J. Korean Soc. Tribol. Lubr. Eng., Vol. 32, No. 1, February 2016, pp. 9~17 ISSN 1229-4845(Print) · 2287-4666(Online)
Journal of the Korean Society of Tribologists & Lubrication Engineers http://Journal.kstle.or.kr

DOI http://dx.doi.org/10.9725/kstle.2016.32.1.9

MD 시뮬레이션을 이용한 실린더 형태 나노와이어의 접촉면적에 관한 연구

김 현 준†

경북대학교 정밀기계공학과

Determination of Contact Area of Cylindrical Nanowire using MD Simulation

Hyun-Joon Kim†

Dept. of Precision Mechanical Engineering, Kyungpook National University

(Received January 2, 2016; Revised January 28, 2016; Accepted January 29, 2016)

Abstract – Contact between solid surfaces is one of the most important factors that influence dynamic behavior in micro/nanoscale. Although numerous theories and experimental results on contact behavior have been proposed, a thorough investigation for nanomaterials is still not available owing to technical difficulties. Therefore, molecular dynamics simulation was performed to investigate the contact behavior of nanomaterials, and the application of conventional contact theories to nanoscale was assessed in this work. Particularly, the contact characteristics of cylindrical nanowires were examined via simulation and contact theories. For theoretical analysis, various contact models were utilized and work of adhesion, Hamaker constant and elastic modulus those are required for calculation of the models were obtained from both indentation simulation and tensile simulation. The contact area of the cylindrical nanowire was assessed directly through molecular dynamics simulation and compared with the results obtained from the theories. Determination of the contact area of the nanowires was carried out via simulation by counting each atom, which is within the equilibrium length. The results of the simulation and theoretical calculations were compared, and it was estimated that the discrepancy in the results calculated between the simulation and the theories was less than 10 except in the case of the smallest nanowires. As the result, it was revealed that contact models can be effectively utilized to assess the contact area of nanomaterials.

Keywords – molecular dynamics simulation (분자동역학 시뮬레이션), contact mechanics (접촉역학), nanowire (나노와이어), Hertzian contact (헤르츠 접촉)

Nomenclature

P : Adhesion force (N) (응착력)
P_N : Normal force (N) (수직하중)
$\Delta\gamma$: Work of adhesion (N/m) (접착일)
R_S : Radius of sphere (m) (구의 반지름)
R_C : Radius of cylinder (m) (실린더의 반지름)
E^* : Reduced elastic modulus (Pa) (유효 탄성계수)
a : Contact width (m) (접촉너비)
ν : Poisson's ratio (푸아송비)
$\tilde{P}$: Dimensionless normal force (무차원 수직하중)
$\tilde{a}$: Dimensionless contact width (무차원 접촉너비)

†Corresponding author : hjoonkim@knu.ac.kr
Tel: +82-54-530-1273, Fax: +82-54-530-1278

1. 서 론

다양한 동적 기계요소는 다른 부품과의 접촉을 바탕으로 왕복운동, 원운동 혹은 그 외의 복잡한 형태의 거

동을 반복하게 된다. 이 때, 표면의 거칠기, 하중, 소재의 탄성특성 등에 따라 접촉현상이 달라지게 되며 이러한 접촉현상은 기계요소의 전반적인 성능, 그 중에서도 특히 트라이볼로지적 특성에 매우 큰 영향을 미친다는 것이 잘 알려져 있다[1, 2]. 이러한 접촉현상이 성능에 매우 큰 영향을 미치는 대표적인 사례로 브레이크, 타이어, 베어링, 가스켓과 같은 기계요소를 들 수 있으며, 그 외에도 동적거동을 하는 대부분의 기계요소는 접촉현상을 바탕으로 작동하게 되므로, 많은 기계분야에서는 이러한 접촉현상에 대하여 깊은 관심을 갖고 다양한 연구를 수행하고 있다[3-6].

그러나, 접촉현상은 일부 특수한 경우를 제외하고 실험적으로 그 정량적 값을 획득하는 것이 매우 어려우며 대부분의 경우 19세기 Hertz에 의해 태동된 접촉역학 이론을 바탕으로 분석이 수행되고 있다. 초기에는 단순히 매끈한 표면을 갖는 구형의 돌기(asperity)의 접촉에 대한 해석에서 시작하여, 실린더, 거친 표면조도를 갖는 물체, 응착력(adhesion)이 존재하는 표면과 같은 복잡한 대상에 대한 해석으로 그 범위가 점차 확장되어 왔다[7-9].

최근 나노수준의 가공 및 재료기술이 발달함에 따라 다양한 나노물질에 대한 연구 및 활용이 점진적으로 증대되어왔고, 이러한 연구들을 바탕으로 다양한 재료의 성질 및 거동이 스케일에 의존적이라는 사실이 잘 알려져 있다. 소재의 크기가 나노수준으로 작아질 경우, 부피대비 표면적의 비율이 기하급수적으로 증가하게 되고 이 경우, 급증한 표면적이 나노수준에서의 재료의 특성과 거동에 매우 큰 영향을 끼친다는 사실이 원자수준의 시뮬레이션과 실험을 바탕으로 제기된 바 있다[1]. 앞서 언급한 고전적 접촉역학 이론은 스케일의 영향을 고려하지 않고 있기 때문에 나노물질의 접촉면적 예측에 활용되기 위해서는 충분한 검증을 통한 신뢰성을 갖추어야 할 필요성이 제기된다[10-12].

특히 나노물질의 접촉면적은 트라이볼로지적 특성을 평가하고 분석하는 과정에서 매우 중요하게 고려해야 하는 요소이며, 기술적인 어려움으로 인하여 실험을 통한 검증이 거의 이뤄지지 않고 있다. 이러한 이유로 대부분의 ZnO, InAs와 같은 육각기둥 형태를 지닌 나노와이어에 대한 연구에서는 전단응력을 평가하기 위하여 접촉면적을 단순하게 육각기둥의 한쪽 면 전체가 바닥면과 접촉한다고 가정하는 것이 일반적이다[13-14]. 또한 실린더 형태의 나노와이어의 경우에는 접촉면적에 대한 정의가 어려워 그에 대한 논의를 거의 찾아보기 어렵다. 많은 나노와이어가 접촉을 기반으로 하는 다양한 응용분야에 활용될 수 있다는 점을 고려할 때, 나노와이어의 접촉면적에 대한 명확한 예측이 요구된다고 할 수 있다[15].

따라서, 본 연구에서는 실린더 형태의 나노와이어의 접촉면적을 분자동역학 시뮬레이션을 바탕으로 분석하고자 한다. 분자동역학 시뮬레이션은 나노수준에서 기계적 거동모사에 널리 활용되고 있으며, 실험적으로 획득하기 어려운 물리적 특성을 정량적으로 도출해낼 수 있다는 점에서 그 의의를 찾을 수 있다. 나노와이어의 접촉현상 역시, 실험적으로는 검증하기 어려운 거동이므로, 본 연구에서는 분자동역학 시뮬레이션 기법을 활용하여 정량적 분석을 수행하고자 하였으며, 기존의 접촉역학 이론을 적용하여 시뮬레이션 결과와 상호 비교함으로써 나노와이어의 접촉면적을 높은 신뢰성을 가지고 도출할 수 있는 방안에 대하여 알아보고자 한다.

2. 연구의 개요

본 연구는 실린더 형태를 지닌 나노와이어와 바닥면 사이에 형성되는 접촉면적을 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 획득하는 한편, 기존에 발표된 접촉이론을 바탕으로 계산된 값과 비교함으로써 나노물질의 접촉면적을 분석하는 효과적인 방법을 제시하고 그 타당성을 검증하고자 수행되었다.

매크로 스케일에서 접촉면적은 물체가 갖는 무게에 의한 변형의 영향이 매우 크게 나타나는 것에 비하여, 나노수준에서는 상대적으로 표면의 응착력이 접촉면적 형성의 주된 원인으로 알려져 있다. 그러나, 크기가 수십 ~ 수백 nm에 불과한 나노물질의 응착력과 그에 의해 발생하는 접촉면적을 직접적으로 평가하는 것은 매우 어려우므로 본 연구에서는 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 직접 응착력과 접촉면적을 획득하는 한편, 원자현미경(atomic force microscopy)을 이용한 시험과정을 시뮬레이션으로 재현함으로써, 시뮬레이션의 결과 및 이론적 분석방법을 실제 시험과 연결시킬 수 있는 근거를 마련하고자 하였다. Kim이 제안한 기존의 연구를 살펴보면 AFM을 이용하여 나노와이어의 응착력을 간접적으로 획득하는 방법과, 해당 방법의 신뢰성을 시뮬레이션을 통하여 제시한 바 있다[13, 16]. 이러한 기존의 연구를 바탕으로 본 연구에서도 AFM을 이용한 접촉면적의 간접적 획득방법을 실제 시뮬레이션과 상호 비교하고자 한다.

본 연구에서 평가하고자 하는 대상은 접촉면적을 정의하기 어려운 실린더 형태의 나노와이어이며, AFM을 이용한 간접적인 시험방법의 전제조건으로 평가대상과 AFM 탐침 소재가 동일해야 한다는 점이 있으므로, 나노와이어의 소재는 실리콘(Si)으로 설정하였다.

보통의 결정질 실리콘 나노와이어는 실린더 형태를 나타내지 않으며, 표면의 산화층의 형성에 의하여 실린더 형태를 형성하는 것으로 알려져 있다. 그러나, 본 연구에서는 산화층을 고려하여 모델링을 수행할 경우 계산시간의 급격한 증가로 인한 효율의 저하가 나타날 수 있다는 점과, 실리콘 팁의 표면에도 산화층이 존재하여 나노와이어와 바닥면, 팁과 바닥면 사이의 상호작용 특성은 서로 동일하다는 점을 고려하여, 실리콘 팁과 나노와이어 모두 순수한 실리콘으로 단순화 하여 시뮬레이션을 수행하더라도, 실린더 형태의 나노와이어가 평면과 형성하는 접촉면적을 규명하고자 하는 본 연구의 취지에서 벗어나지 않는다고 판단하였다.

이러한 전제조건에 따라 시뮬레이션은 다음의 순서로 진행되었는데, 우선 AFM 탐침을 모델링하여 표면에 압입시뮬레이션을 수행하고, 이 때 발생하는 응착력의 특성을 정량적으로 획득한다. 이어서, 이 값을 실린더 형태의 나노와이어와 바닥면 사이의 접촉면적을 예측하는 이론식에 적용하는 과정을 거침으로써 시뮬레이션을 통하여 직접적으로 획득된 접촉면적과, 이론적으로 예측된 값을 상호 비교하고자 하였다. 뿐만 아니라, 이러한 시뮬레이션 과정은 실험으로도 진행할 수 있는 방법이므로 본 연구를 통하여 나노물질의 접촉면적을 실험적으로 추정할 수 있는 효과적인 방안을 제시할 수 있을 것으로 판단된다.

3. 시뮬레이션 방법

3-1. 시뮬레이션 모델수립

분자동역학 시뮬레이션을 토대로 실린더 형태의 나노와이어의 접촉면적을 구하기 위하여 다음의 Fig. 1과 같은 모델을 수립하였다. 우선, Fig. 1(a)와 같이 반구형의 팁과 FCC 구조를 갖는 바닥면을 모델링 하였다. 이 때 반구형의 팁은 AFM에 흔히 활용되는 실리콘 팁을 모사하기 위한 것이므로 실리콘 원자로 구성하였다. 반구형 팁의 지름은 약 10 nm 가량의 크기로 설정하여 실제 실리콘 팁의 조건과 비교적 흡사한 조건이 되도록 하였다. 그리고 지름이 10, 15, 20, 30 nm인 실린더 형태의 나노와이어를 Fig. 1(b)와 같이

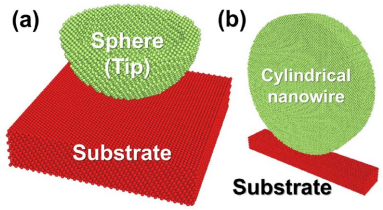

Fig. 1. Simulation models for (a) indentation of spherical tip onto the FCC substrate and (b) assessment of contact area of nanowire.

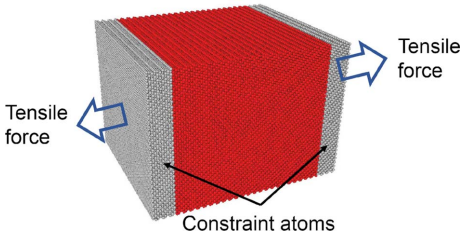

Fig. 2. Hexahedral FCC model for tensile simulation to obtain elastic modulus at nanoscale.

모델링 하였다. 한편, 접촉면적의 형성은 소재의 변형을 필연적으로 수반하므로 소재의 탄성특성을 명확하게 이해해야한다. 일반적으로 나노수준에서의 탄성계수(elastic modulus)는 매크로 스케일에서의 값과 다르다는 사실이 알려져 있다[17, 18]. 즉, 매크로 스케일에서 일반적으로 알려진 탄성계수를 그대로 사용할 경우, 접촉면적 계산에 오류를 가져올 수 있으므로 보다 정확한 분석을 위해서는 나노수준에서의 탄성계수를 구할 필요가 있다. 따라서 본 연구에서는 나노와이어와 접촉하는 바닥면의 정확한 탄성계수를 획득하기 위하여 Fig. 2와 같은 인장 시뮬레이션 모델을 생성하였다. 인장시뮬레이션을 위한 육면체 모델은 $17 \times 15 \times 21$ nm 크기의 면심입방격자(FCC)로 형성하였다. 이렇게 생성된 육면체 모델 중, z 축 기준으로 양쪽의 각각 2.5 nm 만큼의 원자에 제약조건을 부여하였다. Fig. 2에서 회색으로 표시된 부분이 제약조건이 부여된 원자이며 이 원자들을 양쪽으로 당겨 인장시뮬레이션을 진행하였다.

3-2. 시뮬레이션 조건

나노와이어의 접촉면적을 획득하고, 이론식과 비교분석하기 위하여 총 3종류의 시뮬레이션이 수행되었다. 우선, 나노와이어와 같은 소재로 이루어진 실리콘 팁과 바닥면 사이의 응착력 특성을 확인하기 위하여 반

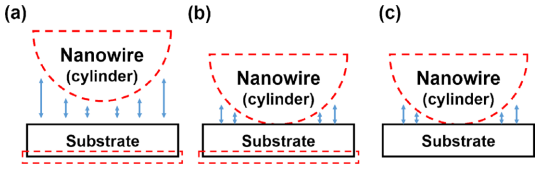

Fig. 3. Simulation procedure to measure contact area at the nanowire surface through following steps: (a) relaxation (b) indentation for contact of nanowire with the FCC substrate and (c) removal of constraint at the FCC substrate to form natural contact between nanowire and the substrate.

구형 팁을 이용한 압입 시뮬레이션이 진행되었다. 실리콘 팁은 강체로 설정되었고, 바닥면을 이루는 FCC 기판은 시뮬레이션 속도와 계산상의 편의를 위하여 은(Ag) 원자로 구성하였다. 시뮬레이션은 안정화 (relaxation), 압입(indentation), 제거(unloading)의 순서로 진행되었으며 압입 및 제거 속도는 6 nm/ns로 설정하였다. FCC 바닥면이 소성변형하지 않는 범위 내에서 시뮬레이션을 진행하기 위하여 압입 깊이를 0.5 nm 이하로 제한하였고, 팁이 바닥면에서부터 멀어지는 제거 시뮬레이션 과정에서 팁에 인가되는 수직방향의 힘을 합산하여 응착력을 획득하였다.

둘째로는 나노와이어와 바닥면 사이의 접촉면적 및 응착력 획득을 위한 시뮬레이션이 진행되었다. 이 때, 접촉면적을 위한 시뮬레이션은 앞서 언급한 실리콘 팁의 압입 시뮬레이션과 다르게 안정화, 압입, 제한조건 제거의 순서로 진행되었으며, 이 과정은 Fig. 3에 잘 나타나 있다. 압입과정은 나노와이어에 가해지는 힘이 인력에서 척력으로 전이되는 시점, 즉 하중이 0 nN에서 인력에 의하여 음수가 된 후, 나노와이어가 점차 표면에 접근함에 따라 다시 증가하여 0 nN가 되는 순간까지 진행하였으며 압입속도는 실리콘 팁의 압입시뮬레이션과 마찬가지로 6 nm/ns 로 설정되었다. 이 상태에서 FCC 바닥면의 최하층에 설정된 제한조건 (constraint condition)을 제거하였다. 제한조건은 FCC 바닥면을 위, 아래로 움직여 압입시뮬레이션을 진행하기 위하여 설정하는 것으로써, 제한조건이 설정된 원자는 강체로 간주된다. 따라서, 나노와이어와 바닥면 사이에 접촉을 형성하는 데 있어서 조금이라도 영향을 줄 수 있는 제한조건을 제거함으로써 접촉면적의 계산 정밀도를 높이고자 하였다. 제한조건이 제거된 상태에서 40 ps 동안 나노와이어와 바닥면 사이에서 형성된 접촉면적을 측정하였다.

한편, 나노와이어의 응착력을 획득하기 위한 시뮬레이션은 실리콘 팁의 압입시뮬레이션과 동일하게 일정 수준의 수직하중이 발생할 때까지 나노와이어를 바닥면에 압입한 뒤, 다시 떼어내는 제거 과정을 거쳐 수행되었으며, 나노와이어를 FCC 바닥면에 낮은 하중으로 압입한 뒤에 떼어낼 때 발생하는 힘을 응착력으로 간주하여 측정하였다.

마지막으로 FCC 바닥면의 탄성특성을 획득하기 위한 인장시뮬레이션이 진행되었다. 육면체의 모델을 양쪽에서 잡아당겼을 때, 응력-변형률의 거동을 관찰함으로써 탄성계수를 획득할 수 있으며 이 때 인장속도는 1.3 nm/ns로 설정하였다. 인장 시뮬레이션은 탄성 범위내에서 진행하기 위하여 변형률이 0.005 이하인 조건에서 진행되었다.

모든 시뮬레이션은 300K의 온도조건에서 진행되었고, 일정한 온도를 유지하기 위하여 Nose-Hoover thermostat이 적용되었다. 또한, 주기경계조건 (periodic boundary condition)이 x, y 방향으로 적용되어 경계면이 연속적으로 존재하는 상황을 모사하였다. 이러한 경계조건의 적용을 토대로 Fig. 1(b)의 실린더 모델의 길이가 짧게 모델링 되더라도 시뮬레이션의 신뢰성을 충분히 확보할 수 있으며, 보다 효율적이고 빠르게 시뮬레이션을 진행할 수 있었다.

실리콘 팁과 나노와이어는 모두 강체로 설정되었으므로 원자간의 거동을 모사하기 위한 포텐셜 함수가 적용되지 않았고, FCC 바닥면은 Morse 포텐셜이, FCC 바닥면과 실리콘 원자사이의 거동은 Lennard-Jones 포텐셜 함수가 적용되었다. 이 때, 포텐셜 함수에 적용되는 변수는 기존의 문헌에서 활용된 값을 참조하였다[16, 19].

4. 시뮬레이션 결과 및 분석

4-1. FCC 금속모델의 인장시뮬레이션

나노물질의 접촉면적을 획득하기 위하여 가장 먼저 선행되어야 하는 것은 소재의 탄성특성 규명이다. 접촉면적은 소재의 변형을 전제로 하여 획득할 수 있는 물리적 거동의 결과값이므로, 반드시 소재가 갖는 정확한 탄성계수(Young's modulus) 값을 파악할 필요가 있다. 따라서, 정확한 접촉면적을 획득하기 위하여 앞서 언급한 바와 같이 나노와이어와 접촉하는 FCC 바닥면과 같은 소재로 육면체 모델을 만들고, 육면체의 양쪽 끝을 잡아당기는 인장시뮬레이션을 수행하였다.

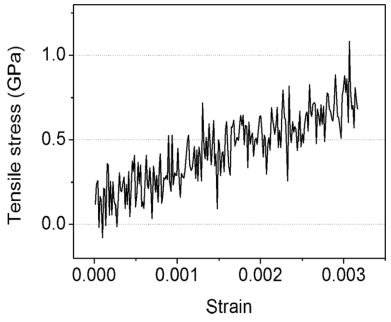

Fig. 4. Stress-stain curve of hexahedral FCC model obtained from tensile simulation.

그 결과 Fig. 4와 같은 응력-변형률 선도를 획득할 수 있었다. 매우 작은 변형률 수준(0.005 이하)에서 시뮬레이션을 수행하였으므로, 원자의 열적거동에 의한 그래프의 진동을 제외하면 응력-변형률 관계는 선형으로 나타났으며 이 관계를 토대로 바닥면을 형성하는 FCC 단결정기판의 탄성계수를 계산한 결과 193 GPa의 값을 갖는 것을 확인할 수 있었다. 이러한 결과는 매크로 스케일에서 나타내는 은의 탄성계수보다 다소 큰 값이나, 나노수준에서의 기계적 물성이 스케일에 의존적이며, 스케일의 감소에 따라 탄성계수가 증가함을 밝힌 기존의 문헌을 참고해 볼 때, 납득할 수 있는 수준으로 판단된다[17, 18].

이렇게 획득된 값은 나노와이어의 접촉면적을 이론적으로 계산하는 과정에 활용되었다. Hertz접촉 이론으로부터 파생된 대부분의 탄성접촉이론은 접촉하는 두 물체의 탄성계수 및 푸아송 비에 따라 변화하는 유효탄성계수(reduced elastic modulus) 값을 사용하여 접촉면적을 계산하게 되는데, 그 수식은 다음과 같다.

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1-\nu_1^2}{E_1} + \frac{1-\nu_2^2}{E_2} \quad (1)$$

본 시뮬레이션에서는 나노와이어를 강체로 정의하여 연구를 수행하였으므로, E_1 값을 무한대로 두고, E_2 값에는 시뮬레이션을 통해 획득된 193 GPa을 대입하여 수식 (1)을 계산하였으며 푸아송 비는 보통의 금속에 해당하는 0.35를 적용하였다. 게다가 푸아송 비의 경우, 0.3~0.4로 변경하더라도 유효탄성계수에 미치는 영향이 7%에 불과하므로 해당 값의 적용이 계산의 신뢰성에 영향을 주지 않는다고 판단하였다. 이를 바탕으로 계산한 유효탄성계수 값은 약 220 GPa이며, 탄성접촉이론에 이 값을 활용하였다.

4-2. 접촉 시뮬레이션 결과분석

나노와이어의 접촉면적을 직접적으로 획득하기 위하여 앞서 언급한 바와 같이 실린더 형태의 나노와이어를 FCC 바닥면에 접촉시킨 뒤, 제한조건을 제거하여 40 ps 동안 접촉면적을 측정하였다. 원자수준의 접촉면적을 정의하는 것은 매우 어려운 일이므로, 본 연구에서는 Fig. 5(a)와 5(b)에 나타난 것과 같이 두 가지 방법을 이용하여 접촉면적을 계산하였다. 두 방법 모두, 두 원자간의 거리가 평형거리(equilibrium length)보다 가까운 상태에 있을 경우에 해당 원자가 접촉면을 형성한 것으로 간주하였다. 두 원자가 평형거리, 혹은 그보다 가까운 거리에 위치한다는 것은 상호작용이 힘의 균형상태이거나 혹은 척력상태에 있음을 의미하는 것이므로, 접촉상태에 대한 정의조건으로 타당하다고 판단된다[20].

접촉면적을 정의하는 첫 번째 방법으로, 본 연구에서는 Fig. 5(a)에서 나타나는 바와 같이 얼마나 많은 실리콘 원자가 FCC 바닥면의 원자와 접촉상태에 있는지를 매 스텝 측정하고 그 수치를 평균 내어 접촉원자의 개수를 도출하는 기법을 활용하였다. 이 때, 평형거리 값은 실리콘-은 원자의 상호작용을 모사하기 위한 Lennard-Jones 포텐셜 함수에 사용되는 값을 이용하였다.

한편, 접촉상태에 위치하는 원자들에 의하여 형성되는 접촉면적의 규정은 원자의 반지름(atomic radius)을 바탕으로 하였다. 본 연구에서 접촉여부를 판정하는 대상원자로 나노와이어를 구성하는 실리콘을 선정하였으므로, 접촉면적 계산을 위한 반지름 역시 실리콘의 값을 활용하였다. 실리콘의 경우 0.235 nm의 반지름을 가지고 있으므로, 이 값을 바탕으로 단일 원자에 의한 접촉 면적을 구할 수 있다. 이 값을 바탕으로 접촉하

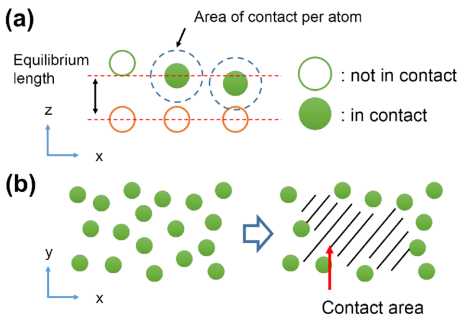

Fig. 5. Schematic of contact definition in the simulation based on (a) area of individual atom and (b) area inside contact boundary.

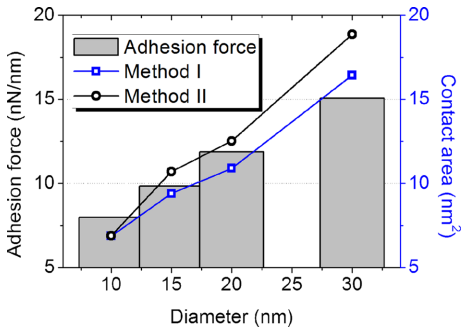

Fig. 6. Contact area and adhesion of nanowire obtained from MD simulation. Method I and method II imply the calculation method of contact area based on individual atom radius and geometric area inside contact boundary, respectively.

고 있는 원자의 개수에 원자당 접촉면적을 곱하여 나노와이어와 바닥면 사이의 총 접촉면적을 도출하였다.

두 번째로는, 앞서 첫 번째 방법으로 획득한 접촉상태에 있는 원자의 좌표 값을 바탕으로 면적을 기하학적으로 계산하는 방법을 활용하였다. Fig. 5(b)에서 확인할 수 있듯, 접촉원자의 최 외곽 경계선 내부는 완전한 접촉상태라고 가정하여 면적을 계산하였다.

그 결과, Fig. 6과 같이 나노와이어의 지름이 증가함에 따라 접촉면적 역시 증가하는 경향을 확인할 수 있었다. 그림의 method I과 II는 각각 개별원자의 반지름과 접촉경계 내부의 기하학적 형상을 이용한 접촉면적 계산방법을 의미한다. 시뮬레이션 결과를 살펴보면, method II, 즉 경계선 내부의 완전 접촉을 가정한 기하학적 접촉면적 획득 방법이, 상대적으로 개별 원자의 지름을 고려한 접촉면적 계산 방법에 비하여 더 큰 값을 나타내고 있음을 알 수 있다.

이러한 결과의 원인으로, 첫째로는 개별 원자에 의한 접촉영역을 동일하게 고려하는 방법과 기하학적 형상을 이용한 방법의 근본적인 차이를 들 수 있다. 둘째로는 접촉면이 경계선 내부에 일정하게 형성된 것이 아니라, 국부적으로 접촉하지 않는 원자들이 존재할 것으로 추정되는 현상을 들 수 있다.

한편, 나노와이어를 바닥면으로부터 떼어낼 때 발생하는 응착력 또한 접촉면적의 경향과 거의 일치하는 모습을 시뮬레이션을 통하여 알 수 있었으며, 그 값은 지름에 따라 나노와이어의 단위길이 당 8~15 nN/nm 수준으로 확인되었다.

4-3. 탄성이론을 통한 접촉면적 분석

시뮬레이션을 통하여 획득된 접촉면적과 이론을 통해 계산된 접촉면적의 값을 상호비교하기 위하여 본 연구에서는 두 가지의 방법을 적용하였다. 첫 번째로는 Derjaguin, Muller, Toporov(DMT) 모델의 기본적 특성과, Hertz 접촉이론의 수식을 함께 활용하였다. Hertz에 의하여 탄성접촉이론이 제안된 이래, 다양한 조건의 접촉상황에 대한 많은 이론이 발표된 바 있는데, 그 중에서도 DMT 및 JKR 이론은 표면에서 발생하는 응착력을 고려하기 위한 이론으로 널리 활용되고 있으며, 표면이 매우 부드럽고 높은 응착력을 갖는 고무와 같은 경우에 적합한 JKR 이론에 비하여, DMT 이론은 비교적 표면의 변형이 적고 접촉면 바깥에서 발생하는 원거리의 상호작용이 보다 중요한 경우에 적합한 이론으로 잘 알려져 있다[7, 21].

본 연구에서 다루는 소재가 비교적 탄성계수가 높다는 점과, Fig. 6에서 알 수 있듯 시뮬레이션을 통하여 획득한 접촉너비 (contact width)가 나노와이어의 지름 대비 1/10 수준으로 상대적으로 매우 작다는 점을 바탕으로 고려할 때, JKR 이론보다는 DMT 이론을 적용하는 것이 타당하다고 판단하였다. 다만 DMT 모델은 구형의 물체를 다루는 이론으로서, 실린더 형태의 물체의 상호작용을 다루는 DMT 모델은 발표된 바 없다. 따라서, 본 연구에서는 DMT 모델의 기본적인 특성을 활용하고자 하였는데, 우선, DMT 모델에서 구형 물체와 평면사이의 접촉너비의 수식은 다음과 같이 표현된다[8, 22].

$$\frac{a^3 K}{R_S} = P_N + 2\pi\Delta\gamma R_S \tag{2}$$

이 때, $K = \frac{4E^*}{3}$

식 (2)의 형태를 살펴보면, 접촉너비 a 값은 수직하중 P_N과 응착력 ($2\pi\Delta\gamma R_S$)의 합에 의하여 결정되는 것으로 나타난다. 이 때, 응착력 항을 제거하게 되면, 보통의 Hertz 접촉이론식과 동일한 수식이 되는데, 이 점을 고려해보면 응착력과 수직하중은 접촉면적을 형성하는 데 있어서 동일한 역할을 한다는 것을 알 수 있다.

나노와이어의 경우, 시뮬레이션에 사용된 크기정보와 실리콘의 밀도를 고려하여 무게를 계산해보면, 약 10^{-5} nN 수준으로 Fig. 6에 나타난 응착력에 비하여 무게가 무시할만큼 작으므로, 수직하중 P_N을 0이라고

가정할 수 있으며, 이 경우에 접촉면적을 형성하는 것은 오로지 응착력이라고 판단할 수 있다. 다시 말해서, 응착력을 수직하중으로 간주하고 Hertz 접촉이론을 풀더라도, 계산결과에 무리가 없다고 사료된다. 다만, 앞서 언급한 것과 같이 실린더 형태를 다루는 DMT 모델이 발표된 바는 없으므로 실린더 형태인 나노와이어의 접촉면적을 구하기 위하여 다음과 같은 Hertz 접촉이론의 실린더 모델의 수식을 사용하였다[23].

$$a^2 = \frac{4P_N R_C}{\pi E^*} \tag{3}$$

즉, 식 (3)의 P_N는 수직하중이 아닌 응착력 값을 대입하여 풀게되며, 이 값은 Fig. 6에 나타난 접촉시뮬레이션을 통하여 직접적으로 획득한 나노와이어의 응착력과 Kim(2015)이 연구에서 제안한 van der Waals 상호작용을 바탕으로 간접적으로 계산된 응착력 값을 각각 적용하였다[16]. Van der Waals 상호작용을 이용한 응착력 예측은 15~25% 수준의 오차를 갖는, 비교적 신뢰성이 있는 방법이라는 점이 해당 연구에서 발표된 바 있다. 또한 E* 값은 FCC 모델의 인장시뮬레이션으로부터 획득한 유효탄성계수 값인 220 GPa 를 적용하여 계산하였으며, 그 결과 접촉너비 a 값을 구할 수 있었다.

두번째로 고려된 이론은 Baney(1997)가 발표한 cohesive zone 모델이다. Maugis(1992)는 구형의 물체와 평면사이에 응착력이 존재하는 접촉상황에서 다양한 조건에 의하여 응착력을 고려한 접촉모델이 JKR모델에서 DMT모델로의 전이되는 상황을 다룬 연구를 발표한 바 있는데, Baney의 cohesive zone 모델은 Maugis의 연구를 실린더와 평면사이의 상호작용에 대하여 확장한 것이다[24, 25].

Baney가 발표한 cohesive zone 모델에서는 λ 값이 0일 때 Hertz 접촉이론, 4 이상일 때 JKR 모델에 해당한다고 주장하였으며, 특수한 조건에서 DMT 모델에 해당하는 경향을 보인다고 발표하였는데 λ 값이 1 이고 cohesive zone의 크기, 즉 비접촉 상태의 van der Waals 힘이 작용하는 면적이 접촉면적에 비하여 상대적으로 매우 큰 경우가 DMT모델의 거동과 유사한 상태라고 정의하였다. 이 경우, 하중과 접촉너비의 관계곡선이 Hertz 접촉이론의 평행이동 형태를 갖게되어, DMT이론에 대한 Maugis의 가정에 부합한다고 주장하였다. 해당 조건을 바탕으로 한 수식은 다음과 같이 표현된다[25].

$$\tilde{P} = \tilde{a}^2 + 0.3465 \cdot \lambda^2 \left[1 - \sqrt{1 + \frac{16.65}{\lambda^3}} \right] \tag{4}$$

해당 연구를 살펴보면, 이 수식을 풀어내기 위하여 접착일(work of adhesion), $\Delta\gamma$ 값이 요구되므로 우선 반구형 팁을 FCC 바닥면에 압입하여 얻어낸 응착력 값을 이용하여 접착일(work of adhesion) 값을 획득한다. DMT 이론에 따르면, 표면으로부터 구형의 물체가 떨어질 때 응착력과 접착일의 관계는 다음과 같다 [22, 24].

$$P = 2\pi\Delta\gamma R_S \tag{5}$$

반구형 팁의 압입시뮬레이션을 통해 획득한 응착력 값을 식 (5)에 대입한 결과, 접착일 $\Delta\gamma$는 약 0.74 N/m로 나타났으며, 이 값을 수식 (4)에 대입하여 풀어내면 접촉너비 a 값을 구할 수 있다.

Cohesive zone 모델의 사용에 앞서, 주의할 점은 특정 λ값의 적용을 바탕으로 수식을 DMT 모델의 특성과 유사하게 수정한 것이므로, DMT모델과 동일하다고 할 수는 없다는 것이다. 이러한 문제는 앞서 Hertz 접촉이론을 활용한 접촉면적 추정과정에서 몇 가지 가정을 바탕으로 하여, DMT의 특성에 부합하도록 수식을 조정하는 과정에서도 동일하게 나타난다. 이와 같은 한계는 실린더에 해당하는 DMT모델의 부재로 인한 것이며, 그에 따라 두 모델의 접근방법과 결과값이 다르게 나타날 수 있음을 쉽게 유추해 볼 수 있다.

이러한 두 가지 서로 다른 이론식을 바탕으로 한 접촉면적의 계산결과를 MD 시뮬레이션을 통해 직접적으로 획득한 결과와 상호비교 한 결과, 다음의 Fig. 7과 같은 그래프를 얻을 수 있었다. X축에 표기된 D10, D15, D20, D30은 각각 지름이 10, 15, 20, 30 nm인 나노와이어 모델을 의미한다. 막대그래프로 나타

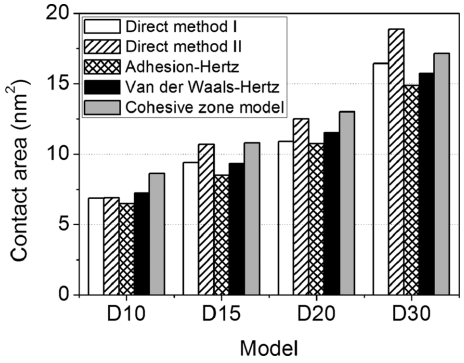

Fig. 7. Contact area obtained from various methods such as direct measurement in MD simulation, application of Hertz contact theory and cohesive zone model.

낸 데이터의 획득방법은 범례에 나타난 순서대로 MD 시뮬레이션을 이용한 접촉면적의 직접계산(direct measurement), MD 시뮬레이션에서 획득한 응착력 값을 Hertz 접촉이론에 적용한 경우(adhesion-Hertz), van der Waals 상호작용을 이용한 간접적 방법의 응착력 추정값을 Hertz 접촉이론식에 적용한 경우(van der Waals-Hertz), 마지막으로 cohesive zone 모델을 이용한 접촉면적 계산이다.

그래프를 살펴보면 각기 다른 지름을 가진 나노와이어 모델에 대해서 MD 시뮬레이션을 이용하여 획득한 접촉면적과 이론적으로 획득한 접촉면적 값이 크게 차이나지 않는 결과를 나타내는 것을 알 수 있다. 시뮬레이션에서 획득한 응착력 값을 바탕으로 Hertz 접촉이론을 계산한 경우, 시뮬레이션을 통해 직접적으로 획득한 접촉면적과 비교하여 1~10%의 오차가 나타났고, cohesive zone 모델을 사용한 경우 4~20%의 오차가 발생함을 확인할 수 있었다. van der Waals 상호작용을 이용한 접촉면적의 계산은 두 가지 방법의 중간값을 나타낸다는 사실을 확인하였다. Cohesive zone 모델의 경우, 나노와이어의 지름이 10 nm일 때는 오차가 20%에 달하지만, 지름이 커짐에 따라 오차가 점차 감소하여 30 nm일 때는 4%에 불과함이 확인되었고, Hertz 접촉이론을 적용한 경우에는 모든 경우에 대해서 오차의 변화에 특별한 경향을 발견할 수 없었다.

시뮬레이션과 접촉이론을 통한 접촉면적 계산값의 차이 및 각기 다른 접촉이론간의 차이의 원인으로는 다음과 같은 사항을 고려할 수 있다.

첫째로는, 2차원 DMT 모델의 부재로 인하여, 본 연구에서는 몇 가지 제한적인 조건 및 가정을 바탕으로 접촉모델을 사용하였다는 점이다. Hertz 접촉이론은 응착력을 고려하지 않으므로, 이 모델을 바탕으로 응착력에 의한 접촉면적을 유추하기 위해서 3차원 DMT 모델과 Hertz 접촉이론의 관계를 이용하였다. 이와 같은 문제점은 cohesive zone 모델에서도 나타나는데, 전이변수 및 기타 조건을 조정하더라도, 모델의 수식이 정확하게 DMT 모델의 형태와 완벽하게 동일하다고 볼 수는 없다. 이러한 제한조건에 의하여 각 모델의 결과값이 상이할 수 있음을 고려해 볼 수 있다.

둘째로는 각 접촉이론에 필요한 접촉면의 상호작용 특성값의 획득방법에서 오는 차이를 들 수 있다. Hertz 접촉이론을 이용하여 접촉면적을 계산할 경우, 나노와이어와 바닥면 사이의 응착력을 계산하기 위하여 Hamaker 상수를 이용하는 것과 달리 cohesive zone 모델에서는 접착일 값을 이용하고 있다. 접촉면의 상호작용 특성을 매개하는 값이 두 모델에 대하여 각기 다르다는 점에서 기인하는 차이가 있다고 판단된다.

그러나 시뮬레이션을 통해 직접적으로 획득한 접촉면적 값과 이론식을 바탕으로 얻은 값은 나노수준의 현상을 다룬다는 점을 고려할 때, 그 오차가 크지 않다고 판단되며, 정도의 차이는 있으나 다양한 접촉모델을 사용하여 충분히 신뢰성 있는 접촉면적 값을 획득할 수 있을 것으로 기대된다.

5. 결 론

본 연구에서는 분자동역학 시뮬레이션을 활용하여 실린더 형태를 지닌 나노와이어의 접촉면적을 구하고, 기존의 탄성접촉이론과 상호비교를 통하여 나노수준에서 접촉면적을 구하기 위한 타당한 방법을 제시하였다. 시뮬레이션을 통해 알 수 있는 사실은 다음과 같다.

1. 분자동역학 시뮬레이션을 바탕으로 나노와이어의 응착력과 접촉면적을 계산한 결과 상호 비례관계를 가진다는 것을 알 수 있었으며, 나노와이어의 지름에 따라 응착력과 접촉면적이 증가함을 확인하였다.

2. DMT 이론의 특성을 반영하여 응착력을 수직하중으로 간주하고 Hertz 접촉이론을 계산함으로써, 나노와이어의 접촉면적을 오차범위 10%이내로 추정할 수 있었다.

3. Cohesive zone 모델을 이용할 경우, 지름이 매우 작은 경우에는 오차가 20%에 달하지만, 점차 지름이 커짐에 따라 오차가 4%까지 저감되는 것을 알 수 있었다.

4. 접촉면적을 정확하게 계산하기 위해서는 나노수준에서 나타나는 물질의 탄성특성 변화를 고려할 필요가 있음을 확인하였다.

이러한 연구결과를 토대로 실린더 형태의 나노와이어와 바닥면 사이의 접촉면적을 획득하는 방법으로 나노와이어의 응착력 값을 바탕으로 하여 Hertz 접촉이론을 적용하거나, 실리콘 팁을 이용한 압입시험으로부터 접착일 값을 획득하여 cohesive zone 모델에 적용하는 것이 타당성을 지님을 확인할 수 있었다. 본 연구에서 진행된 시뮬레이션은 AFM을 이용한 실험을 나노와이어의 접촉면적을 구하기 위하여 활용하는 과정을 모사한 것이다. 따라서, AFM을 활용하여 응착력을 평가하고, 이 값을 토대로 나노와이어의 접촉면적을 추정하는 간접적 계산과정이 타당성 있는 결과를 도출할 수 있음을 확인하였다. 뿐만 아니라, 나노와이어 이외의 다양한 나

노물질의 접촉면적과 마찰특성의 연구에 본 연구결과가 유용하게 활용될 수 있을것으로 기대된다.

Acknowledgements

이 논문은 2015년도 정부(미래창조과학부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임(No. 2015R1C1A1A01053416).

References

[1] Kim, H.-J. Kim, D.-E. “Nano-scale friction: A review”, *Int. J. Precis. Eng. Manuf.*, Vol. 10, pp. 141-151, 2009.
[2] Kim, H.-K., “Design of Structure Corners Restraining Tribological Failures: Part I - Development of Design Formula”, *J. Korean Soc. Tribol. Lubr. Eng.*, Vol. 31, No. 4, pp. 163-169, 2015.
[3] Nam, S., Oh, Y., Jeon, S., “Predictive Study of Hysteretic Rubber Friction Based on Multiscale Analysis”, *J. Korean Soc. Tribol. Lubr. Eng.*, Vol. 30, No. 6, pp. 378-383, 2014.
[4] Moyar, G. J., Stone, D. H., “An analysis of the thermal contributions to railway wheel shelling”, *Wear*, Vol. 144, pp. 117-138, 1991.
[5] Persson, B. N. J., “Theory of rubber friction and contact mechanics”, *J. Chem. Phys.*, Vol. 115, No. 8, pp. 3840-3861, 2001.
[6] Eriksson, M., Jacobson, S., “Tribological surfaces of organic brake pads”, *Tribol. Int.*, Vol. 33, pp. 817-827, 2000.
[7] Chen, S., Gao, H., “Generalized Maugis–Dugdale model of an elastic cylinder in non-slipping adhesive contact with a stretched substrate”, *Int. J. Mat. Res.*, Vol. 97, pp. 584-593, 2006.
[8] Shi, X., Zhao, Y.-P., “Comparison of various adhesion contact theories and the influence of dimensionless load parameter”, *J. Adhesion Sci. Technol.*, Vol. 18, No. 1, pp. 55-68, 2004.
[9] Persson, B. N. J., “Contact mechanics for randomly rough surfaces”, *Surf. Sci. Rep.*, Vol. 61, pp. 201-227, 2006.
[10] Horstemeyer, M. F., Baskes, M. I., “Atomistic finite deformation simulation: a discussion on length scale effects in relation to mechanical stresses”, *J. Eng. Mater. Technol.*, Vol. 121, pp. 114-119, 1999.
[11] Tymiak, N. I., Kramer, D. E., Bahr, D. F., Gerberich, W. W., “Plastic strain and strain gradients at very small indentation depths”, *Acta Mater.*, Vol. 49, pp. 1021-1034, 2001.
[12] Ou, Z. Y., Pang, S. D., “Fundamental solutions to Hertzian contact problems at nanoscale”, *Acta Mech.*, Vol. 224, pp. 109-121, 2013.
[13] Kim, H.-J., Kang, K. H., Kim, D.-E., “Sliding and rolling frictional behavior of a single ZnO nanowire during manipulation with an AFM”, *Nanoscale*, Vol. 5, pp. 6081-6087, 2013.
[14] Bordag, M., Ribayrol, A., Conache, G., Fröberg, L. E., Gray, S., Samuelson, L., Montelius, L., Pettersson, H., “Shear Stress Measurements on InAs Nanowires by AFM Manipulation”, *Small*, Vol. 3, pp. 1398-1401, 2007.
[15] Wang, Z. L., Song, J., “Piezoelectric Nanogenerators Based on Zinc Oxide Nanowire Arrays”, *Science*, Vol. 312, pp. 242-246, 2006.
[16] Kim, H.-J., “Investigation of Adhesion force between Cylindrical Nanowire and Flat Surface through Molecular Dynamics Simulation”, *J. Korean Soc. Tribol. Lubr. Eng.*, Vol. 31, pp. 264-271, 2015.
[17] Oommen, B., Van Vliet, K. J., “Effects of nanoscale thickness and elastic nonlinearity on measured mechanical properties of polymeric films”, Thin Solid Films, Vol. 513, pp. 235-242, 2006.
[18] Zhao, J., Nagao, S., Odegard, G. M., Zhang, Z., Kristiansen, H., He, J., “Size-dependent mechanical behavior of nanoscale polymer particles through coarse-grained molecular dynamics simulation”, *Nanoscale Res. Lett.*, Vol. 8, pp.541, 2013.
[19] Sung, I.-H., Kim, D.-E., “Molecular dynamics simulation study of the nano-wear characteristics of alkanethiol self-assembled monolayers”, *Appl. Phys. A*, Vol. 81, pp. 109-114, 2005.
[20] Kim, H.-J., Kim, D.-E., “Molecular dynamics simulation of atomic-scale frictional behavior of corrugated nano-structured surfaces”, *Nanoscale*, Vol. 4, pp. 3937-3944, 2012.
[21] Peng, Y. F., Li, G. X., “An elastic adhesion model for contacting cylinder and perfectly wetted plane in the presence of meniscus”, *Trans. ASME J. Tribology*, Vol. 129, pp. 231-234, 2007.
[22] Muller, V. M., Derjaguin, B. V., Toporov, Y. P., “On two methods of calculation of the force of sticking of an elastic sphere to a rigid plane”, *Colloid. Surface.*, Vol. 7, pp. 251-259, 1983.
[23] Jin, F., Zhang, W., Zhang, S., Guo, X., “Adhesion between elastic cylinders based on the double-Hertz model”, *Int. J. Solids Struct.*, Vol. 51, pp. 2706-2712, 2014.
[24] Maugis, D., “Adhesion of spheres: The JKR-DMT transition using a dugdale model”, *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 150, pp. 243-269, 1992.
[25] Baney, J. M., Hui, C.-Y., “A cohesive zone model for the adhesion of cylinders”, *J. Adhes. Sci. Technol.*, Vol. 11, pp. 393-406, 1997.