

실리콘 돌기의 응착마찰 분자동역학 시뮬레이션

박승호* · 조성산†

(2003년 7월 22일 접수, 2004년 3월 19일 심사완료)

Molecular Dynamics Simulation of Adhesive Friction of Silicon Asperity

Seungho Park and Sung-San Cho

Key Words: Adhesion(응착), Friction(마찰), Wear(마멸), Asperity(돌기), Molecular Dynamics(분자동역학), Tersoff Potential(터소프 포텐셜), Silicon(실리콘)

Abstract

A hemispherical asperity moving over a flat plane is simulated based on classical molecular dynamics. The asperity and the plane consist of silicon atoms whose interactions are governed by the Tersoff three-body potential. The gap between the asperity and the plane is maintained to produce attractive normal force in order to investigate the adhesive friction and wear. The simulation focuses on the influence of crystallographic orientation of the contacting surfaces and the moving direction. It is demonstrated that the adhesive friction and wear are lower when crystallographic orientations of the contacting surfaces are different, and also depend on the moving direction relative to the crystallographic orientation.

기호설명

A_{ij} : 척력 계수
 b_{ij} : Tersoff 포텐셜에서의 함수
 B_{ij} : 인력 계수
 f : 인력, 척력, 또는 차단 함수
 F : 돌기 또는 아래평면에 작용하는 힘
 F_i : 원자 i 에 작용하는 힘
 g : Tersoff 포텐셜에서의 함수
 m_i : 원자 i 의 질량
 r_i : 원자 i 의 위치

r_{ij} : 원자 i 와 j 간의 거리
 t : 시간

그리스문자

ζ : Tersoff 포텐셜에서의 함수
 θ : 각도
 \emptyset : 포텐셜 함수

하첨자

A : 인력 (attractive)
 c : 차단 (cutoff)
 L : 수평측면방향 (lateral)
 N : 수직방향 (normal)
 R : 척력 (repulsive)
 T : 수평이동방향 (transverse)
 x, y, z : 돌기 격자에 대한 $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$, $\langle 001 \rangle$ 방향

† 홍익대학교 기계·시스템디자인공학과
 E-mail : sscho@wow.hongik.ac.kr
 TEL : (02)320-1674 FAX : (02)322-7003

* 홍익대학교 기계·시스템디자인공학과

1. 서론

미세전자기계시스템(MEMS)의 구조물 표면이 접촉 또는 근접한 상태에서 상대운동을 할 때 발생하는 마찰 및 마멸은 MEMS의 성능 및 내구성을 저하시킨다. 이 문제를 해결하기 위해 다양한 방법이 개발되고 있다.⁽¹⁻²⁾ 그러나 이 방법들은 나노스케일의 NEMS에 적용하는데 한계가 있고 또한 MEMS의 경우에도 개발된 방법의 효과를 극대화하기 위해서는 나노스케일의 마찰 및 마멸에 대한 보다 심도있는 이해가 필요하다.

나노 마찰 및 마멸에 관한 실험적 연구는 주로 AFM 또는 FFM을 이용하여 수행되고 있으며, 이론적 연구는 주로 분자동역학(MD) 시뮬레이션 기법을 활용하고 있다.

MD 시뮬레이션을 이용한 나노마찰에 관한 연구⁽³⁻¹³⁾는 마멸이 없는 마찰, 응착마찰, 그리고 plowing 또는 절삭에 의한 마찰 연구로 구분된다. MEMS/NEMS와 같이 부피에 비해 표면적이 상대적으로 크고 접촉하중이 미미한 경우에 중요성이 증대되는 나노스케일 응착마찰에 관한 연구결과는 매우 미미하며, 특히 돌기(asperity)와 평면 사이의 응착마찰에 관한 연구는 MD 시뮬레이션으로 응착마찰의 재현이 가능함을 확인하는 수준에 머물러 있다.

본 논문에서는 실리콘으로 구성된 반구형 돌기와 평면이 일정 간격을 유지하면서 상대운동을 수행할 때 발생하는 응착마찰특성을 고찰하였다. 특히 돌기와 평면의 결정격자방향의 차이에 따른 영향과 평면의 결정격자방향에 대한 상대운동방향의 차이에 따른 영향을 고찰하였다.

2. 분자동역학 시뮬레이션 모델

반구형 돌기가 나노평면 위를 일정 간격을 유지하면서 이동하는 경우를 시뮬레이션하였다. 반구형 돌기와 나노평면은 MEMS 구조물의 주요 재료인 실리콘으로 가정하였다. 공유결합에 의해 다이아몬드 구조를 갖는 실리콘 모델은 Tersoff 포텐셜⁽¹⁴⁾로 구성하였다. Tersoff 모델은 2입자 시스템에 대한 Morse 포텐셜에 차단함수를 고려하고, 또한 세입자 간의 작용을 고려하여 반발력을 수정한 함수로 아래와 같이 정리된다.

$$\Phi_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \tag{1}$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij}\exp(-\lambda_{ij}r_{ij}) \tag{2}$$

$$f_A(r_{ij}) = -B_{ij}\exp(-\mu_{ij}r_{ij}) \tag{3}$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & \text{for } r_{ij} \leq R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left[\frac{\pi(r_{ij} - R_{ij})}{S_{ij} - R_{ij}}\right] & \text{for } R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0 & \text{for } r_{ij} \geq S_{ij} \end{cases} \tag{4}$$

$$b_{ij} = \chi_{ij}(1 + \beta_{ij}^n \zeta_{ij}^n)^{-1/2n} \tag{5}$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik})g(\theta_{ijk}) \tag{6}$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2} \tag{7}$$

위 식에서 실리콘의 경우는 $A_{ij}=1830.8\text{eV}$, $B_{ij}=471.18\text{eV}$, $\lambda_{ij}=2.4799\text{\AA}^{-1}$, $\mu_{ij}=1.7322\text{\AA}^{-1}$, $\chi_{ij}=1.0$, $\beta_{ij}=0.0000010999$, $n=0.78734$, $c_i=100390$, $d_i=16.217$, $h_i=-0.59825$, $R_{ij}=2.7\text{\AA}$, $S_{ij}=3.0\text{\AA}$ 이다. Fig. 1은 2개의 실리콘 원자 i 와 j 간에 작용하는 Tersoff 포텐셜 에너지를 원자간 거리의 함수로 보여주며, 이 에너지는 주변원자 k 와 원자 i 와 j 가 이루는 각도 θ_{ijk} 에 따라 큰 차이가 발생함을 보여준다.

분자 거동은 포텐셜 함수 식(1)과 아래 주어진 뉴턴 운동방정식에 근거하여 산출하였다.

$$F_i = - \sum_{j \neq i}^n \frac{\partial \Phi(r_{ij}, \theta_{ijk})}{\partial r_i} = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \tag{8}$$

본 연구에서는 2fs의 시간간격으로 Gear의

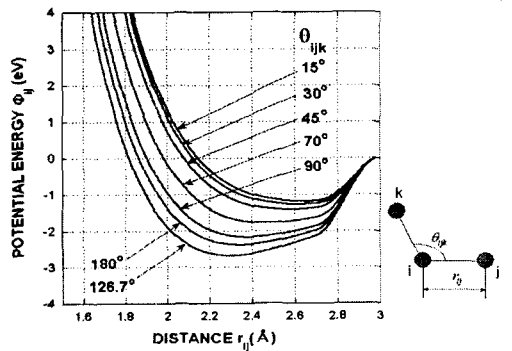


Fig. 1 Tersoff potential model for silicon

Predictor-Corrector 알고리즘⁽¹⁵⁾을 적용하여 식 (8)을 수치해석하였다. Gear 모델에서는 $t + \Delta t$ 에서의 원자위치 $r(t + \Delta t)$, 속도, 가속도 등을 Taylor 급수로 전개하여 예측한다. 예측된 원자 위치를 바탕으로 원자 간의 포텐셜을 식 (1)로부터 구하고, 그리고 원자 간에 작용하는 힘을 Newton 방정식 식 (8)을 이용하여 구한다. Taylor 급수를 활용하여 예측한 가속도와 원자 간에 작용하는 힘으로부터 계산한 가속도와의 차이를 보정인자로 설정한 후, 이를 이용하여 구하고자 하는 변수를 보정한다. 또한, 실리콘 모델의 정확성을 검증하기 위해 상온에서 결정 실리콘에 대한 탄성계수를 산출한 결과, <100>, <110> 및 <111> 방향에서 각각 130.186, 169.103 및 187.819 GPa을 얻었으며, 이는 기존에 활용되고 있는 자료⁽¹⁶⁾ 130.608, 167.791 및 187.105GPa과 거의 일치함을 확인하였다.

3. 결과 및 토의

3.1 응착

결정격자방향이 응착마찰에 미치는 영향을 고찰하기 위해 우선 결정격자방향이 응착접촉특성에 미치는 영향을 고찰하였다. Fig. 2는 응착접촉 및 분리과정에 돌기와 아래평면 사이에 작용하는 힘의 변화를 보여준다. 시뮬레이션은 돌기를 고정시킨 상태에서 평면을 10ps 동안에 10 Å 수직상향으로 이동시켜 접촉시킨 후 30ps 동안에 30 Å 수직하향으로 이동시켜 분리시키는 방법으로 수행하였다. 수직방향의 힘 F_z 는 큰 변화를 나타내지만 평면내의 힘 F_x 와 F_y 는 기하학적 축대칭성에 의해 작용력이 상쇄되어 미미한 변화를 나타낸다. 여기서 x, y, z는 실리콘 격자 방향인 <100>, <010>, <001> 방향과 일치한다. 수직력의 경우 돌기와 평면의 간격이 차단거리(cutoff distance)보다 큰 접근 초기에는 아무런 힘도 작용하지 않는다. 그러나 평면의 이동에 의해 간격이 좁아지면서 일시적으로 약간의 인력(양수)이 작용하지만 간격이 더 좁아지면서 곧바로 척력(음수)으로 바뀐 후 그 크기가 급격히 증가한다. 경과시간 10ps 이후의 분리과정에서는 척력이 급격히 줄어들고 얼마 지나지 않아 인력으로 바뀐다. 간격이 더 증가할수록 인력이 강해지다가 약 20ps

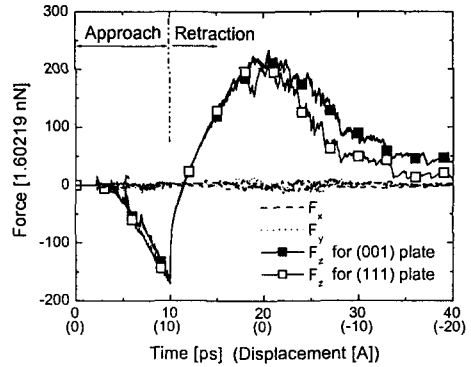


Fig. 2 Forces during approach and retraction

이후에는 약해지면서 소멸한다.

Fig. 2는 아래 평면과 평행한 돌기내의 평면이 (001)인 상태에서 아래 평면의 방향이 (001)과 (111)인 경우의 차이를 보여준다. (001) 평면에 비해 (111) 평면의 경우 접근과정의 척력은 더 강하고 분리과정의 인력은 더 약하다. 이는 접촉하는 두 표면의 결정격자방향이 다를 때 약한 응착력이 작용함을 의미한다.

Fig. 3은 분리과정에서 경과시간 30ps(변위 -10 Å)일 때 원자의 배열상태를 보여준다. 돌기와 평면 사이에 형성됐던 응착접합부(adhesive junction)에 necking이 발생하면서 파괴되는 모습과 초기에 돌기를 구성하던 원자가 평면으로 전이(transfer)된 모습을 보여준다. (001) 평면에 비해 (111) 평면의 경우 응착접합부 내의 원자 개수가 더 적으며 또한 평면으로 전이된 원자의 개수도 더 적다. 즉, (111) 평면은 (001) 평면에 비해 돌기와의 친화도(affinity)가 낮으며, 그 결과 Fig. 2에서 더 약한 응착력이 작용하였음을 확인할 수 있다.

3.2 마찰

Fig. 4는 돌기와 평면의 결정격자방향이 (001)로 동일할 때 돌기와 평면의 간격(2 Å과 2.4 Å)을 일정하게 유지하면서 평면을 <010> 방향으로 이동시키는 동안에 돌기에 작용하는 힘의 변화와 40 Å 이동한 후의 원자배열을 보여준다. 이 시뮬레이션의 경우 돌기와 평면은 격자 생성 후 100ps 이상의 독립적인 평형과정을 거친 상태에서 돌기를 평면에 일정 간격으로 접근시킨 후 다

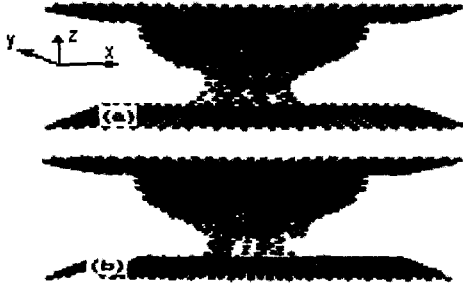


Fig. 3 Snapshots of molecular distribution at a displacement of -10 \AA during retraction: (a) (001), and (b) (111) plate

시 100ps 이상의 평형과정을 거치고 나서 아래면을 수평방향으로 이동할 때의 결과이다. 돌기와 아래면의 간격이 원자간 평형간격보다 멀기 때문에 수직력 F_N 은 인력으로 작용한다. 힘 F_N 은 평면이 수평이동할 때 크기가 증가하다가 감소한다. 이동 초기에 F_N 의 크기가 증가하는 이유는 돌기를 구성하던 원자가 평면과 응착접합부를 형성하면서 인력이 강해지기 때문이며, 이후 수평이동량이 증가할수록 F_N 의 크기가 감소하는 이유는 수평이동에 의해 응착접합부가 파괴되면서 돌기를 구성하던 원자가 평면으로 전이되고 그 결과 돌기와 평면 사이의 실제 간격이 증가하여 인력이 약해지기 때문이다. 이동방향의 힘, 즉 마찰력 F_T 도 동일한 원인에 의해 증가 후 감소하는 경향을 나타낸다. 그러나 마찰력 F_T 와 수직력 F_L 은 거의 변화가 없으며, 이는 평형과정을 거치는 동안에 원자가 돌기를 기준으로 축대칭으로 배열되었기 때문이다. 간격이 2 \AA 인 경우와 2.4 \AA 인 경우를 비교하면 간격이 좁을수록 더 강한 힘이 작용함을 알 수 있다.

40 \AA 이동한 후의 원자배열은 돌기원자가 평면으로 전이된 모습을 보여주며, 이는 응착마멸이론을 확인해준다. 특히 이 결과는 근접한 돌기와 평면 사이에 수직방향으로 접촉압력 대신 인력이 작용하는 상태에서도 응착력에 의해 원자가 이동하면서 형성되는 응착접합부가 수평상대운동에 의해 파괴되면서 응착마멸이 발생할 수 있음을 보여준다.

Fig. 5는 돌기와 평면의 원자들이 서로 힘을 주고 받지만 그 힘에 의해 원자의 위치가 변하지 않는 강체구조를 가정하고 Fig. 4와 동일한 조건

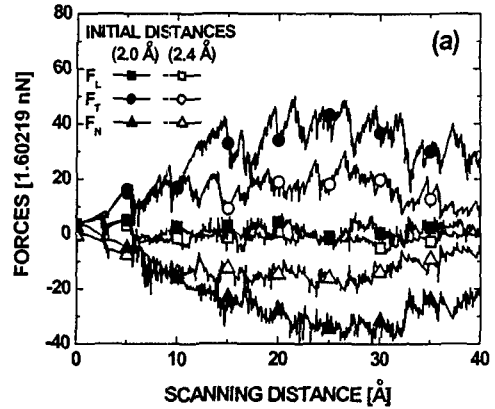


Fig. 4 (a) Variation of forces and (b) snapshot of molecular distribution after 40 \AA scanning with initial gap 2 \AA during scanning in $\langle 010 \rangle$ direction with (001) tip and (001) plate

에서 상대운동을 할 때 돌기에 작용하는 힘의 변화를 보여준다. Fig. 5는 돌기의 최하단 원자와 아래평면의 수직방향 간격을 2 \AA 으로 유지한 경우의 결과이다. 원자배열의 주기성에 의해 세 방향의 작용력 모두 일정한 주기성을 나타낸다. 수직력 F_N 은 인력으로 작용하지만 돌기와 평면의 상대적 위치에 따라 인력의 크기가 증가와 감소를 반복한다. 수평이동방향의 힘 F_T 와 측면방향의 힘 F_L 은 모두 인력과 척력이 반복되는 주기성을 보이며, 인력과 척력의 변화양상은 상호 대칭적이다. 힘 F_T 와 F_L 의 변화는 각각 Tomlinson

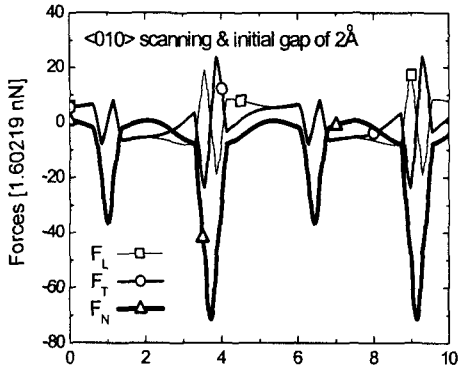


Fig. 5 Forces during scanning in <010> direction with rigid (001) tip and (001) plate

의 마찰 메카니즘과 Zig-Zag walk에 의한 마찰현상에 의해 발생하는 것이다.⁽¹⁷⁾ Fig. 4와 Fig. 5의 차이는 응착력에 의한 원자이동의 허용여부에 따라 발생하는 것이므로 Tomlinson의 마찰 메카니즘과 Zig-Zag walk은 응착력에 비해 원자간 결합력(cohesive force)이 강할 때 발생하는 현상임을 유추할 수 있다.

Fig. 6은 Fig. 4와 동일한 조건에서 <010> 대신 <110> 방향으로 수평운동하는 경우에 작용력의 변화와 40 Å 이동 후의 원자배열을 보여준다. 인력으로 작용하는 힘 F_N 과 이동방향의 힘 F_T 모두 약 20 Å 정도 이동한 후에는 안정된 변화양상을 보인다. 힘 F_N 과 F_T 의 최대값 모두 Fig. 4의 경우에 비해 작다. 이 결과는 돌기와 평면의 결정격자방향이 동일해도 상대운동방향에 따라 상호작용력의 차이가 발생함을 의미한다. 한편 힘 F_L 은 Fig. 4의 경우처럼 거의 변화가 없다.

Fig. 7은 Fig. 4와 동일한 조건에서 아래평면 (001) 대신 (111)인 경우에 작용력의 변화와 40 Å 이동 후의 원자배열을 보여준다. Fig. 4와 비교하면 동일한 거리를 이동했음에도 불구하고 힘 F_N 과 F_T 모두 이동 초기에 증가하는 비율이 작고 40 Å 이동 후에도 감소하는 경향은 나타나지 않으며 힘의 최대값도 상대적으로 낮다. 또한 40 Å 이동 후 아래 평면으로 전이된 원자의 개수도 상대적으로 적다. 이 차이는 Fig. 2와 Fig. 3의 설명에서 언급했듯이 접촉 또는 인접한 두 물체의 결

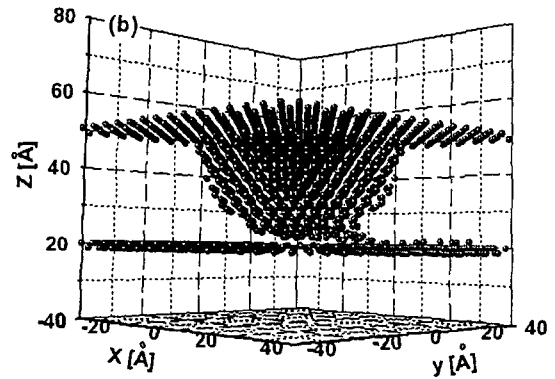
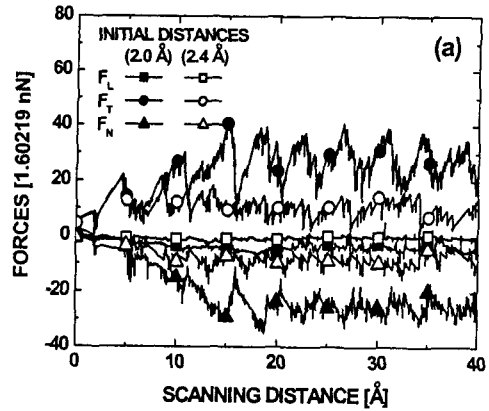


Fig. 6 (a) Evolution of forces and (b) snapshot of molecular distribution after 40 Å scanning during scanning in <110> direction with (001) tip and (001) plate

정격자방향이 다를 경우 친화도가 낮기 때문에 발생하며, 이 사실은 Fig. 4의 경우에 비해 Fig. 7에서 40 Å 이동 후 아래평면으로 전이된 원자의 수가 적다는 사실로도 확인이 가능하다.

Fig. 8은 Fig. 7과 동일한 조건에서 <010> 대신 <110> 방향으로 수평이동한 경우에 작용력의 변화와 40 Å 이동 후의 원자배열을 보여준다. Fig. 7의 경우와 비교하면 힘 F_N 과 F_T 모두 약하며 안정도 빨리 되고, 아래평면으로 전이된 원자의 수도 적다. 즉, 이동방향에 따라 돌기와 평면의 친화도가 차이를 나타내며 그 결과 수직력 및 마찰력도 차이가 발생함을 다시 한번 확인할 수 있다. Fig. 8을 Fig. 6과 비교하면 이동방향이 <110>으로 동일해도 돌기와 아래평면의 결정격자방향

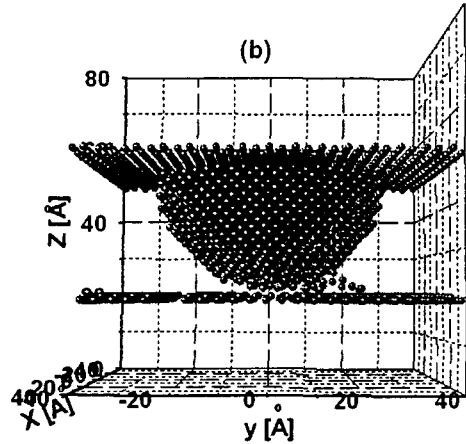
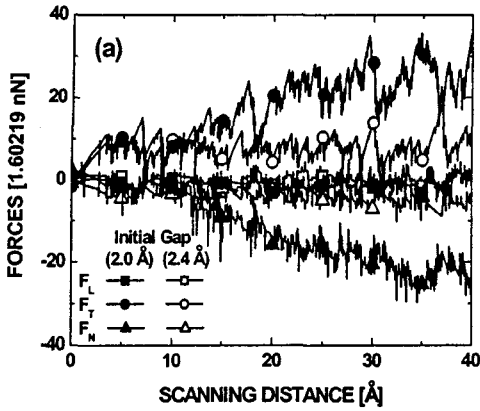


Fig. 7 (a) Evolution of forces and (b) snapshot of molecular distribution after 40 Å scanning with initial gap 2 Å during scanning in <010> direction with (001) tip and (111) plate

이 다를 때 수직력 및 마찰력 모두 감소함을 다시 한번 확인할 수 있다.

4. 결론

실리콘으로 구성된 반구형 돌기가 평면위를 일정 간격을 유지하면서 수평이동할 때 돌기에 작용하는 힘의 변화와 원자의 거동을 분자동역학 시뮬레이션으로 고찰하여 아래의 결론을 얻었다.

돌기와 평면의 결정격자방향이 다르면 상호간의 친화도가 감소하여 수직력 및 마찰저항이 감소하고 동시에 마멸량도 감소한다. 또한 결정격

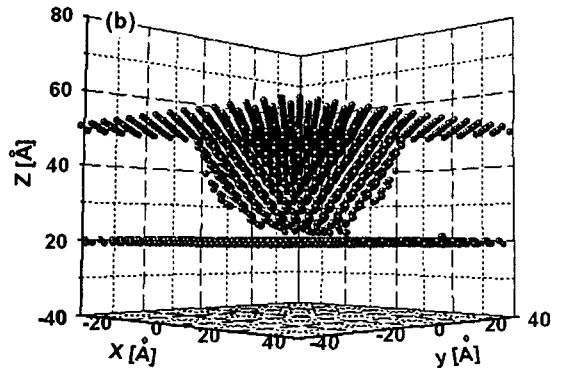
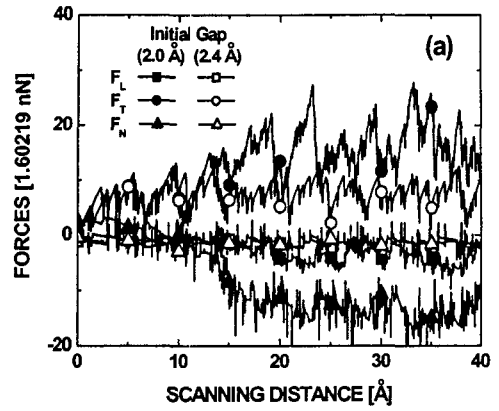


Fig. 8 (a) Evolution of forces and (b) snapshot of molecular distribution after 40 Å scanning with initial gap 2.4 Å during scanning in <110> direction with (001) tip and (111) plate

자방향에 대한 마찰운동방향도 수직력, 마찰저항 및 마멸량에 영향을 미친다. 한편 돌기과 평면의 간격이 좁을수록 마찰저항이 감소한다. 따라서, 상대운동하는 두 면의 결정격자방향을 달리하고 상대운동방향을 조절하면 응착마찰 및 마멸을 효과적으로 줄일 수 있다. 부수적으로 접촉압력이 작용하지 않는 상태에서도 근접한 두 표면 사이에서 응착력에 의한 원자이동으로 응착접합부가 형성되기 때문에 응착마멸이 발생할 수 있다.

후기

본 연구는 정보통신부 정보통신연구진흥원에서

지원하고 있는 정보통신기초연구지원사업의 연구 결과입니다. 또한 공동저자 박승호는 본 연구를 위해 부분적으로 마이크로 열시스템 연구센터의 지원을 받았습니다.

참고문헌

- (1) Komvopoulos, K., 1996, "Surface Engineering and Microtribology for Microelectromechanical systems," *Wear*, Vol. 200, pp. 305~327.
- (2) Maboudian, R., 1998, "Surface Processes in MEMS Technology," *Surface Science Reports*, Vol. 30, pp. 207~269.
- (3) 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.
- (4) Zhang, L., and Tanaka, H., 1997, "Towards a Deeper Understanding of Wear and Friction on the Atomic Scale - A Molecular Dynamics Analysis," *Wear*, Vol. 211, pp. 44~53.
- (5) Shimizu, J., Eda, H., Yoritsune, M., and Ohmura, E., 1998, "Molecular Dynamics Simulation of Friction on the Atomic Scale," *Nanotechnology*, Vol. 9, pp. 118~123.
- (6) Zhang, L., and Tanaka, H., 1998, "Atomic Scale Deformation in Silicon Monocrystals Induced by Two-Body and Three-Body Contact Sliding," *Tribology International*, Vol. 31, No. 8, pp. 425~433.
- (7) He, G., Muser, M. H., and Robbins, M. O., 1999, "Adsorbed Layers and the Origin of Static Friction," *Science*, Vol. 284, pp. 1650~1652.
- (8) Komanduri, R., and Chandrasekaran, N., 2000, "Molecular Dynamics Simulation of Atomic-Scale Friction," *Physical Review B*, Vol. 61, No. 20, pp. 14007~14019.
- (9) Komanduri, R., Chandrasekaran, N., and Raff, L. M., 2000, "MD Simulation of Indentation and Scratching of Single Crystal Aluminum," *Wear*, Vol. 240, pp. 113~143.
- (10) Hayashi, K., Maeda, A., Terayama, T., and Sakudo, N., 2000, "Molecular Dynamics Study of Wearless Friction in Sub-Micrometer Size Mechanisms and Actuators Based on an Atomistic Simplified Model," *Computational Materials Science*, Vol. 17, pp. 356~360.
- (11) Cai, J., and Wang, J.-S., 2002, "Friction between Si Tip and (001)-2x1 Surface: A Molecular Dynamics Simulation," *Computer Physics Communications*, Vol. 147, pp. 145~148.
- (12) Ciraci, S., and Buldum, A., 2003, "Atomic-Scale Study of Friction and Energy Dissipation," *Wear*, Vol. 254, pp. 911~916.
- (13) Mulliah, D., Christopher, D., Kenny, S. D., and Smith, R., 2003, "Nanoscratching of Silver (100) with a Diamond Tip," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Vol. 202, pp. 294~299.
- (14) Tersoff, J., 1988, "Empirical Interatomic Potential for Silicon with Improved Elastic Properties," *Physical Review B*, Vol. 38, pp. 9902~9905.
- (15) Hailes, J. M., 1992, *Molecular Dynamics Simulation*, John Wiley & Sons, pp. 260~267.
- (16) Tu, N. K., Mayer, J. W., and Feldman, L. C., 1992, *Electronic Thin Film Science for Electrical Engineers and Material Scientist*, Macmillan Pub. Co., p. 412.
- (17) Meyer, E., Overney, R. M., Dransfeld, K., and Gyalog, T., 1998, *Nanoscience: Friction and Rheology on the Nanometer Scale*, World Scientific Pub. Co., pp. 136~155.