Journal of the KSTLE Vol. 20, No. 2, April 2004, pp. 102~108
The Korean Society of Tribologists & Lubrication Engineers

탄소와 구리의 마찰 및 마모에 관한 분자 동역학 시뮬레이션

김광섭† · 강지훈 · 김경웅‡
한국과학기술원 기계공학과

Molecular Dynamics Simulation of Friction and Wear Behavior Between Carbon and Copper

Kwang-Seop Kim†, Ji-Hoon Kang and Kyung-Woong Kim‡
Department of Mechanical Engineering, KAIST

Abstract – In this paper, friction and wear behaviors between monocrystalline, defect-free copper and carbon on the atomic scale are investigated by using 2-dimensional molecular dynamics simulation. It is assumed that all interatomic forces are given by Morse potential. The deformation of carbon is assumed to be neglected and vacuum condition is also assumed. Average friction and normal forces for various surface conditions, various scratch speeds and scratch depths are obtained from simulations. Changes of wear behaviors for various scratch speeds and surface conditions are investigated by observing snapshots in scratch process. The effects of surface conditions, scratch speeds, and scratch depths on the friction force, normal force, and friction coefficient are also investigated.

Key words – molecular dynamics simulation, Nanotribology, Atomic-scale friction and wear.

1. 서 론

최근 정밀한 광학, 전자, 기계 부품의 가공이나 이러한 부품들의 조립 및 구동에 있어서 많은 나노트라이볼로지 문제가 발생하고 있다. 이는 미시적 스케일에서 발생하는 물리적 현상은 거시적 스케일에서 발생하는 물리적 현상과는 달리, 체적력보다는 마찰력이나 표면장력 같은 표면력이 지배적으로 영향을 미치기 때문이다. 이러한 나노트라이볼로지 문제에 대한 한가지 접근 방법으로 분자동역학을 이용한 연구가 활발히 진행되고 있다.

분자 동역학 시뮬레이션(Molecular dynamics simulation)이란, 재료를 구성하고 있는 각각의 원자들을 입자로 보고, 뉴튼의 운동 방정식을 적용, 시간에 따른 원자들의 움직임을 묘사하는 방법이다. 90년대 초 Lawrence Livermore National Laboratories(LLNL)의 Belak을 중심으로 원자 스케일의 절삭에 관한 분자 동역학 시뮬레이션이 수행되었다[1]. 그 후, Shimada와 Ikawa는 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 최소 절삭 깊이의 영향과 최소 절삭 깊이와 공구의 모서리 반경의 비에 따른 칩 형성과정에 대해 연구하고, 실험과 간접적으로 비교하여 분자 동역학 시뮬레이션의 타당성에 관해 연구하였다[2-3]. 최근에는 Komanduri가 분자 동역학을 이용하여 단결정 알루미늄에 대한 인덴테이션과 스크래칭[4], 단결정 알루미늄[5]과 실리콘[6]에 대한 절삭 가공에 대해 연구하였다. 이처럼 원자 스케일의 절삭에 관한 연구들은 변형이 없는 다이아몬드를 공구로 사용하였고, 공구의 이송 속도는 매우 높은 편이었다.

분자 동역학을 이용한 원자 스케일에서의 마찰 및 마모 현상에 관한 연구로 Kim은 원자간 상호 작용력이 마찰에 미치는 영향에 대해 연구하였다[7]. Shimizu는 원자현미경(atomic force microscope)의 팁과 구리 재료 사이에서 발생하는 원자스케일에서의 스틱-슬립(stick-slip) 현상을 시뮬레이션 하였으며[8], Komanduri

†주저자 : kimks@kaist.ac.kr
‡책임저자 : taeho@kaist.ac.kr

는 알루미늄 절삭에 관한 연구 결과를 토대로 알루미늄과 탄소 사이의 원자 스케일에서의 마찰력에 관한 연구를 수행하였다[9]. 또한 Zhang은 마찰 조건에 따른 마모 형태와 전위의 생성에 대해 연구하였다[10].

본 논문에서는 진공 중에서 단결정이고 결함이 없는 탄소와 구리의 마찰에 대해 2차원 분자 동역학 시뮬레이션을 수행하였다. 마찰 속도와 마찰 깊이를 달리하여 평균 마찰력 및 평균 수직력, 평균 마찰계수의 변화를 알아보았으며, 마찰을 일으키는 순간의 구리 원자들의 상태를 달리하여 표면 원자들의 상태가 평균 마찰력 및 평균 수직력, 평균 마찰계수 및 마모 거동에 미치는 영향에 대해 연구하였다.

2. 시뮬레이션 모델 및 방법

2-1. 해석 모델

Fig. 1은 2차원 분자 동역학 시뮬레이션 모델을 나타낸다. 밀집 쌓임(closed-packing) 형태로 배열되어 있으며 단결정이고 결함이 없는 구리와 탄소의 진공 중에서의 마찰을 해석대상으로 하였다. 이때, 탄소의 변형은 없다고 가정한다. 구리의 바깥 쪽에는 경계 조건으로 사용되는 온도조절(thermostat) 원자와 고정 경계

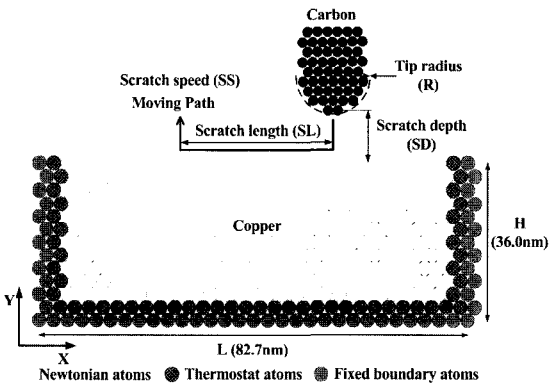


Fig. 1. Schematic diagram of simulation model.

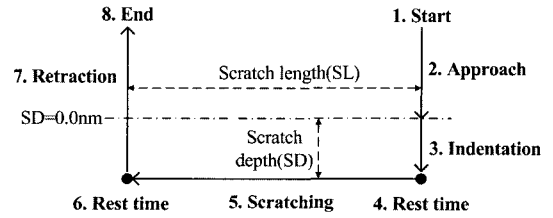


Fig. 2. Moving process of carbon.

(fixed boundary) 원자들이 있다. 탄소는 Fig. 2와 같은 순서로 moving path를 따라 이동한다. 탄소의 이동 속도를 마찰 속도(scratch speed)라 하였고, 구리와 마찰을 일으키는 거리를 마찰 길이(scratch length)라 하였으며, 마찰 깊이(scratch depth)는 탄소가 구리에 압입(indentation)된 깊이를 나타낸다. 구리 표면 원자들의 시간에 대한 평균 위치로부터 구리표면에 가장 가까이 위치한 탄소 원자의 중심까지의 거리가 한 개의 탄소 원자와 한 개의 구리 원자 사이의 상호작용력이 0이 되는 원자간 거리와 같을 때를 마찰 깊이가 0 nm라 하였다. 정지시간(rest time)이란 압입과정과 스크래칭과정 사이에 탄소가 정지해 있는 시간을 뜻한다. 본 연구에서는 정지시간을 달리하여 마찰이 일어나는 순간의 표면 원자들의 상태를 달리 하였다.

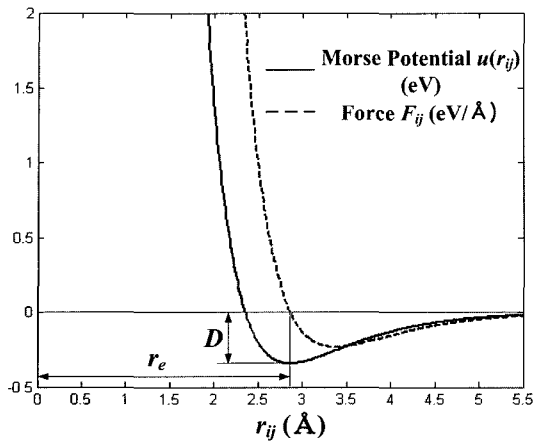
2-2. 모스 포텐셜 (Morse Potential)

원자들 사이의 상호 작용은 주어진 원자간 포텐셜 함수에 의해 결정되므로 원자간 상호 작용을 가능한 정확히 묘사할 수 있는 적절한 포텐셜 함수를 결정하는 것은 매우 중요하다. 본 연구에서는 구리 원자간 상호작용 및 구리 원자와 탄소 원자 사이의 상호작용을 묘사하기 위해 식 (1)과 같은 모스 포텐셜을 이용하였다. 모스 포텐셜은 두 원자 사이의 거리만의 함수로 표현되는 쌍 포텐셜(pair potential)이며, FCC 격자 구조를 갖는 금속 원자들의 거동을 잘 묘사한다고 알려져 있다[12].

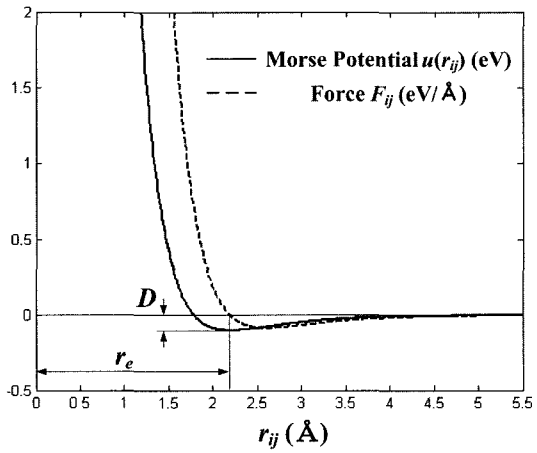
$$u(r_{ij}) = D\{\exp[-2\alpha(r_{ij}-r_e)] - 2\exp[-\alpha(r_{ij}-r_e)]\} \quad (1)$$

Table 1. Condition of scratch simulation

Copper	Number of atoms	45000
	Atomic weight	63.55 g/mol
	Atomic radius	0.128 nm
Carbon	Number of atoms	372
	Atomic weight	12.011 g/mol
	Atomic radius	0.071 nm
Size of copper		82.7 nm × 36.0 nm
Edge radius of carbon		1.35 nm
Scratch length (SL)		5.0 nm
Scratch depth (SD)		0.25, 0.5, 1.0, 1.5 nm
Scratch speed (SS)		10 ~100 m/s
Rest time		0.5, 1.0, 1.5, 2.0 ps
Initial bulk temperature of copper		294.2 K
Time step		7.924 fs



(a) Cu-Cu



(b) C-Cu

Fig. 3. Morse potential and interacting force.

Table 2. Morse potential constants

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

여기서 D, α, r_e는 상호작용하는 원자들에 의해 결정되는 모스 포텐셜 상수이고, r_{ij}는 두 원자 사이의 거리이다. 본 시뮬레이션에서 구리 원자간 상호작용과 구리 원자와 탄소 원자간 상호작용을 표현하기 위해 사용된 모스 포텐셜 및 상호작용력은 Fig. 3과 같고, 이 때 사용된 모스 포텐셜 상수는 Table 2에 정리되어 있다[11,13]. 원자간 거리 r_{ij}가 $2.5r_e$ 이상 떨어져 있는 원자들 사이의 상호작용력은 최대 상호작용력의 1.5% 이하가 되어 무시하였다.

포텐셜로부터 원자간 상호작용력은 식 (2)와 같이 주어지며, 한 원자에 작용하는 합력은 식 (3)과 같이 주변 원자들과의 상호작용력의 합으로 표현된다. 여기서 u는 두 원자간 상호작용을 나타내는 포텐셜 함수이다.

$$\vec{F}_{ij} = -\nabla u(r_{ij}) \tag{2}$$

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^{N} \vec{F}_{ij} \tag{3}$$

2-3. 경계 조건

해석 모델에서 구리 원자들은 뉴토니안(Newtonian) 원자, 온도조절(thermostat) 원자, 고정경계(fixed boundary) 원자로 나뉜다. 뉴토니안 원자들은 포텐셜 필드 내에서 뉴튼의 운동 방정식에 의해 움직이는 원자들로서 탄소와의 마찰은 이 영역에서 일어난다. 온도조절 원자와 고정 경계 원자들은 원자들의 움직임에 제약조건을 주어 해석 모델의 경계 조건으로 사용된다. 고정 경계 원자들은 변위에 관한 경계 조건으로 마찰 영역과 멀리 떨어져 있어서 마찰이 일어나는 동안 그 위치는 변하지 않는다고 가정한다. 온도조절 원자들은 온도에 관한 경계조건이다. 온도조절 원자가 없다면 마찰에 의해 발생한 열은 구리 내부로 전달되나 고정 경계 원자들 때문에 시스템 내부에 그대로 남게 된다. 이를 해결하기 위해 온도조절 원자들의 속도를 매 시간 간격마다 식 (4)와 같이 구리의 초기 온도로 보정해 줌으로서 외부로의 열전달을 묘사할 수 있다[13]. 이 때 T_0는 구리의 초기 온도이고, T는 매시간 간격에서의 온도조절 원자들의 온도이다. 본 시뮬레이션에서 온도는 식 (5)와 같이 정의된다. 여기서 m_i, v_i는 각각 원자 i의 질량과 속도이며, N은 원자수, k_B는 볼쯔만 상수(Boltzmann's constant), g는 원자의 자유도로서 본 연구에서는 원자들의 2차원 병진운동만 고려하므로 2이다. 마찰로 인해 발생한 모든 열은 구리 내부로 전달되며, 전도 이외의 열전달은 없다고 가정한다.

$$v^{new} = \sqrt{\frac{T_0}{T}} v^{old} \tag{4}$$

$$T = \frac{\sum_{i=1}^{N} m_i \langle v_i^2 \rangle}{gNk_B} \tag{5}$$

2-4. 해석 방법

본 연구에서는 운동방정식의 시간 적분 방법으로 속도 Verlet 알고리즘을 사용하였다[14]. 속도 Verlet 알

고리즘에서는 Δt후의 위치와 속도가 식 (6)과 (7)로 표현된다.

$$r(t+\Delta t) = r(t)+\Delta t v(t)+\frac{1}{2}\Delta t^2\frac{F(t)}{m} \quad (6)$$

$$v(t+\Delta t) = v(t)+\frac{1}{2}\Delta t\left(\frac{F(t)}{m}+\frac{F(t+\Delta t)}{m}\right) \quad (7)$$

스크래칭 과정이 시작되는 순간의 구리 원자들의 상태를 달리 하기 위해 탄소가 압입된 후, 정지시간을 0.5, 1.0, 1.5, 2.0 ps로 달리하였다. 탄소 원자들에 작용하는 x 방향 힘의 합을 마찰력으로 정의하고, y 방향 힘의 합을 수직력으로 정의하였다. 평균 마찰력 및 수직력은 마찰거리에 대한 평균이다. 평균 마찰계수는 평균 수직력에 대한 평균 마찰력의 비로 정의하였다.

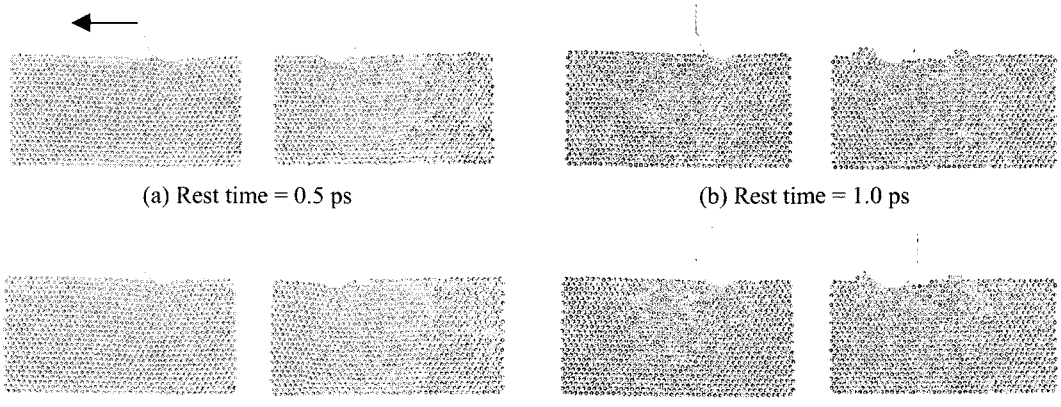
3. 결과 및 고찰

마모 거동을 설명하기 위해, 구리 표면 원자들이 탄소와의 마찰에 의해 원자층에서 떨어져 나와 탄소의 앞부분에 칩의 형태로 쌓이는 현상을 표면 마모라고 하고, 원자층을 유지하면서 탄소의 진행 방향으로 밀리는 현상을 표면 변형이라 정의한다.

Fig. 4은 마찰 깊이가 0.5 nm이고 마찰 속도가 30 m/s일 때, 여러 정지시간에 대해 스크래칭을 시작하는 순간과 스크래칭이 끝난 직후의 원자들의 위치를 나타낸다. 전체 원자들 중, 탄소와 마찰을 일으키는 표면 근처의 구리 원자들만을 그림에 나타내었다. 정지시간을 달리하면 스크래칭이 일어나는 순간의 구리 원자들의 상태가 달라지게 된다. 시뮬레이션 결과, 스크래칭이 일어나는 순간의 표면 원자들의 상태에 따라 표면 마모 현상의 발생 여부가 달라짐을 알 수 있다. 일단 표면 마모가 일어나면 그 정도가 심하지 않더라도 평균 마찰력을 증가시킨다. 따라서 평균 마찰력의 크기 역시 표면 원자들의 상태에 따라 달라진다.

Fig. 5는 마찰 깊이가 0.5 nm, 1.0 nm, 1.5 nm인 경우에 대해, 마찰 속도에 따른 평균 마찰력 및 평균 수직력, 평균 마찰계수의 변화를 보여준다. 각 점에서 나타나는 편차는 압입 후 정지시간을 달리한 결과 마찰이 시작되는 순간의 표면 원자들의 상태가 달라져서 나타난 결과로 최대값과 최소값, 평균값을 나타내었다. 마찰 깊이가 0.5 nm인 경우에는 상대적으로 편차가 매우 큰 곳이 나타나는데 이는 마찰 깊이가 작은 경우에는 표면 원자들과의 상호작용력이 마찰력의 변화에 큰 영향을 미치기 때문이다. 마찰 깊이가 큰 경우에는(1.0 nm, 1.5 nm) 이 편차의 크기가 상대적으로 작게 나타난다. 또한 마찰 깊이가 증가할수록 표면 변형이나 표면 마모가 많아져서 평균 마찰력의 크기 역시 증가한다. 그러나 마찰 속도가 평균 마찰력이나 평균 수직력에 미치는 영향은 미미하다.

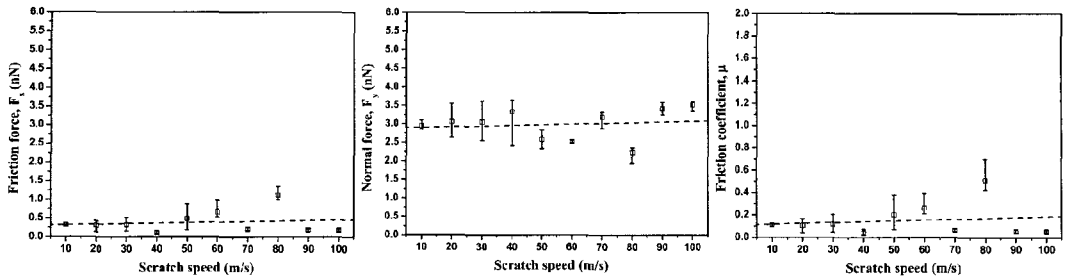
Fig. 6는 마찰 깊이가 1.0 nm일 때, 마찰 속도를 달리하며 스크래칭을 시작하는 순간과 스크래칭이 끝난 직후의 변화를 나타낸다. 마찰 속도가 증가함에 따라 재료의 마모 거동은 표변 변형에서 표면 마모로 변해간다. Fig. 1에서 알 수 있듯이 마찰 속도가 평균 마찰력에 미치는 영향은 미미하지만 마찰 후의 표면 형상은 크게 달라짐을 알 수 있다.



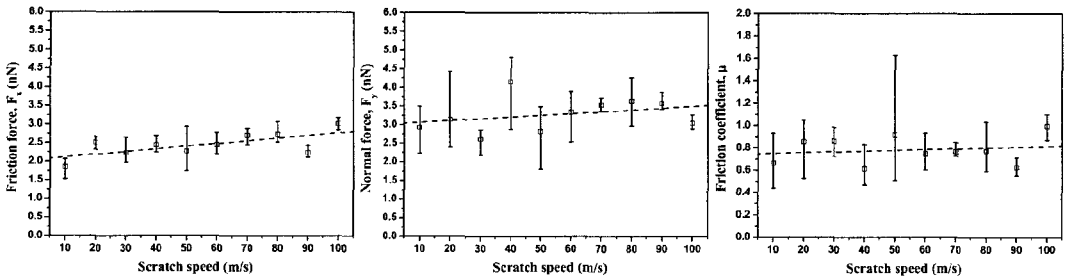
(a) Rest time = 0.5 ps (b) Rest time = 1.0 ps

(c) Rest time = 1.5 ps (d) Rest time = 2.0 ps

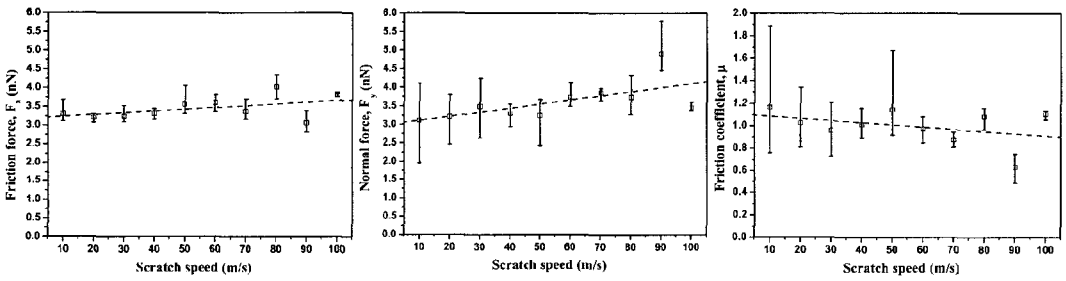
Fig. 4. Snapshots of friction surface at the starts and ends of scratch process for various rest times (scratch depth = 0.5 nm, scratch speed = 30 m/s).



(a) Scratch depth = 0.5 nm

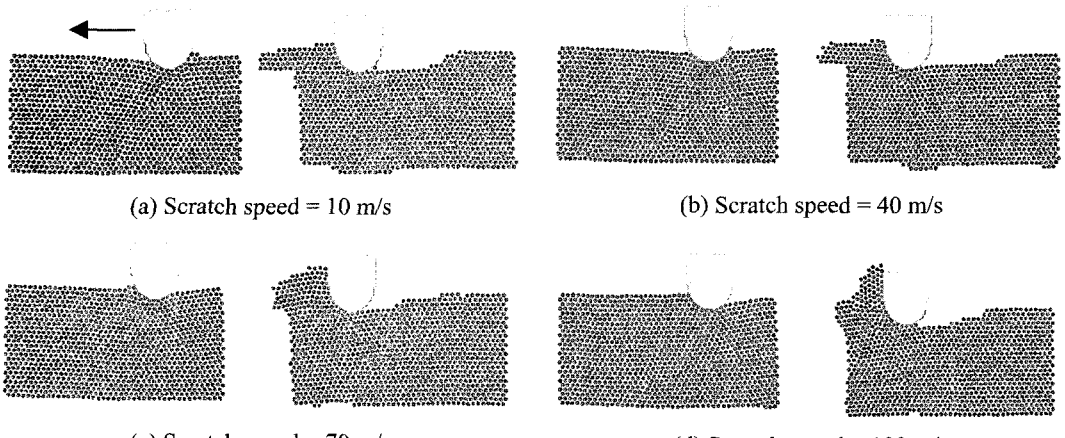


(b) Scratch depth = 1.0 nm



(c) Scratch depth = 1.5 nm

Fig. 5. Average friction force, normal force and friction coefficient versus scratch speed for various scratch depths.



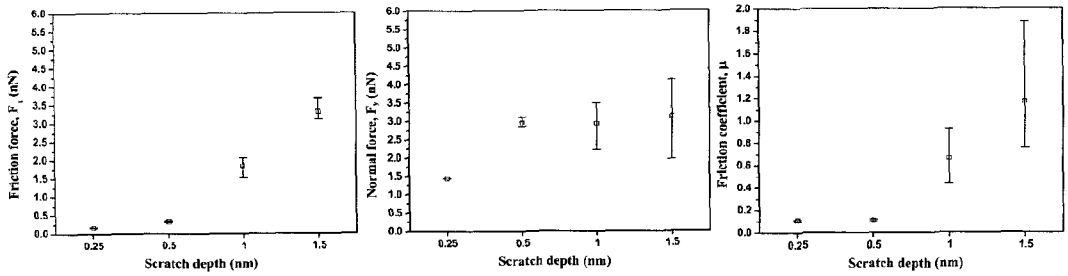
(a) Scratch speed = 10 m/s

(b) Scratch speed = 40 m/s

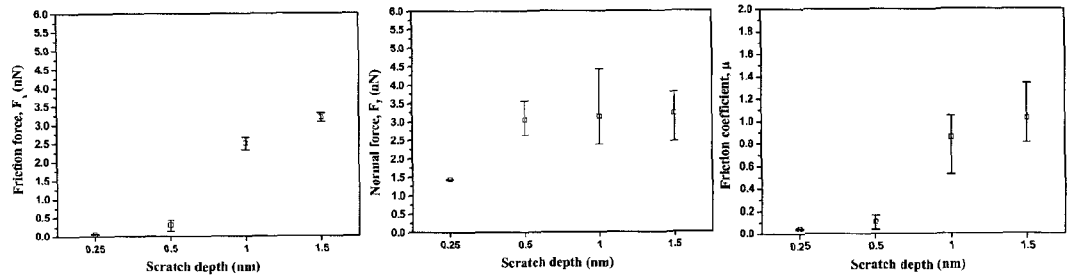
(c) Scratch speed = 70 m/s

(d) Scratch speed = 100 m/s

Fig. 6. Snapshots of friction surface at the starts and ends for various scratch speeds (scratch depth = 1.0 nm, rest time = 0.5 ps).



(a) Scratch speed = 10 m/s



(b) Scratch speed = 20 m/s

Fig. 7. Average friction force, normal force and friction coefficient versus scratch depth for various scratch speeds.

Fig. 7은 마찰 속도가 10 m/s와 20 m/s인 경우에 대해 마찰 깊이에 따른 평균 마찰력과 평균 수직력, 그리고 평균 마찰 계수의 변화를 나타낸다. 평균 마찰력의 크기는 마찰 깊이가 0.25 nm와 0.5 nm일 때는 그 크기가 매우 작으나, 마찰 깊이가 1.0 nm와 1.5 nm 일 때는 평균 마찰력이 크게 증가함을 알 수 있다. 이는 마찰 깊이가 0.25 nm일 때와 0.5 nm일 때에는 표면 변형이나 표면 마모가 거의 일어나지 않아서 표면 마모나 표면 변형보다는 표면과의 상호 작용력이 평균 마찰력에 미치는 영향이 지배적이기 때문이다. 따라서 이 두 경우에는 평균 마찰력의 크기가 표면 변형이나 표면 마모가 일어나는 경우보다 훨씬 작다. 그러나 마찰 깊이가 1.0 nm 이상이 되면 마찰 깊이가 증가할수록 평균 마찰력의 크기 또한 증가하는데 이는 마찰 깊이가 깊어질수록 표면 변형과 표면 마모가 증가하기 때문이다. 또한 마찰 깊이는 평균 수직력에도 영향을 미친다. 그러나 이 경우에는 마찰 깊이가 0.25 nm일 때를 제외하고는 평균 수직력의 크기가 거의 일정하다. 수직력은 탄소 원자들과 구리 원자들 사이의 상호 작용력에 큰 영향을 받으며 접촉 부분의 면적과 비례 관계에 있다. 구리와 접촉하는 탄소의 형상은 반구형이고, 반경이 1.35 nm로 일정하기 때문에 마찰 깊이가 0.5 nm 이상일 때에는 구리와의 접촉 면적이 거의 일정하게 되어 평균 수직력의 크기 역시 거의 일정하게 된다. 따라서 평균 마찰 계수 역시 마찰 깊이가 증가함에 따라 증가하게 된다.

4. 결 론

본 연구에서는 구리와 탄소의 마찰에 대해 마찰 속도, 마찰 깊이, 표면 상태를 달리하며 2차원 분자 동역학 시뮬레이션을 수행하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

(1) 원자 스케일에서의 마찰 및 마모 거동은 접촉하는 순간의 표면 원자들의 상태에 따라 달라질 수 있다.

(2) 마찰 속도가 평균 마찰력에 미치는 영향은 미미하지만, 마모 거동에는 크게 영향을 미친다. 마찰 속도가 작을 때는 표면 변형이 주로 일어나지만, 마찰 속도가 커짐에 따라 표면 마모가 점점 증가하게 된다.

(3) 마찰 깊이가 작을 때(0.25 nm, 0.5 nm)에는 마찰 깊이가 클 때(1.0 nm, 1.5 nm)에 비해 표면 변형이나 표면 마모가 거의 일어나지 않는다. 따라서 마찰력은 주로 표면 원자들과의 상호 작용으로 인해 나타나며, 그 결과 표면 원자들의 상태에 큰 영향을 받게 된다. 반면에 마찰 깊이가 클 때(1.0 nm, 1.5 nm)에는 표면 마모나 표면 변형이 많이 발생하여 여기에 필요한 힘이 상대적으로 크기 때문에 표면 원자들과의 상호 작

용에 의한 영향이 상대적으로 작아진다. 또한 평균 마찰력의 크기는 마찰 깊이가 커질수록 많은 표면 변형이나 표면 마모가 수반되기 때문에 커진다.

후 기

본 연구는 21세기 프론티어연구개발사업인 나노메카트로닉스기술개발사업단의 연구비 지원(02-K14-01-013-1-2)에 의해 수행되었습니다.

기호 설명

F : 힘
H : 구리의 높이
L : 구리의 길이
N : 원자 수
T : 구리의 평균 온도
T_o : 구리의 초기 온도
g : 원자의 운동 자유도
k_B : 볼쯔만 상수 (1.38×10^{-23} J/atom K)
m : 질량
r : 거리
t : 시간
u : 포텐셜 함수
v : 속도
μ : 마찰계수

Subscript
i : 원자 i
j : 원자 j
x : x 방향
y : y 방향

참고 문헌

1. J. Belak and I. F. Stowers, "A molecular dynamics model of the orthogonal cutting process," *Proc. ASPE Annu. Conf.*, pp.76-79, 1990.
2. S. Shimada *et al.*, "Molecular dynamics analysis as compared with experimental results of micromachining," *Ann. CIRP*, Vol. 41, pp. 117-120, 1992.
3. S. Shimada *et al.*, "Feasibility study on ultimate accuracy in microcutting using molecular dynamics simulation," *Ann. CIRP*, Vol. 42, pp. 91-94, 1993.
4. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff, "MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum," *Wear*, Vol. 240, pp. 113-143, 2000.
5. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff, "MD simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum-effect of crystal orientation and direction of cutting," *Wear*, Vol. 242, pp. 60-88, 2000.
6. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff, "Molecular dynamics simulation of the nanometric cutting of silicon," *Phil. Mag. B*, Vol. 81(12), pp. 1989-2019, 2001.
7. D.E. Kim and N.P. Suh, "Molecular dynamics investigation of two-dimensional atomic-scale friction," *J. Tribology*, Vol. 116, pp. 225-231, 1994.
8. J. Shimizu, H. Eda, M. Yoritsune and E. Ohmura, "Molecular dynamics simulation of friction on the atomic scale," *Nanotechnology*, Vol. 9, pp. 118-123, 1998.
9. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff, "Molecular dynamics simulation of atomic-scale friction," *Phys. Rev. B*, Vol. 61(20), pp. 14007-14019, 2000.
10. L.C. Zhang and H. Tanaka, "Towards a deeper understanding of wear and friction on the atomic scale - a molecular dynamics analysis," *Wear*, vol. 211 pp. 44-53 1997.
11. L.A. Girifalco and V.G. Weizer, "Application of the Morse potential function to cubic metals," *Phys. Rev.*, Vol. 114(3), pp. 687-690, 1958.
12. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff, "Molecular dynamics (MD) simulation of uniaxial tension of some single-crystal cubic metals at nanolevel," *Int. J. Mech. Sci.*, Vol. 43(10), pp. 2237-2260, 2001.
13. K. Maekawa and A. Itoh, "Friction and tool wear in nano-scale machining-a molecular dynamics approach," *Wear*, Vol. 188, pp. 115-122, 1995.
14. M.P. Allen and D.J. Tildesley, "Computer simulation of liquids," *Oxford University Press* (New York), p. 80, 1987.