

강체평면에 흡착접촉하는 반구형돌기의 유한요소모델링

조 성 산[†] · 박 승 호^{*}

(2002년 4월 19일 접수, 2002년 8월 14일 심사완료)

Finite Element Modeling of a Hemispherical Asperity Adhesively Contacting the Plane Surface of Semi-Infinite Rigid Body

Sung-San Cho and Seungho Park

Key Words : Adhesive Contact(흡착접촉), Finite Element Analysis(유한요소해석), Friction(마찰), Adhesion Hysteresis(흡착 히스테리시스), Lennard-Jones Potential(레너드-존스 포텐셜)

Abstract

Finite element technique considering adhesive forces is proposed and applied to analyze the behavior of elastic hemispherical asperity adhesively contacting the plane surface of semi-infinite rigid body. It is demonstrated that the finite element model simulates interfacial phenomena such as jump-to-contact and adhesion hysteresis that cannot be simulated with the currently available adhesive contact continuum models. This simulation also provides valuable information on contact pressure, contact region and stress distributions. This technique is anticipated to be utilized in designing a low-adhesion surface profile for MEMS/NEMS applications since various contact geometries can be analyzed with this technique.

1. 서론

고체표면 사이에는 분자간력, 정전기력, 모세관력 등에 의해 발생하는 흡착력(adhesive force)이 작용한다. 고체간 접촉에서 접촉물체의 크기가 작고 표면이 매끄럽고 접촉하중이 작을수록 흡착력의 영향은 커진다. 흡착력의 영향으로 관찰되는 현상에는 MEMS 또는 하드디스크와 슬라이더 사이에서 발생하는 stiction, 그리고 AFM tip 의 jump-in 및 pull-off 현상 등이 있다.⁽¹⁻³⁾

연속체 역학에 근거한 기존의 대표적인 흡착접촉모델에는 강체 접촉을 고려한 Bradley 모델과 탄성체 접촉을 고려한 JKR(Johnson-Kendall-Roberts), DMT(Deraguin-Muller-Toporov), MD (Maugis-Dugdale) 모델 등이 있다. Bradley 모델을 이용하면 두개의 강구를 분리시키는데 필요한 힘을 산출할 수 있으며, 탄성체 흡착접촉모델을 이용하면

분리력(pull-off force) 외에도 접촉력과 접촉영역의 크기를 산출할 수 있다. 탄성체 흡착접촉모델 중에서 JKR 모델은 상대적으로 유연한 고체간 흡착접촉의 경우에 적합하고, DMT 모델은 비교적 강성이 큰 고체간 흡착접촉의 경우에 적합하다. MD 모델은 JKR 과 DMT 모델이 적용되는 경우를 포함한 다양한 강성의 고체에 적용할 수 있다.⁽¹⁾

기존의 탄성체 흡착접촉모델 들은 구와 구 또는 구와 무한평면의 흡착접촉의 경우에 대해 개발되었으며, 접촉표면형상이 다른 경우에는 적용이 불가능하다. 예를 들어, 하드디스크에서 stiction 을 방지하기 위해 사용되는 링 형상 bump⁽³⁾의 흡착접촉을 해석하는데 적용할 수 없다. 또한 기존의 흡착접촉모델은 Hertz 접촉모델을 근간으로 개발되었으므로 적용범위도 제한된다.

흡착력을 줄일 수 있는 표면형상 설계기술은 MEMS/NEMS 로 총칭되는 초미세시스템의 성능 및 내구성을 향상시킬 수 있는 방안의 하나이다.⁽²⁾ 그러나 기존의 흡착접촉모델은 구 형상에 국한되어 있으므로 다양한 표면형상 설계에 적용하는데 어려움이 있다. 따라서, 본 논문에서는 흡착효과를 감안한 유한요소해석기법을 개발하고, 이 기법을

[†] 책임저자, 회원, 홍익대학교 기계시스템디자인공학과
E-mail : sscho@wow.hongik.ac.kr
TEL : (02)320-1674 FAX : (02)322-7003

^{*} 회원, 홍익대학교 기계시스템디자인공학과

적용하여 무한평면에 흡착접촉하는 반구형 탄성돌기의 거동을 해석하였다.

2. 모델링

2.1 흡착력

반무한체 표면에서 거리 D 만큼 떨어진 위치에 있는 원자 1 개를 고려한다. 반무한체를 구성하는 원자와 떨어져 있는 원자 사이의 상호작용은 식 (1)에 주어진 Lennard-Jones potential 에 따른다고 가정한다.

$$w(r) = \epsilon \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

여기서 ϵ 는 최소에너지, r 은 두 원자 사이의 간격, r_0 는 평형 간격(equilibrium separation)이다. 반무한체가 거리 D 만큼 떨어진 위치에 있는 하나의 원자에 작용하는 힘 $\hat{f}(D)$ 는 식 (1)을 이용하여 표현하면 식 (2)로 주어진다.⁽⁴⁾

$$\hat{f}(D) = \frac{\pi \rho_1 \epsilon r_0^2}{5} \left[\left(\frac{r_0}{D} \right)^{10} - 5 \left(\frac{r_0}{D} \right)^4 \right] \quad (2)$$

여기서, ρ_1 은 반무한체를 구성하는 원자의 밀도이다. 작용력 $\hat{f}(D_0) = 0$ 을 만족시키는 거리 D_0 를 이용하여, 식 (2)에 D 대신 $D + D_0$ 를 대입하여 식 (3)으로 주어진 새로운 작용력 $f(D)$ 를 정의한다.

$$f(D) = \frac{\pi \rho_1 \epsilon r_0^2}{5} \left[\left(\frac{r_0}{D + D_0} \right)^{10} - 5 \left(\frac{r_0}{D + D_0} \right)^4 \right] \quad (3)$$

작용력 f 는 $f(0) = 0$ 을 만족시키며, $D < 0$ 일 때는 척력(repulsive force), $D > 0$ 일 때는 인력(attractive force)을 작용시킨다. 즉, 식 (3)에 사용된 D 는 연속체 접촉역학에서 인접한 두 고체 사이의 간격에 해당되는 반무한체와 원자간의 간격으로 간주할 수 있다.

Fig. 1 은 실리콘의 경우 ($\rho = 49.92 \text{ atoms/nm}^3$, $\epsilon = 5.191 \times 10^{-19} \text{ J}$, $r_0 = 0.229505 \text{ nm}$)⁽⁵⁾에 대해 간격 D 와 인력 f 의 관계를 보여준다. 최대 인력은 간격 0.03nm 부근에서 발생하며, 간격 0.56nm 이상에서는 최대인력의 1%보다 적은 인력이 작용한다. 즉, 식 (3)으로 표현되는 인력은 매우 근접한 위치에서 중요한 의미를 갖는 힘이다.

흡착력을 무시한 연속체 접촉역학(이후 기계적 접촉으로 칭함)에서 접촉하는 두 물체 사이의 상호작용은 $D < 0$ 일 때만 존재하며, 이 상호작용은

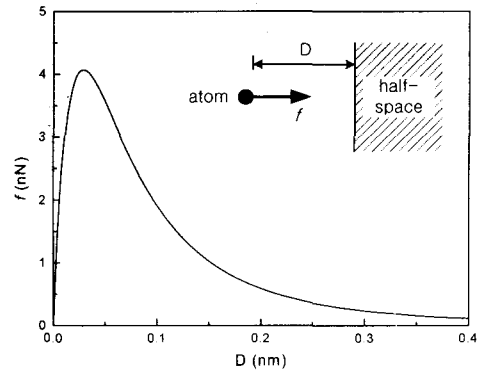


Fig. 1 Attractive forces acting on a Si atom by a Si half-space

식 (3)의 척력에 의해 발생하는 접촉력이다. 따라서, 유한요소 흡착접촉모델을 개발하기 위해서는 기존의 유한요소모델에 $D > 0$ 일 때의 인력에 의해 발생하는 흡착력을 포함시키면 된다.

반무한체 표면에서 간격 D 만큼 떨어진 위치에 있는 원자밀도 ρ_2 의 단위체적 물체에 반무한체가 작용하는 힘 $B(D)$ 는 식 (4)로 주어진다.

$$B(D) = \rho_2 f(D) = \frac{\pi \rho_1 \rho_2 \epsilon r_0^2}{5} \left[\left(\frac{r_0}{D + D_0} \right)^{10} - 5 \left(\frac{r_0}{D + D_0} \right)^4 \right] \quad (4)$$

작용력 $B(D)$ 는 단위체적 물체의 구성원자 각각에 작용하는 힘을 합산한 것이므로 체적력(body force)에 해당된다. 따라서, 작용력 $B(D)$ 를 체적력으로 간주하여 유한요소 지배방정식에 포함시키면 유한요소 흡착접촉모델을 개발할 수 있다.

2.2 유한요소모델

반무한체 표면의 반구형 돌기(hemispherical asperity)가 다른 반무한체 표면과 접촉하는 경우를 고려한다. 두 반무한체 표면은 평행한 평면으로 가정한다. Fig. 1 에 의하면 두 반무한체 사이의 간격이 넓으면 반무한체 사이의 작용력은 미미하며, 흡착력은 반구형 돌기와 무한 평면의 접촉에 주로 영향을 미친다. 따라서, 문제의 단순화를 위해 무한 평면과 반구형 돌기의 흡착접촉을 고려하고, 기존의 접촉모델에서처럼 모든 변형은 반구형 돌기에서 발생하는 것으로 가정한다.

Fig. 2 는 반지름 R 인 반구형 탄성돌기와 무한 평면을 보여준다. 돌기 중심과 평면 사이의 거리는 h 로 표시한다. 돌기에 작용하는 힘 F 는 반무

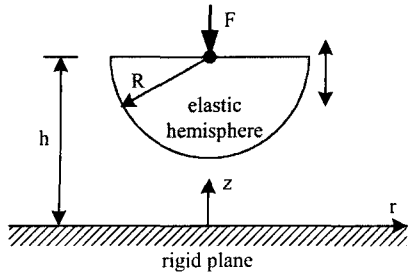


Fig. 2 Schematic of contact geometry

한체가 돌기에 작용하는 힘에 대하여 돌기를 현 위치에 유지시키는데 필요한 힘(이후 돌기 작용력으로 칭함)을 표시한다. 일반적으로 접촉해석에서 압축력을 양의 부호로 표시하므로, 본 논문에서도 돌기를 평면에 밀착시키는 방향의 힘을 양의 부호로 표시한다. 즉, 돌기 작용력이 양($F > 0$)이면 반무한체가 돌기에 작용하는 합력이 척력이고, 반대로 음($F < 0$)이면 작용 합력이 인력이다.

유한요소격자는 4 절점 등매개변수 축대칭 요소로 구성된 돌기와 강체평면으로 처리한 무한평면으로 구성하였다. 무한평면과 접촉하는 돌기 표면의 원자에 작용하는 인력은 평면으로부터의 거리에 따라 급격히 변화하므로(Fig. 1), 돌기 표면부는 매우 작은 유한요소($0.025\text{nm} \times 0.025\text{nm}$)로 구성하였다. 실리콘 돌기를 가정하고 탄성계수 190GPa 과포와송비 0.28 을 사용하였으며, 크기는 $R = 10, 20, 40\text{nm}$ 의 3 가지 경우를 고려하였다. 미끄럼이 없는 접촉의 경우 마찰은 해석결과에 미미한 영향을 미치므로⁽⁶⁾ 본 해석에서는 마찰을 무시하였다.

무한평면과 간격 3nm 떨어져 있던 돌기가 무한평면과의 간섭깊이 2nm 가 될 때까지 접근하여 접촉한 후 다시 분리되는 과정을 해석하였다. 돌기의 초기위치에서 돌기 작용력은 매우 미미하며, 돌기의 최대 접근위치는 흡착력을 무시해도 비교적 큰 접촉변형이 발생하는 조건이다. 돌기가 이동하는 동안 돌기는 준평형상태에 있는 것으로 가정하고 증분방식으로 해석하였다. 돌기가 접촉했다가 분리되는 과정에서 발생하는 흡착 히스테리시스(adhesion hysteresis)를 고려하기 위해 대변형 해석을 수행하였다.

3. 결과 및 고찰

3.1 흡착접촉력

Fig. 3 은 돌기가 접촉했다 분리되는 동안 돌기

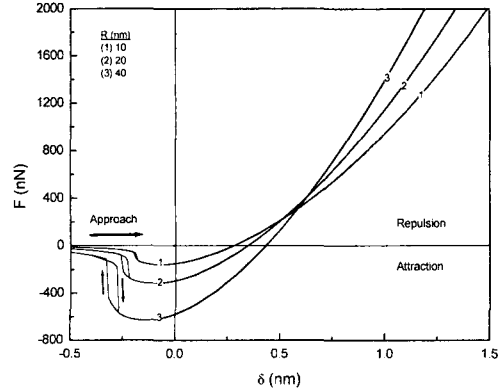


Fig. 3 Variation of adhesive contact force during approach and recession

위치 $\delta (= R - h)$ 에 따른 돌기 작용력 F 의 변화를 보여준다. 기계적 접촉의 경우, $\delta = 0$ 는 접촉이 개시되는 위치, 음의 δ ($\delta < 0$)는 돌기와 평면이 분리되어 있는 상황, 그리고 양의 δ ($\delta > 0$)는 돌기와 평면이 접촉한 상황을 나타낸다. 돌기가 평면에 접근하는 것은 수평축에서 우측으로 이동하는 것에 해당된다.

Fig. 3 에서 $R = 40\text{nm}$ 의 경우, 평면에서 멀리 떨어진 돌기에는 미미한 인력이 작용한다. 돌기가 평면과 접촉하지 않은 상태에서 평면에 접근할수록 인력이 점진적으로 증가한다. 접근하던 돌기는 $\delta = -0.27\text{nm}$ 부근에서 순간적으로 평면에 달라붙으며, 이때 인력도 순간적으로 증가한다. 돌기가 평면에 달라붙은 상태에서 돌기를 평면에 더욱 접근시키면 인력이 더 증가하지만, 인력의 증가율은 감소한다. 증가하던 인력은 $\delta = -0.14\text{nm}$ 부근에서 최대($F = -629.4\text{nN}$)가 되고, 그 이후 돌기가 접근할수록 인력의 크기는 감소한다. 감소하던 인력은 $\delta = 0.43\text{nm}$ 부근에서 척력으로 바뀐다. 이 결과는 외력이 없어도 흡착력에 의해 돌기가 반무한체 표면에 달라붙을 수 있음을 나타낸다. 그 이후 돌기를 더 접근시키면 척력인 돌기 작용력의 크기가 증가한다. 접촉된 돌기를 평면에서 분리시키는 동안에 돌기 작용력은 $\delta = -0.27\text{nm}$ (접근할 때 최초 접촉이 발생한 지점)까지는 접근할 때와 동일하게 변화한다. 그러나, $\delta = -0.27\text{nm}$ 를 통과하여 $\delta = -0.32\text{nm}$ 가 될 때까지 접촉은 계속 유지되며, $\delta = -0.33\text{nm}$ 부근에서 순간적으로 분리된다. 돌기가 분리된 후에는 돌기 위치와 돌기작용력의 관계는 접근할 때와 동일하다.

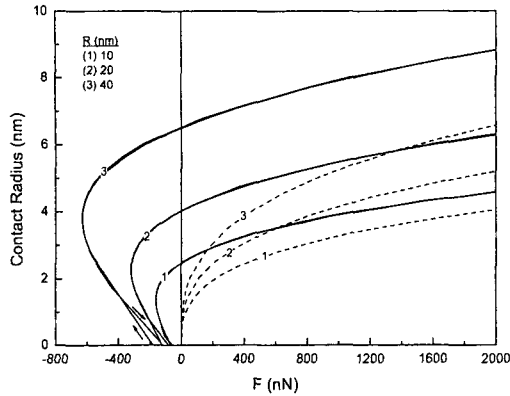


Fig. 4 Load-contact radius curve for adhesive(solid lines) and mechanical(dash lines) contacts

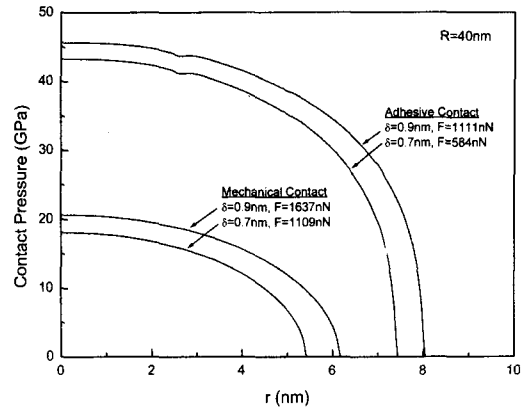


Fig. 5 Contact pressure

접근과정에서 순간적으로 접촉(jump-to-contact) 되고 분리과정에서도 순간적으로 분리되는 현상, 그리고 접촉이 형성되고 분리되는 돌기의 위치가 서로 다른 현상은 AFM tip의 jump-in 및 pull-off가 순간적으로 발생하고 또한 발생 위치가 다른 것과 동일한 현상이다. 이 현상은 기존의 JKR, DMT, MD 모델로는 설명이 안 되는 현상이다. 한편, Greenwood⁽⁷⁾는 탄성흡착접촉의 수치해석 연구에서 이 현상의 발생원인을 다음과 같이 설명하였다. 간격 변화에 따른 돌기작용력의 변화는 접촉이 발생하고 분리되는 간격 근처에서 S 형상을 하고 있다. 따라서, 작용력 선도의 접선이 수직이 될 때 순간적으로 접촉되고 또한 순간적으로 분리된다. 또한 돌기가 접근할 때와 분리될 때 접선이 수직이 되는 돌기의 위치가 다르므로 접촉형성 위치와 분리 위치가 다르게 된다. 즉, Greenwood의 설명은 돌기작용력이 S 형상으로 변화하므로 동일 간격에서 2개의 해가 존재하며, 2개의 해 중에서 하나의 해를 선정하는 기준은 돌기가 초기에 접촉 또는 분리되어 있었느냐에 따라 발생하는 변형상태의 차이이다. 본 연구에서 개발된 유한요소 흡착 접촉모델은 대변형 모델을 사용함으로써 돌기의 변형상태에 따른 흡착력의 변화를 고려하였기 때문에 접근과 분리과정에서 발생하는 돌기작용력의 차이를 발생시킬 수 있었고, 따라서 흡착 히스테리시스를 재현할 수 있었다.

R = 10, 20nm의 경우에도 R = 40nm의 경우와 정성적으로 동일한 결과를 보여준다. 단지, 돌기의 반경이 작아질수록 접촉발생 위치와 분리위치 모두 평면에 더 가까워지며, 두 위치의 차이도 줄어들어 흡착 히스테리시스 효과가 약해진다. 또한

돌기의 반경이 작아질수록 흡착력의 최대값이 감소한다. 즉, 돌기가 커질수록 평면에 흡착된 돌기를 분리시키는데 더 많은 힘이 필요하다.

3.2 접촉면적과 압력

Fig. 4는 접촉반경과 흡착 접촉력의 관계를 보여준다. 돌기가 접근하면서 돌기작용력은 인력이 증가하다가 감소하여 척력으로 변화하지만 접촉면적은 지속적으로 증가한다. 평면에 자연적으로 흡착된(F = 0) 돌기의 접촉면적은 돌기가 커질수록 넓어진다. Fig. 4는 흡착력의 영향을 고찰하기 위해 기계적 접촉(점선)의 결과도 함께 보여준다. 동일한 접촉하중이 작용할 때 흡착력에 의해 접촉면적이 넓어진다. 또한 흡착력에 의한 접촉면적 증가량도 돌기가 커질수록 증가한다. 이상의 결과는 기존의 흡착접촉모델에서 얻어진 결과⁽⁸⁾와 정성적으로 일치한다.

Fig. 5는 흡착력이 접촉압력의 분포에 미치는 영향을 보여준다. 돌기위치 δ 가 동일할 때 흡착력은 접촉영역을 증가시키면서 동시에 접촉압력도 크게 증가시킨다. 또한 접촉영역 가장자리 부근에서 접촉압력을 더 급격하게 변화시킨다. $\delta = 0.9\text{nm}$ 일 때의 흡착접촉 하중은 $\delta = 0.7\text{nm}$ 일 때의 기계적 접촉하중과 거의 동일하다. 즉, 외부에서 가해주는 접촉하중이 동일할 때 흡착력에 의해 접촉영역도 넓어지고 접촉압력도 증가한다.

3.3 응력분포

Fig. 6은 돌기가 접근하는 동안 반구형 돌기의 대칭축인 z 축(Fig. 2)에 형성되는 Mises 응력의 변화를 보여준다. 돌기가 무한평면과 접촉하기 전($\delta = -0.28\text{nm}$)에도 돌기 내부에는 흡착력에 의해 응력이 형성되며, 표면 아래쪽에 응력 극대점이

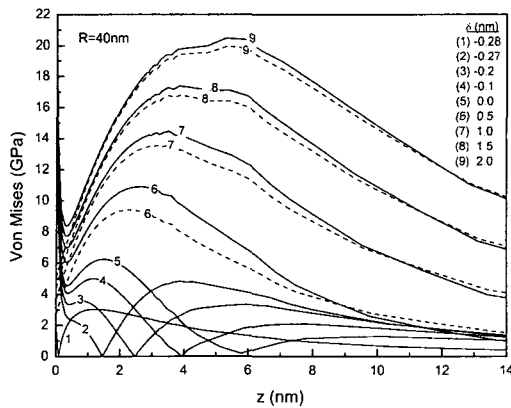


Fig. 6 Evolution of subsurface von Mises stresses for adhesive(solid lines) and mechanical (dash lines) contacts

존재한다. 흡착력에 의해 최초의 접촉이 발생 ($\delta = -0.27$ nm)하면 표면 응력값이 급격히 증가하며, 표면 아래쪽 응력 극대점은 더 깊은 위치로 이동하고 크기도 증가한다. 표면 아래쪽 응력 극대점과 표면 사이에 응력값이 0인 지점이 존재한다. 이 지점은 z 축 방향 수직응력이 0인 지점과 근사하며, 이 지점과 표면사이에는 z 축 방향의 압축응력이 작용하고, 이 지점보다 더 깊은 영역에서는 인장응력이 작용한다. 돌기가 더 접근($\delta = -0.2$ nm)하면 표면 아래쪽에 새로운 응력 극대점이 형성된다. 돌기 작용력이 인력에서 척력으로 바뀌는 위치($\delta = 0.43$ nm)로 돌기가 접근하는 동안 표면 응력값과 새로 형성된 표면 아래쪽 극대점 응력값은 증가하지만 접촉발생 전부터 존재했던 표면 아래쪽 극대점 응력값은 감소한다. 한편, 두개의 응력 극대점의 위치는 더 깊은 쪽으로 이동한다. 돌기 작용력이 척력($\delta > 0.43$ nm)이 되면 접촉발생 전부터 존재했던 표면 아래쪽 응력 극대점은 사라지고 새로 생성된 응력 극대점만 존재한다.

원자단위마찰을 제외하면 일반적으로 마찰은 접촉하는 재료의 소성변형을 수반한다.⁽⁹⁾ Fig. 6의 결과는 흡착접촉의 경우 큰 Mises 응력이 발생하는 표면과 표면 아래 두 지점에서 우선적으로 소성변형이 발생 가능함을 보여준다. 또한 접촉력이 감소할수록 표면 아래쪽 Mises 응력값이 표면 응력값보다 상대적으로 빨리 감소한다. 따라서, 적은 접촉력이 작용하는 경우 표면에서 발생하는 소성변형만으로도 마찰이 발생할 수 있음을 유추할 수 있다.

Fig. 6은 흡착력이 배제된 기계적 접촉에서

Mises 응력(점선)의 변화도 함께 보여준다. 기계적 접촉 시작점($\delta = 0$)에서 응력은 발생하지 않고, 돌기와 무한평면이 간섭을 일으키는 위치($\delta > 0$)에서 응력이 발생한다. 흡착접촉과 기계적 접촉의 결과를 비교하면, 흡착접촉에서 표면에 존재하는 큰 응력은 흡착력의 효과임을 알 수 있다. 표면 아래쪽 응력분포는 동일한 경향을 나타내며, 간섭량이 증가할수록 흡착력의 영향이 상대적으로 감소하여 두 분포의 정량적 차이가 줄어든다.

4. 결론

흡착력을 체적력으로 모델링하여 흡착접촉해석을 가능하게 하는 유한요소기법을 개발하였다. 개발된 기법을 적용하여 반무한 강체의 표면과 흡착접촉하는 반구형 돌기의 거동을 해석하였다. 개발된 모델은 기존의 연속체 모델로는 묘사가 불가능한 순간적인 접촉과 분리 현상, 그리고 흡착 히스테리시스 현상을 묘사할 수 있고, 접촉영역, 접촉압력, 응력분포 등 다양한 정보를 제공한다. 예를 들어, 흡착접촉에서는 Mises 응력의 극대점이 표면 아래뿐만 아니라 표면에도 존재하며, 이는 표면재료의 소성변형으로 마찰저항이 발생할 수 있음을 암시한다. 기존의 연속체 모델은 구와 평면의 접촉에만 적용이 가능하지만, 본 논문에서 제시된 기법은 다양한 형상에 적용이 가능하므로, 흡착방지를 위한 MEMS/NEMS 표면형상설계에 활용될 수 있다.

후기

본 연구는 정보통신연구진흥원 대학기초연구지원사업(2001-022-3)에 의해 수행되었으며, 관계자 여러분께 감사 드립니다.

참고문헌

- (1) Johnson, K. L., 1988, "Mechanics of Adhesion," *Tribology International*, Vol. 31, No. 8, pp. 413-418.
- (2) Komvopoulos, K., 1996, "Surface Engineering and Microtribology for Microelectromechanical Systems," *Wear*, Vol. 200, pp. 305-327.
- (3) Gui, J., Kuo, D., Marchon, B., and Rauch, G. C., 1997, "Stiction Model for a Head-Disc Interface: Experimental," *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 33, No. 1, pp. 932-937.
- (4) Israelachvili, J. N., 1992, *Intermolecular and Surface Forces*, 2nd Ed., Academic Press, London, pp. 152-175.
- (5) Katircioglu, S., and Erkoç, S., 1997,

- "Decomposition of C60 Molecules on Si(111) Surface," *Surface Science*, Vol. 383, pp. 775~778.
- (6) Komvopoulos, K., 1988, "Finite Element Analysis of a Layered Elastic Solid in Normal Contact with a Rigid Surface," *Journal of Tribology*, Vol. 110, pp. 477~485.
- (7) Greenwood, J. A., 1997, "Adhesion of Elastic Spheres," *Proc. R. Soc. Lond. A*, Vol. 453, pp. 1277~1297.
- (8) Johnson, K. L., and Greenwood, J. A., 1997, "An Adhesion Map for the Contact of Elastic Spheres," *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 192, pp. 326~333.
- (9) Harrison, J. A., White, C. T., Colton, R. J., and Brenner, D. W., 1995, "Investigation of the Atomic-scale Friction and Energy Dissipation in Diamond Using Molecular Dynamics," *Thin Solid Films*, Vol. 260, pp. 205~211.