

계산과학을 통한 나노 박막의 이해

김상필*, 안효신**, 이승협*, 이승철, 한승우***, 이광렬
한국과학기술연구원 미래기술연구본부, *한양대학교, 세라믹공학과
서울대학교, 재료공학부, *이화여자대학교, 물리학과

나노 박막의 합성 공정 제어와 그 물성의 평가는 나노기술의 성공을 가늠하는 중요한 기술적 요소이다. 본 발표에서는 본 연구진의 연구결과들을 중심으로 나노 박막의 합성 공정과 물성의 이해를 위한 제일원리 계산과 분자동역학 전산모사 등 계산과학의 적용 예들을 통해 그 가능성과 한계를 살펴본다.

극박 다층막의 합성 시 발생하는 원자규모의 계면 혼합은 device의 성능에 결정적인 역할을 하는데, 계면 반응을 고려하지 않는 기존의 박막성장 모델로는 이 현상을 이해하는데 제한이 있다. 금속 극박 다층막에서 분자동역학 전산모사를 통해 계면 혼합의 원인을 체계적으로 밝힘으로써, 계면 혼합이 발생하기 위한 kinetic criteria를 제시할 수 있었다.

탄소나노튜브 (CNT)의 성장은 질소 함입에 의해 크게 증가하는데, 이는 질소에 의해 CNT 성장의 energy barrier가 달라져서 reaction control step이 변하기 때문이었다. 또한, 질소의 첨가는 CNT의 전자방출을 현저히 증가시킬 수 있음을 electron transport 계산을 통해 보여주었다.

비정질 탄소 필름의 잔류응력에 미치는 제삼원소 첨가의 영향을 분자동역학 기술과 제일원리 계산을 통해 해석하였다. 비정질 탄소구조 내에 존재하는 제삼원소의 주변에서 잔류응력의 감소가 현저했으며, 이는 제삼원소가 탄소원자 결합각도의 왜곡에 따른 에너지 증가를 현저히 감소시키기 때문임으로 보여주었다.