$  의 일반적인 정의로써  $N$  개의 원자들로 구성된 계를 고려한다면 식(8)은 다음과 같이 된다.

$$m_i \ddot{r}_i = f_i \quad (10)$$

위에서  $m_i$  는 원자 I 의 질량이고

$$f_i = \nabla L = -\nabla V \quad (11)$$

은 원자  $i$  의 질량 중심에 미치는 힘의 총합이다. 이 식은 또한 분자  $i$  에 미치는 힘의 총합  $f_i$  으로써 분자의 무게 중심에 적용할 수 있다

## 2.4 유한차이법

위에서 동력학적으로 구한 상미분 방정식들의 해를 구하는 표준적인 방법은 유한 차이 방법 (Finite Difference Method)이다. 그것의 일반적인 개념은 시간  $t$  에서 주어진 입자들의 위치와 속도, 그리고 다른 동력학적인 정보를 통해 충분한 정밀도의 범위 안에서 다음 순간  $r(t + \delta t)$  에서의 입자들의 위치와 속도 등을 알아내려는 것이다. 운동방정식은 한단계씩 그 해를 구해야 한다.

운동방정식의 시간-적분 방법들 중 가장 많이 사용되는 방법은 Verlet[1967]에 의하여 처음으로 고안되고 Störmer[1971]에 의하여 사용된 Verlet 알고리즘이다. 이 방법은 2 차 미분방정식에 대한 직접적인 해를 구하는 알고리즘이며 현재의 위치  $r(t)$  과 가속도  $a(t)$ , 그리고 한 순간 과거의 위치  $r(t - \delta t)$

에 그 기초를 둔다. 한 순간 미래 및 과거의 위치  $r(t + \delta t)$  과  $r(t - \delta t)$  을 현재의 위치  $r(t)$  에 대하여 각각 Taylor 전개를 하면

$$r(t + \delta t) = r(t) + \delta t v(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 a(t) + \dots$$

$$r(t - \delta t) = r(t) - \delta t v(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 a(t) - \dots$$

이 되며 이 두 식을 서로 더하여 정리하면 다음 식을 얻는다.

$$r(t + \delta t) = -r(t - \delta t) + 2r(t) + \delta t^2 a(t) \quad (12)$$

위의 식을 얻게 되면 분자동역학에서 구한 운동방정식을 이용하여 가속도를 구하게 되고 그 가속도를 위 식에 대입하여 다음 위치를 추적할 수 있다.

## 3.1 결과

모의실험은 두 가지를 실시하는데 하나는 인장 실험이고 다른 하나는 접합 실험이다.

### 3.1.1 인장

인장실험에 사용되는 구리 나노 도선의 형태는 아래의 그림과 같다. 인장실험을 실시하여 단위길이 에 걸리는 힘의 크기를 구하면 다음과 같다.

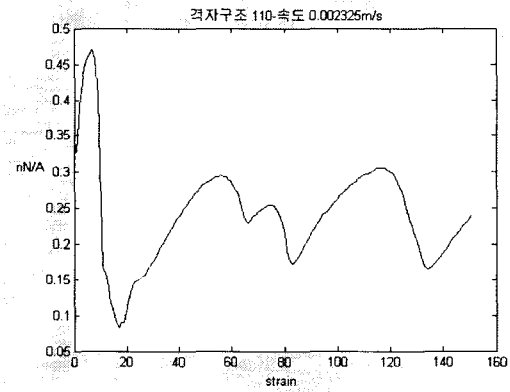


Fig .1 Force per length by strain (v=0.002325m/s)

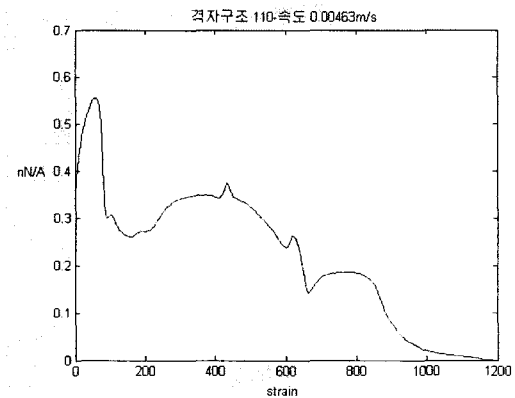


Fig .2 Force per length by strain (v=0.00463m/s)

#### 4. 결론

본 연구는 지금까지의 일반적으로 분자동력학에 사용되는 여러 가지 소프트웨어를 사용하지 않고 직접 프로그램을 완성하였다. 그리고 여러 가지 에너지 계산법 중 금속에 가장 적합하다는 EAM 을 사용하여 실제와 더욱 비슷한 시뮬레이션을 실시하였다. 구리 나노 도선의 인장강도 실험 결과에서 볼 수 있듯이 변형속도를 빠르게 할수록 더큰힘이 필요함을 알 수 있었고 접합실험에서는 접합이 된 후의 강도는 전에 강도보다 커짐을 알 수 있었다. 앞으로 이 공정분야가 나노급까지 작아지게 되면 본 연구를 비롯해서 나노급에 관한 연구가 더욱 활발히 진행되리라 생각된다

#### 참고문헌

1. Murray S. Daw and M. I. Baskes Phys. Rev. Lett. 50, 1285 (1983)
2. H. Mehrez and S. Ciraci, Phys. Rev. B56, 12632 (1997)
3. Y. Mishin, Phys. Rev. B63, 224106 (2001)
4. Y. Mishin, Phys. Rev. B65, 224114 (2002)
5. H. W. Han, D. J. Kim and H. K. Chang J. Korean Phys. Soc, Vol 41, No 2, 221 (2002)
6. J. W. Kang and H. J. Hwang J. Korean Phys. Soc, Vol 38, No 6, 695 (2001)
7. Murray S. Daw Phys. Rev B, Vol 39, No11, 7441 (1989)
8. J. H. Rose, R. Smith, F. Guinea and J. Ferrante, Phy. Rev. B 29, 2963 (1984)
9. S. M. Foiles, Phys. Rev. B 32, 7685 (1985)

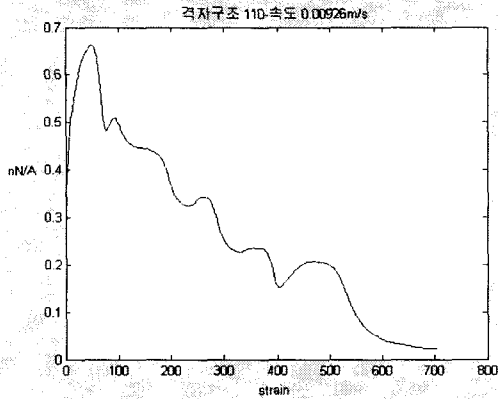


Fig .3 Force per length by strain (v=0.00926m/s)

위의 그림에서 볼 수 있듯이 격자구조 (110)에서 변형속도가 빨라 질수록 단위 길이 당 걸리는 힘이 커짐을 볼 수 있다. 이는 더 빠른 변형이 이루어지기 위해서는 그만큼 더 큰 힘이 필요하다는 것을 보여준다.

#### 3.1.2 접합

접합에 사용되는 시험 나노 도선은 인장실험에서 사용되었던 격자구조 (110)의 나노 도선이 아니라 격자구조 (100)의 도선의 형태를 사용하였다. 실험은 접합 조건을 압축율이 약 0.1 정도가 되면 접합을 멈추고 인장을 시작한다. 그리고 그 때의 단위 길이에 따른 힘을 구하게 된다. 단위 길이에 따른 접합력은 아래의 그림과 같다.

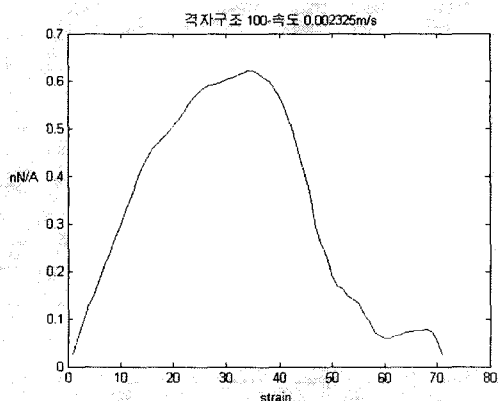


Fig .4 Force per length by strain (v=0.002325m/s)