

분자동역학 시뮬레이션을 이용한 다이아몬드 나노임프린트 리소그래피에서의 접착에 관한 연구

김광섭, 강지훈, 김경웅(한국과학기술원 기계공학과)

A Study on Adhesion in Diamond Nanoimprint Lithography Using Molecular Dynamics Simulation

Kwang-Seop Kim* (Dept. of Mechanical Engineering, KAIST) kimks@kaist.ac.kr,
Ji-Hoon Kang (Dept. of Mechanical Engineering, KAIST) deli@kaist.ac.kr,
Kyung-Woong Kim (Dept. of Mechanical Engineering, KAIST) taeho@kaist.ac.kr

ABSTRACT

In this paper, molecular dynamics simulations are performed to analyze the adhesion between a diamond mould and a copper substrate in diamond nanoimprint lithography. The diamond nanoimprint lithography process is simplified as punch-type nanoindentation. The copper substrates are assumed to be monocrystalline and defect free and consist of 22500~80000 atoms depending on their dimension. The diamond moulds consist of 916 or 2414 atoms, which is assumed to be rigid. The consistent results for the maximum normal force and the adhesion force are obtained regardless of the size of substrates and the adhesion hysteresis is shown in all cases. It is found that the friction acting on the sidewalls of the mould affects the adhesion significantly when the mould is released from the substrate.

Keywords : adhesion(접착), molecular dynamics simulation(분자동역학 시뮬레이션), diamond nanoimprint lithography(다이아몬드 나노임프린트 리소그래피)

1. 서 론

나노미터 스케일의 구조물 및 기구의 제작은 일반적으로 리소그래피(lithography)와 식각(etching) 공정을 필요로 한다. 지금까지 보고된 여러 가지 리소그래피 방법 중, 1990년대 중반에 Chou 그룹^(1,2)이 제안한 나노임프린트 리소그래피(nanoimprint lithography) 방법이 최근 각광받고 있다. 나노임프린트 방법은 나노 패턴이 각인된 몰드(mould)로 모재(substrate)위의 고분자 소재인 레지스트(resist)를 눌러 레지스트에 패턴을 전사하는 방법이다. 이 방법은 광리소그래피(optical lithography) 방법으로 구현하기에는 한계가 있는 100nm 이하의 선폭을 손쉽게 구현할 수 있으며, 동일한 몰드를 이용하여 나노구조물 및 패턴을 반복적으로 전사할 수 있기 때문에 기존의 방법에 비해 적은 비용으로 대량생산이 가능하다는 장점이 있다.

나노임프린트 리소그래피 방법에서 몰드

와 레지스트는 필연적으로 물리적 접촉을 하기 때문에 몰드와 레지스트 사이의 접착력(adhesion force)에 의해 레지스트에 전사된 패턴이 파괴될 수 있으며, 심할 경우 몰드 자체가 파괴될 수도 있다. Hirai^(3,4) 등은 나노임프린트 리소그래피 실험 후 다이아몬드 몰드가 파괴되거나 PMMA 폴리머 레지스트에 전사된 패턴이 파괴되는 현상을 보고하였으며, 패턴의 종횡비(aspect ratio)가 클수록 이러한 현상이 더 심하게 나타남을 보고하였다. 또한 FEM 해석을 통해 몰드 및 전사된 패턴 파괴의 주원인은 나노임프린트 공정 중에 발생하는 레지스트 내부의 응력 집중 및 레지스트와 몰드 사이의 마찰력이라고 보고하였다.

현재까지 많은 나노임프린트 리소그래피 방법이 제안되었다. 이중 Taniguchi⁽⁵⁾ 등은 다이아몬드 나노임프린트 리소그래피(diamond nanoimprint lithography) 방법을 제안하였다. 다이아몬드 나노임프린트 리소그래피 방법은 몰드의 내구성을 높이기 위해 강

도가 높은 다이아몬드로 몰드를 제작하여 레지스트에 패턴을 전사하는 방법이다. 이 방법은 다이아몬드 몰드를 이용하여 알루미늄 및 구리와 같은 금속 표면에도 직접적으로 패턴을 전사할 수 있다. 금속 표면위에 직접적으로 패턴을 전사시키는 방법은 기존의 나노임프린트 방법을 이용하여 금속표면에 패턴을 전사할 때 임프린트 후 적용되는 식각 공정을 생략할 수 있어 효율적이다. 본 연구에서는 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 다이아몬드 나노임프린트에서 다이아몬드 몰드와 금속재료 사이에 발생하는 점착 현상에 대해 알아보려고 한다.

분자동역학 시뮬레이션은 재료를 구성하고 있는 각각의 입자들에 운동방정식을 적용하여 시간에 따른 입자들의 운동을 묘사하는 방법이다. 지금까지 분자동역학을 이용한 접촉(contact) 및 나노압입(nanoindentation)에 관한 연구 중, 압자(indenter)와 재료사이의 점착에 관한 연구는 다음과 같다. Landman⁽⁶⁾ 등은 금속과 금속, 비금속과 비금속의 접촉현상을 분자동역학으로 시뮬레이션하여, jump to contact 현상과 adhesion hysteresis, connective neck의 형성을 보고하였다. Komvopoulos⁽⁷⁾ 등은 비금속 압자로 금속 표면을 압입하는 것을 시뮬레이션하였으며, 금속과 비금속간의 접촉의 경우 금속과 금속 접촉에 비해 점착력이 매우 작음을 보고하였다. Buldum⁽⁸⁾ 등은 압자의 형상이 jump to contact 현상에 미치는 영향에 대해 연구하였는데, 뾰족한 압자 팁의 경우 multiple jump to contact 현상이 일어난다고 보고하였다. Leng^(9,10) 등은 2D nano contact을 시뮬레이션하여 재료내부의 응력 분포를 구했으며, 뾰족하고 강체인 압자로 Cu 표면을 압입하기 위해 압자가 다가갈 때, 압자와 Cu 사이의 인력에 의해 Cu의 표면이 변형됨으로서 jump to contact 현상이 발생함을 보고하였다. Oliver⁽¹¹⁾ 등은 두개의 직육면체형상의 NaCl 결정체 사이의 접촉에서 jump to contact 현상이 일어날 때, 재료내부에 발생하는 변형률에 대해 연구하였다.

본 연구에서는 다이아몬드 나노임프린트 리소그래피 공정을 평평한 밀면을 갖는 다이아몬드 몰드로 구리 모재를 압입하는 나노압입으로 모델링하여 분자 동역학 시뮬레이션을 수행함으로써 몰드와 구리 모재 사이에 발생하는 나노 스케일에서의 점착에 대해 알아보려고 한다. 특히 몰드를 모재에서 떼어낼 때, 몰드의 옆면에 작용하는 마

찰력이 전체 점착력에 미치는 영향을 알아보려고 한다.

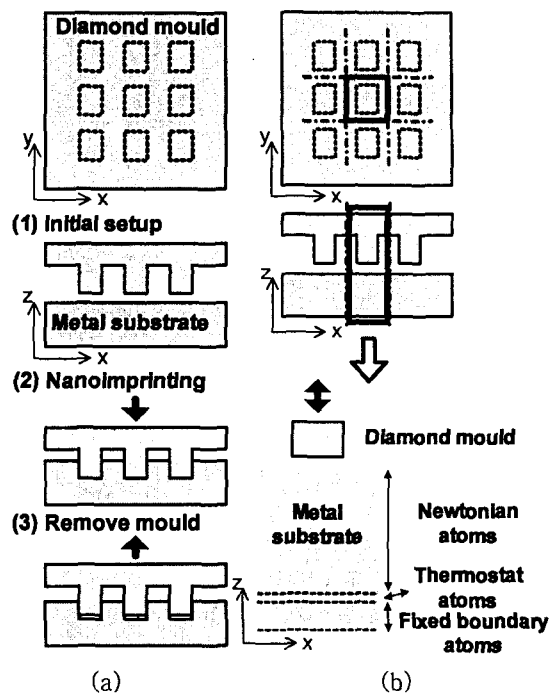


Fig. 1 Schematics of (a)diamond nanoimprint lithography and (b)simulation model

2. 해석 모델 및 방법

2.1 해석 모델

Fig. 1은 사각기둥이 규칙적으로 배열된 형상의 패턴을 갖는 다이아몬드 몰드로 구리 모재를 임프린트하는 다이아몬드 나노임프린트 리소그래피 공정의 개략도와 다이아몬드 나노임프린트 리소그래피 공정을 단순화하여 나노압입과정으로 모델링한 해석 모델을 보여준다. 다이아몬드 몰드의 내부에 위치한 하나의 사각기둥에 대해 주기적 경계 조건(periodic boundary condition)을 적용하여 모델링하였다.

Fig. 2는 탄소원자와 구리 원자로 이루어진 실제 해석 모델을 보여준다. 구리 모재는 단결정이며 결함이 없다고 가정하였으며, 크기에 따라 22500~80000개의 구리 원자들로 이루어져 있다. 다이아몬드 몰드는 크기에 따라 916~2414 개의 원자들로 이루어져 있으며, 다이아몬드 큐빅 구조를 갖고,

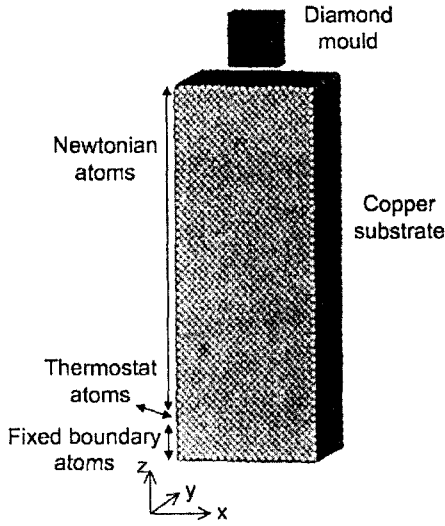


Fig. 2 Simulation model

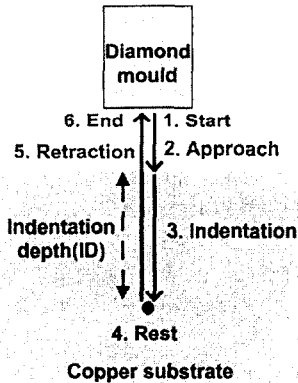


Fig. 3 Process of nanoindentation

변형이 없는 강체라 가정하였다. 구리 모재의 윗면은 (001) 면으로 자유 표면(free surface)이고, 밑면으로부터 $4a$ 까지의 원자들은 각 원자들의 위치를 고정시킨 고정경계 원자들이며, 그 위로 $2a$ 까지의 원자들은 서머스택 원자들이다. 여기서 a 는 FCC 격자 구조를 갖는 구리의 격자 상수(lattice parameter)이다. 서머스택 원자들의 속도를 매 시간스텝마다 스케일링함으로써, 초기 온도를 유지하였다.

Fig. 3은 나노압입 시뮬레이션에서 몰드가 움직이는 과정을 보여준다. 초기에 구리 표면 원자들의 평균 높이로부터 7\AA 떨어져 있던 다이아몬드 몰드는 접근 과정(approach

process) 동안 표면에 접근하고, 압입과정(indentation process) 동안 주어진 압입깊이(indentation depth) 만큼 모재를 압입한 후, 1ps 의 정지시간(rest time) 동안 정지해 있다. 정지시간 후에 리트렉션 과정(retraction process) 동안 초기 위치까지 되돌아온다. 몰드의 밑면에 있는 원자들의 원자 중심과 구리 표면에 있는 원자들의 평균적인 원자 중심까지의 거리가 하나의 탄소 원자와 하나의 구리 원자 사이의 상호작용력이 0이 되는 거리와 같을 때의 압입 깊이를 0 nm 라 정의하였다.

2.2 지배 방정식 및 수치 적분 방법

구리 모재의 고정 경계 원자들을 제외한 모든 원자들은 식(1)의 운동방정식을 따른다. 원자 i 에 작용하는 힘(F_i)은 식(2)과 같이 주변 원자들과의 상호작용력(F_{ij})의 합으로 주어진다. 주변 원자들과의 상호작용력은 원자들 사이의 상호작용을 묘사하는 포텐셜(u)로부터 구해지는데, 본 연구에서는 구리 원자와 구리원자 사이의 상호작용, 구리원자와 탄소원자 사이의 상호작용을 묘사하기 위해 경험적 쌍 포텐셜(empirical pairwise potential)인 모스포텐셜(Morse potential)을 사용하였다.

$$\vec{a}_i = \frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \frac{\vec{F}_i}{m_i} \quad (1)$$

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij}, \quad \vec{F}_{ij} = -\nabla u(r_{ij}) \quad \text{for } i \neq j \quad (2,3)$$

$$u(r_{ij}) = \lambda D \{ \exp[-2\alpha(r_{ij} - r_e)] - 2 \exp[-\alpha(r_{ij} - r_e)] \} \quad (4)$$

식(4)와 같은 모스포텐셜은 간단하고 계산시간이 적게 걸려 이와 유사한 여러 연구에서 많이 사용되어져왔다.⁽¹²⁻¹³⁾ 모스포텐셜에서 D , α , r_e 는 각각 응집 에너지(cohesion energy), 탄성계수(elastic modulus), 두 원자의 평형 상태에서의 원자 중심간 거리에 상응하는 상수로서 재료따라 결정된다. 본 연구에서는 Ito⁽¹³⁾ 등에 의해 제안된 모스포텐셜 상수를 사용했으며, 이는 표 1에 정리되어 있다. 이때 λ 는 응집에너지 상수이다. 계산시간의 단축을 위해 포텐셜 절단 거리(cutoff radius)는 $2.5r_e$ 로 하였으며, Cell list 방법⁽¹⁴⁾을 사용하였다. 속도 Verlet 알고리즘⁽¹⁴⁾을 이용하여 원자들의 운동방정식을 적분하였으며, 시간간격은 3.97 fs 로 하였다.

Table 1 Morse potential parameters

| Atom-Atom | D (eV) | α (\AA^{-1}) | r_e (\AA) |
|-----------|----------|--------------------------------|------------------------|
| Cu-Cu | 0.3429 | 1.3588 | 2.866 |
| C-Cu | 0.1000 | 1.7000 | 2.200 |

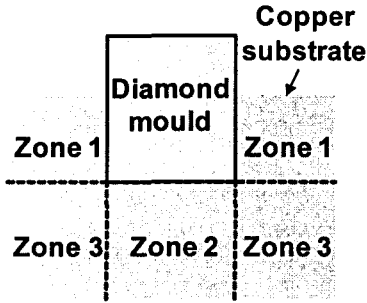


Fig. 4 Three zones in copper substrate

2.3 수직력 및 점착력의 계산

수직력은 구리 원자들에 의해 몰드에 작용하는 z 방향 힘의 합으로 정의하였고 점착력은 리트랙션 과정 동안 발생하는 최소 수직력의 크기로 정의하였다. 시뮬레이션 동안 몰드에 작용하는 수직력을 자세히 알아보기 위해 Fig. 4와 같이 구리 모재를 3개의 영역으로 구분하여 각 영역에 포함된 구리 원자들에 의해 몰드에 작용하는 수직력을 각각 계산하였다. 모재 내부에서 영역 1은 몰드의 밑면보다 +z 방향으로 더 높은 위치에 있는 영역이고, 영역 2는 몰드 아래의 영역을 가리키며, 영역 3은 영역 1과 2를 제외한 나머지 영역을 가리킨다. 각 영역에 위치한 각각의 구리 원자들에 의해 몰드에 작용하는 수직력을 각각 F_{Z1} , F_{Z2} , F_{Z3} 라 하였고, 이 수직력들의 합은 F_{normal} 이 된다.

3. 결과 및 토의

시뮬레이션 조건 및 시뮬레이션에서 사용한 2개의 몰드와 3개의 구리 모재의 크기

는 각각 표 2와 3에 나타나있다.

Fig. 5(a)는 몰드1로 각각의 구리 모재를 압입했을 때, 몰드에 작용하는 수직력을 보여준다. 최대 수직력은 95 nN, 점착력은 약 60 nN정도로 구리 모재의 크기에 상관없이 일관된 결과를 얻었다. 압입 깊이가 약 0.5 nN 부근에서 압입 깊이에 따른 수직력의 변화율이 변하는데, 이는 재료 내부의 결함 발생에 의한 것으로 생각된다. Fig. 6(b)는 몰드 2로 각 구리 모재를 압입한 경우, 몰드2에 작용하는 수직력을 보여준다. 몰드2로 압입한 경우, 모재와의 접촉면적의 증가로 최대 수직력은 170 nN, 점착력은 90 nN으로 몰드 1의 경우보다 크게 나타났다. 몰드 1의 경우처럼 구리 모재의 크기에 상관없이 일관된 결과를 얻을 수 있었으며, 압입 깊이가 약 0.7 nN인 경우에 압입 깊이에 따른 수직력의 변화율이 크게 감소하였다. 또한 압입시 수직력의 진동이 발생했는데, 이는 몰드와 구리 표면 사이의 상호작용에 의한 것이다.

Table 2 Simulation conditions

| | |
|----------------------------------|---------|
| Approach speed | 10 m/s |
| Indentation speed | 10 m/s |
| Indentation depth | 1.5 nm |
| Rest time | 1.0 ps |
| Initial temperature of substrate | 300 K |
| Time step | 3.97 fs |

Table 3 Dimensions of (a) diamond moulds and (b) copper substrates

| Diamond mould | Dimensions (nm) | Number of atoms |
|---------------|-----------------------------|-----------------|
| Mould 1 | $1.0 \times 2.0 \times 2.5$ | 916 |
| Mould 2 | $2.5 \times 2.0 \times 2.5$ | 2414 |

(a)

| Copper substrate | Dimensions (nm) | Number of atoms |
|------------------|------------------------------|-----------------|
| Substrate 1 | $5.4 \times 5.4 \times 9.0$ | 22500 |
| Substrate 2 | $5.4 \times 5.4 \times 18.0$ | 45000 |
| Substrate 2 | $7.2 \times 7.2 \times 9.0$ | 80000 |

(b)

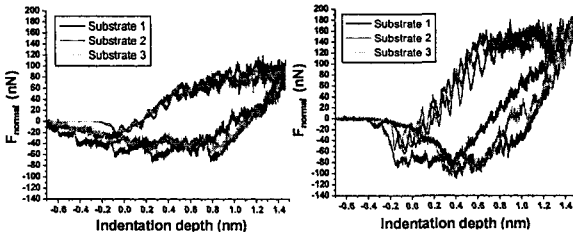


Fig. 5 Normal force versus indentation depth curves when (a) mould 1 and (b) mould 2 is pressed into substrate 1, 2, and 3

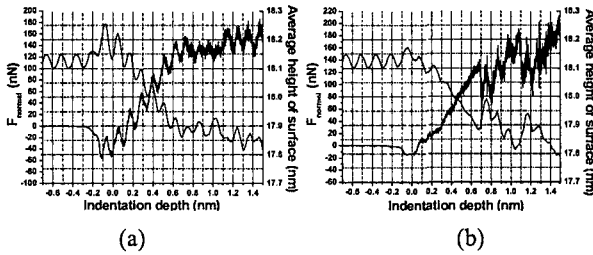


Fig. 6 Normal force versus and average height of substrate surface versus indentation depth curves when mould 2 is pressed on substrate 3 : (a) $\lambda=1$, (b) $\lambda=0.25$

Fig. 6(a)는 몰드 2로 모재 3을 압입할 때, 압입 깊이에 따른 수직력 및 구리 표면 원자들의 평균 높이를 보여준다. 초기에 구리 표면은 작은 진폭으로 진동하고 있다가 몰드가 구리 표면의 초기 평균 위치로부터 0.3 nm 떨어진 지점까지 다가갔을 때, 몰드와 표면사이의 강한 인력으로 인해 수직력이 급격히 증가한다. 몰드가 구리 표면에 약 0.1 nm 까지 접근하면, 몰드와 구리 표면사이의 강한 인력으로 구리 표면이 변형되어 평균 위치가 약 0.1 nm 정도 증가하므로, 몰드 밀면과 구리 표면이 접촉한다. 이러한 현상은 기존의 많은 연구에서 보고되었던 jump to contact 현상이다. 두 면이 접촉한 후, 인력에 의해 두 면 사이의 거리가 좀더 가까워지면 몰드의 밀면에 있는 원자들과 구리 표면의 원자들 사이에는 반발력이 작용하게 되고, 이 반발력과 표면 변형에 의한 복원력에 의해 두 면 사이의 거리는 다시 멀어지게 된다. 접근 과정 동안에 발생하는 몰드와 구리 표면 사이의 이러한 상호작용으로 인해 구리 표면은 진동하게 되고 따라서 몰드에 작용하는 수직력도 진동하게 된다. 하지만 몰드와 구리 사이의 응착력을 1/4로 감소시킨 경우에는 접근 과정시 두 면 사이의 인력이 작아서 표면의 변형이나

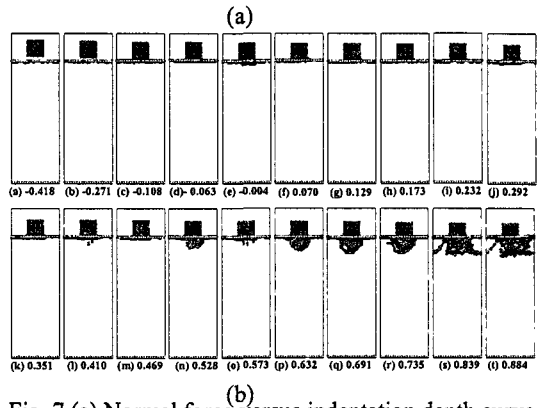
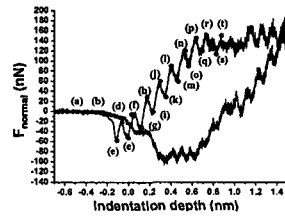


Fig. 7 (a) Normal force versus indentation depth curve and (b) snapshots for defects in substrate when mould 2 is pressed into substrate 3

이로인한 표면 진동이 나타나지 않음을 알 수 있다. 또한 구리 표면과의 접촉면적이 작은 몰드1의 경우도 이러한 진동은 크게 나타나지 않았다.

Fig. 7은 몰드 2로 모재 3을 압입했을 때 수직력의 변화와 수직력의 급격한 변화가 일어나는 압입깊이에서의 모재 내부의 결함을 보여준다. 모재 내의 결함을 가시화하기 위해 원자 이웃수(atomic coordination number) 방법을 사용하였다. 구리의 경우 FCC 격자 구조로 이루어져 있으므로 기본적으로 이웃 원자수는 12이다. 하지만 표면에 있는 원자들이나 공동(void), 전위(dislocation) 같은 결함의 주변에 위치한 원자들의 이웃 원자수는 12가 될 수 없다. 원자 이웃 원자수가 12가 아닌 구리 원자들을 Fig. 7(b)에 나타내었다. 압입 깊이가 0.469 nm일 때 까지 수직력은 크게 진동하며 증가하지만 구리 모재 내부에서 뚜렷한 결함은 보이지 않는다. 하지만 압입깊이에 따른 수직력의 변화율이 급격히 감소하기 시작하는 압입깊이인 약 0.6 nm 이후 부터는 모재 내부에서 결함이 발생하여, 압입깊이가 깊어짐에 따라 결함이 발생한 영역이 몰드 아래서부터 그 주변으로 점점 넓어짐을 볼 수 있다. 즉, 접근 과정동안 몰드와 구리 표면 사이의 상호작용으로 인한 jump to

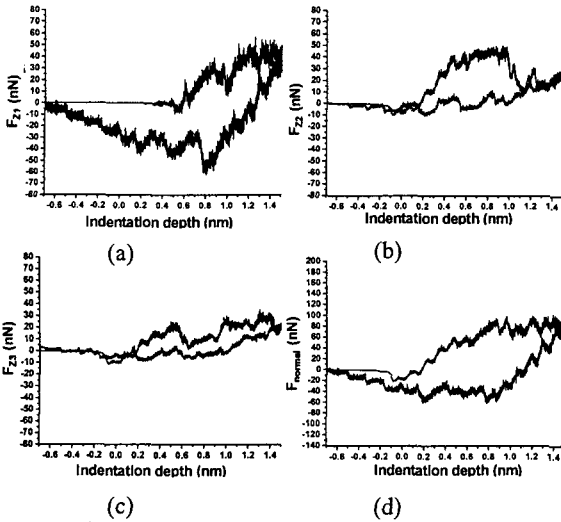


Fig. 8 Normal force versus indentation depth when mould 1 is pressed into substrate 3:
(a) F_{Z1} , (b) F_{Z2} , (c) F_{Z3} , (d) F_{normal}

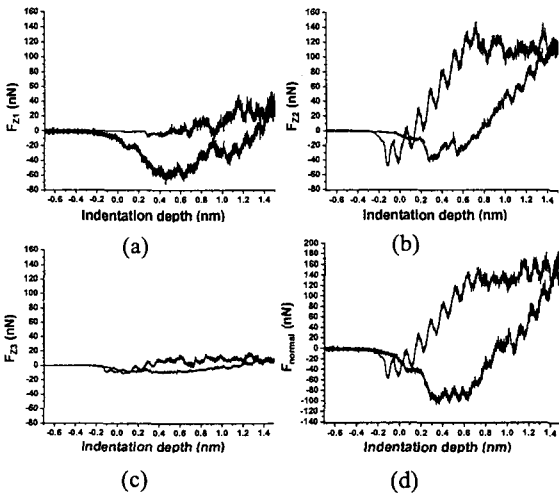


Fig. 9 Normal force versus indentation depth when mould 2 is pressed into substrate 3:
(a) F_{Z1} , (b) F_{Z2} , (c) F_{Z3} , (d) F_{normal}

contact 현상 및 표면의 진동 현상이 모재 내부에 결함을 발생시키지는 않으며, 압입에 의한 모재 내부에 결함이 충분히 발생하면 압입 깊이에 따른 수직력의 변화율이 감소한다.

Fig. 8(a)~(d)는 몰드 1로 시편 3을 압입할 때, 몰드에 작용하는 F_{Z1} , F_{Z2} , F_{Z3} , F_{normal} 를 각각 보여준다. 압입 깊이에 따라 F_{Z1} 은 증가하며, F_{Z2} 는 증가하다가 압입깊이가 1.0nm 일때 급격히 감소한다. 몰드를 모재로부터 떼어낼 때, 둘 사이의 접촉은 대부분 F_{Z1} 에

의한 것임을 알 수 있다. F_{Z3} 은 압입깊이에 따라 증가하기는 하지만 전과정에 걸쳐 전체 수직력 F_{normal} 에 미치는 영향은 매우 작다. Fig. 9(a)~(d)는 몰드 2로 시편 3을 압입할 때, 몰드에 작용하는 F_{Z1} , F_{Z2} , F_{Z3} , F_{normal} 를 각각 보여준다. 압입과정에서 압입 깊이에 따라 F_{Z1} 은 증가하기는 하지만 F_{Z2} 에 비해 상대적으로 작으며, 몰드에 작용하는 수직력은 대부분 F_{Z2} 에 의한 것이다. 하지만 몰드를 떼어낼 때는 몰드 1의 경우와 마찬가지로 전체 수직력 F_{normal} 에 대해 F_{Z2} 보다는 F_{Z1} 의 영향이 크게 나타났다. 전 과정동안 수직력에 대한 F_{Z3} 의 기여는 미미하다. 즉, 몰드의 옆면에 인접한 구리 원자들에 의해 몰드에 작용하는 수직력(F_{Z1})은 압입과정에서 압입 깊이에 따라 증가하며, 특히 몰드를 모재로부터 떼어낼 때 몰드에 작용하는 점착력에 큰 영향을 미친다.

4. 결론

본 연구에서는 다이아몬드 나노임프린트 리소그래피에서 발생하는 점착에 대해 분자동역학적 연구를 수행하였다. 시뮬레이션 결과, 몰드가 모재에 접근함에 따라 몰드와 구리 표면 사이의 상호작용으로 인한 jump to contact 현상 및 표면의 진동 현상이 발생할 수 있으나, 모재 내부에 결함을 발생시키지는 않는다. 압입이 진행됨에 따라 모재 내부에 결함이 발생하여 발전함에 따라 수직력의 변화율은 감소한다. 몰드의 크기에 상관없이 몰드의 옆면에 인접한 구리 원자들에 의해 몰드에 작용하는 수직력은 압입과정에서 압입 깊이에 따라 증가하며, 몰드를 모재로부터 떼어낼 때 몰드에 작용하는 점착력에 큰 영향을 미친다.

후기

본 연구는 과학기술부가 주관하는 21세기 프론티어연구개발사업의 일환인 나노메카트로닉스기술개발사업단의 연구비 지원(04K1401-01211)에 의해 수행되었습니다.

참고문헌

1. Stephen Y. Chou, Peter R. Krauss, Preston J. Renstrom, "Imprint of sub-15 nm vias and

- trenches in polymers," *Applied Physics Letters*, Vol. 67, No.21, pp.3114-3116, 1995.
2. Stephen Y. Chou, Peter R. Krauss, Preston J. Renstrom, "Nanoimprint lithography," *Journal of Vacuum Science and Technology B*, Vol. 14, No.6, pp.4129-4133, 1996.
 3. Yoshihiko Hirai, Satoshi Yoshida, Nobuyuki Takagi, Yoshio Tanaka, Hideki Yabe, Kei Sasaki, Hiroaki Sumitani and Kazuhiro Yamamoto, "High Aspect Pattern Fabrication by Nano Imprint Lithography Using Fine Diamond Mold," *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 42, Part1, No.6B, pp.3863-3866, 2003.
 4. Yoshihiko Hirai, Satoshi Yoshida, and Nobuyuki Takagi, 2003, "Defect analysis in thermal nanoimprint lithography," *J. Vac. Sci. Technol. B*, Vol. 21, No. 6, pp.2765-2770, 2003.
 5. Jun Taniguchi, Yuji Tokano, Iwao Miyamoto, Masanori Komuro, Hiroshi Hiroshima, "Diamond nanoimprint lithography," *Nanotechnology*, Vol. 13, pp.592-596, 2002.
 6. Uzi Landman, W. D. Luedtke and Eric M. Ringer, "Atomistic mechanisms of adhesive contact formation and interfacial processes," *Wear*, Vol. 153, pp.3-30, 1992.
 7. K. Komvopoulos and W. Yan, "Molecular dynamics simulation of single and repeated indentation," *J. Appl. Phys.*, Vol. 82, No. 10 pp.4823-4830, 1997.
 8. A. Buldum and S. Ciraci, "Contact, nanoindentation, and sliding friction," *Physical Review B*, Vol. 57, No. 4, pp.2468-2476, 1998.
 9. Leng Yongsheng, Hu Yuanzhong, Zheng Linqing, "Adhesive Contact of Flat-Ended Wedges: Theory and Computer Experiments," *Trans. of the ASME Journal of Tribology*, Vol. 121, pp.128-132, 1999.
 10. Yongsheng Leng, Guiping Yang, Yuanzhong Hu, Linqing Zheng, 2000, "Computer experiments on nano-indentation: A molecular dynamics approach to the elasto-plastic contact of metal copper," *Journal of Materials Science*, Vol. 35, pp.2061-2067, 2000.
 11. Oliver Miesbauer, Martin Gotzinger and Wolfgang Peukert, "Molecular dynamics simulations of the contact between two NaCl nano-crystals: adhesion, jump to contact and indentation," *Nanotechnology*, Vol. 14, pp.371-376, 2003.
 12. L.C. Zhang, K.L. Johnson and W.C.D. Cheong, "A molecular dynamics study of scale effects on the friction of single-asperity contacts," *Tribology Letters*, Vol. 10, No. 1-2, pp.23-28, 2001.
 13. K. Maekawa, A. Itoh, 1995, "Friction and tool wear in nano-scale machining-a molecular dynamics approach," *Wear*, Vol. 188, pp.115-122, 1995.
 14. M.P.Allen, D.J.Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Chap. 3, pp.80-82, pp.149-152, Oxford University Press, Oxford, 1987.