

나노스케일 마찰거동에서 스프링 상수가 마찰에 미치는 영향에 대한 분자동역학 연구

강원빈¹ · 김현준^{2,3*}

¹경북대학교 미래과학기술융합학과 석사과정생

²경북대학교 정밀기계공학과 부교수

³경북대학교 미래과학기술융합학과 부교수

Study on Influence of Spring Constant on Frictional Behavior at the Nanoscale through Molecular Dynamics Simulation

Won-Bin Kang¹ and Hyun-Joon Kim^{2,3*}

¹MS student, Department of Advanced Science and Technology Convergence, Kyunpook National University

²Associate Professor, Department of Precision Mechanical Engineering, Kyunpook National University

³Associate Professor, Department of Advanced Science and Technology Convergence, Kyunpook National University

(Received April 24, 2021 ; Revised April 29, 2021 ; Accepted April 30, 2021)

Abstract – In this study, we investigated the effect of the spring constant on frictional behavior at a nanoscale through molecular dynamics simulation. A small cube-shaped tip was modeled and placed on a flat substrate. We did not apply the normal force to the tip but applied adhesive force between the tip and the substrate. The tip was horizontally pulled by a virtual spring to generate relative motion against the substrate. The controlled spring constant of the virtual spring ranged from 0.3 to 70 N/m to reveal its effect on frictional behavior. During the sliding simulation, we monitored the frictional force and the position of the tip. As the spring constant decreased from 70 to 0.3 N/m, the frictional force increased from 0.1 to 0.25 nN. A logarithmic relationship between the frictional force and spring constant was established. The stick-slip instability and potential energy slope increased with a decreasing spring constant. Based on the results, an increase in the spring constant reduces the probability of trapping in the local minima on the potential energy surface. Thus, the energy loss of escaping the potential well is minimized as the spring constant increases.



© Korean Tribology Society 2021. This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License(CC BY, <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction of the work in any medium, provided the original authors and source are properly cited.

Keywords – spring constant(스프링 상수), friction(마찰), molecular simulation(분자 시뮬레이션), stick-slip(스틱슬립)

1. 서 론

마찰력은 미끄럼운동을 겪는 기계요소의 거동, 성능 및

신뢰성에 영향을 미치는 요소로서 오랫동안 마찰을 저감하거나 제어하기 위한 연구가 이루어져 왔다[1,2]. 마찰력 혹은 마찰계수는 소재의 물성이 아닌 접촉조건에 의존적인 현상이며, 마찰력에 영향을 미치는 조건에는 표면거칠기, 접촉압력, 접촉면적, 온도 등이 있다. 이러한 조건에 의해 마찰력 및 마찰계수가 달라지는 현상에 대한 수많은 연구결과가 발표된 바 있다[3,4]. 상대운동 속도는 마찰과 직접적인 관계를 갖는 요소로서, 마찰과 속도 사이

*Corresponding author: Hyun-Joon Kim

Tel: +82-054-530-1273, Fax: +82-054-530-1278

E-mail: hjoonkim@knu.ac.kr

<https://orcid.org/0000-0002-6817-1004>

<https://orcid.org/0000-0002-7904-3497> (Won-Bin Kang)

의 상관관계에 대한 연구 역시 많은 연구자들에 의해 수행되어왔다[5,6]. Zwornor 등은 원자현미경을 이용하여 탄소동소체(비정질 탄소, 다이아몬드, 흑연)의 마찰거동과 상대운동 속도 사이의 상관관계를 측정하였다. 연구 결과, 일정 속도 이하에서는 마찰력에 거의 변화가 나타나지 않았으나, 특정값을 넘어서는 속도범위에서는 마찰력과 속도 사이에 비례관계가 나타남이 확인되었다. 이 연구에서는 높은 상대속도 조건에서는 속도에 비례하는 점성저항에 의하여 에너지가 소산됨으로써 마찰이 증가한다고 설명하였다[7]. Gnecco 등은 Si 팁과 NaCl(100) 표면 사이의 마찰거동을 원자현미경을 이용하여 측정하고 저속의 상대운동 조건에서의 마찰력과 속도 사이의 대수적 비례관계에 대한 연구결과를 발표하였다. 이들은 마찰력과 속도 사이의 관계가 열적 활성화에 의하여 포텐셜 에너지 장벽을 뛰어넘는 기회의 감소에 의한 것이라고 설명하였다[8]. 이러한 연구들에서는 하나의 질점이 스프링에 매달린 채 표면의 반복되는 포텐셜 에너지를 따라 수평방향으로 이동되는 상황을 나타내는 Prandtl-Tomlinson 모델을 이용하여 속도와 마찰의 관계를 설명하였다[9,10]. 그러나, 이 모델의 주요 변수 중 하나인 스프링 상수에 대한 연구는 거의 이루어지지 않았다. 이 연구에서는 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 스프링 상수가 나노스케일의 마찰에 미치는 영향을 알아보려고 하였다.

2. 시뮬레이션 방법

시뮬레이션 모델은 크게 바닥재와 그 위에서 바닥재와 상대운동하는 소형의 구조물 두 가지로 이루어지며 편의상 각각의 물체를 “바닥재”와 “팁”으로 명명하고자 한다. 이 연구는 임의의 시스템이 상대운동을 겪을 때, 매개변수의 변화가 마찰거동에 미치는 영향을 알아보기 위한 것이므로, 시뮬레이션 대상 물질을 특정하는 것은 큰 의미를 지니지 않는다. 다만, 모델링을 위해서는 실존하는 재료에 해당하는 결정구조 및 격자상수를 지정할 필요가 있으므로, 비교적 포텐셜 함수의 형태가 간단한 재료를 선정하여 시뮬레이션의 효율을 높이고자 하였다. 바닥재와 팁의 결정구조는 면심입방격자(face centered cubic)로 설정하였고 바닥재의 격자상수는 구리(Cu), 팁의 격자상수는 은(Ag)에 상응하는 값을 갖도록 지정하였다. 각기 다른 격자상수를 갖도록 모델링 한 것은 동일한 격자상수를 가진 모델이 접촉하여 마찰할 때, 격자간의 정합(commensurate) 접촉상태가 되는 것을 피하기 위함이다. 바닥재는 X-Y 방향으로 주기경계조건(periodic boundary condition)을 적용하였다. Fig. 1은 시뮬레이션

모델을 나타낸다.

시뮬레이션은 총 두 가지 과정으로 진행되며 각각 시스템의 평형상태를 획득하기 위한 안정화(relaxation)과정, 팁을 바닥재 위에서 상대운동 시키기 위한 이송(sliding)과정으로 구성된다. 모든 시뮬레이션 과정에서 온도는 Nose-Hoover thermostat을 적용하여 300K로 유지 되도록 하였다. 안정화 과정은 시뮬레이션 시간 기준으로 100 ps 동안 진행되었으며, 이어서 이송과정은 1000 ps 동안 진행되었다. 이송 시뮬레이션은 가상의 질점과 팁 사이를 스프링으로 연결하고 가상의 질점을 x 축으로 일정한 속도로 움직여 진행되었는데, 이 때 질점의 이송속도는 분자동역학 시뮬레이션에서 일반적으로 사용되는 속도범위 중 낮은 수준인 0.01 nm/ps, 스프링 상수는 나노스케일 측정 및 실험에 널리 사용되는 AFM 탐침의 스프링 상수에 준하는 0.3~70 N/m 수준으로 설정하였다. 스프링에 가해진 힘은 팁 전체에 균등하게 분산 되도록 하였으며, 팁의 특정위치에 물리적 연결부위를 따로 가지지 않는다. 수직하중은 인가하지 않았으며 팁과 바닥재 사이의 상호작용으로 인한 응착력만이 존재하는 조건에서 시뮬레이션을 수행하였다.

팁과 바닥재의 거동을 모사하기 위해 Morse 포텐셜 함수를 적용하였으며 포텐셜 파라미터는 각각 구리 및 은에 대응하는 값을 적용하였다[11]. 팁과 바닥재 사이의 상호작용은 Lennard-Jones 포텐셜 함수를 사용하였다. 이와 같은 시뮬레이션 개요와 조건이 Fig. 2와 Table 1에 나타나 있다.

3. 결과 및 고찰

가상의 질점에 스프링의 한쪽 끝이 매달려 있고, 나머지 한쪽 끝이 팁에 연결되어 있는 형태로 모델링이 이루어졌으므로 스프링 상수에 의한 거동의 변화를 확인하기 위해서는 질점과 팁의 위치에 관한 관계를 살펴보는

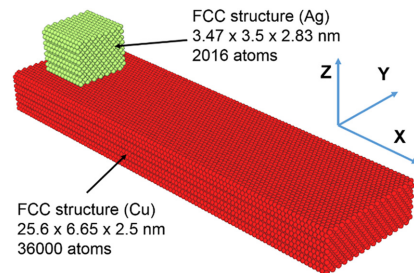


Fig. 1. Simulation model consisted of two object with FCC crystal structure.

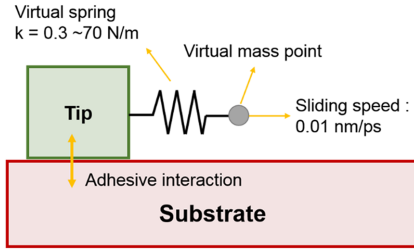


Fig. 2. Schematic of simulation condition and procedure.

Table 1. Simulation conditions

Temperature	300 K
Sliding velocity	0.01 nm/ps
Spring constant	0.3~70 N/m
Potential function	Morse (for identical pair) Lennard-Jones (for non-bonded pair)
Normal force	No external force Only adhesion force

것이 필요하다. 스프링 상수를 다르게 설정하여 시뮬레이션을 수행했을 때, 질점과 팁의 매 순간 위치를 기록한 결과가 Fig. 3에 나타나 있다. 상대적으로 굳은 직선으로 표현된 그래프는 큰 스프링 상수 (66.4 N/m)를 적용하여 시뮬레이션을 수행한 결과이고, 비교적 큰 주파수로 진동하는 그래프는 낮은 스프링 상수 (0.83 N/m)를 적용한 시뮬레이션 결과이다. 그림 안에 삽입된 작은 그래프는 큰 스프링 상수를 적용한 시뮬레이션 결과 중 일부 구간을 확대한 것이다. 큰 스프링 상수를 적용할 경우 질점의 위치와 팁의 위치 사이에 선형비례 관계가 있는 것처럼 보였으나, 확대한 그림을 살펴보면 작은 진폭으로 진동하는 곡선이 나타남을 알 수 있다. 이러한 결과는 스프링 상수의 차이로 인하여 스틱-슬립 거동의 경향이 달라졌기 때문이다. 상대적으로 작은 스프링 상수를 적용한 경우에는, 상당한 수준의 스프링 변형이 일어나기까지, 스프링의 탄성복원력이 마찰력을 넘어서지 못하여 팁이 움직이지 못하는 스틱(stick)거동이 상당히 긴 구간 동안 나타나고, 이어서 슬립이 일어난 이후에도 저주파수의 진동이 이어지는 것에 비하여 큰 스프링 상수 값을 적용한 경우에는 상대적으로 작은 스프링 변형량으로도 마찰력을 넘어서질 수 있어 고주파수의 진동이 나타났다고 판단할 수 있다. 스프링 상수와 스틱-슬립 거동 사이의 상관관계가 마찰력 측정 결과에서도 유사하게 나타났다. Fig. 4은 스프링 상수를 달리하여 이송시뮬레이션을 수행하는 동안 측정된 수평방향의 스프링 힘 그래프이다. 이 연구에서는 스프링에 가해지는 힘에 의하여 팁이 바닥재와 상대운동하므로 이를 마찰력으로 표현하고자 한다. 스프링 상수를 달리할 경우, 마찰력이 진

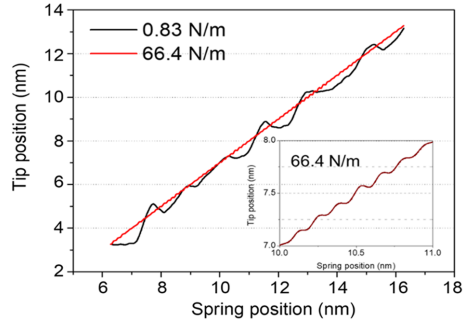


Fig. 3. Relationship between spring mass position and tip position with respect to spring constant.

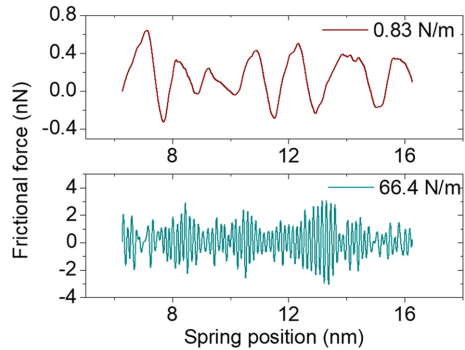


Fig. 4. Frictional force measured during sliding simulation with respect to spring constant.

동하는 주기가 달라진다는 사실을 확인할 수 있으며 진동의 크기 역시 크게 다르게 나타남을 알 수 있다. 스프링 상수가 높은 경우에는 마찰력의 최대, 최소값이 스프링 상수가 낮은 경우에 비하여 상대적으로 크게 나타나지만, 평균 마찰력은 낮게 계산된다.

스프링 상수를 0.3 N/m에서 약 70 N/m까지 변화시키며 이송 시뮬레이션을 진행한 결과 스프링 상수의 변화에 따라 평균 마찰력 역시 다르게 나타난다는 사실을 확인하였다. 스프링 상수가 증가함에 따라 마찰력은 어느 정도 편차는 있으나 전반적으로 감소하는 경향을 나타냈다. Fig. 5에서 나타난 것과 같이 X축을 스프링 상수로 설정하되, log 스케일로 표현하면, 마찰력과 스프링 상수 사이에 반비례 관계가 있음을 알 수 있다. 스프링 상수를 약 200배 증가시킬 경우, 마찰력은 50% 수준의 값으로 감소하는 것을 확인할 수 있었다. 이러한 현상의 원인을 알아보기 위해 Prandtl-Tomlinson 모델에서 거동의 불안정성을 나타내는 무차원 변수인 Stick-slip instability, η 를 다음과 같은 수식을 활용하여 계산하였다[12,13]

$$\eta = \frac{2\pi E}{ka^2}$$

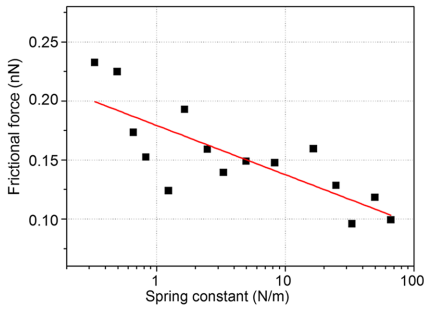


Fig. 5. Relationship between frictional force and spring constant.

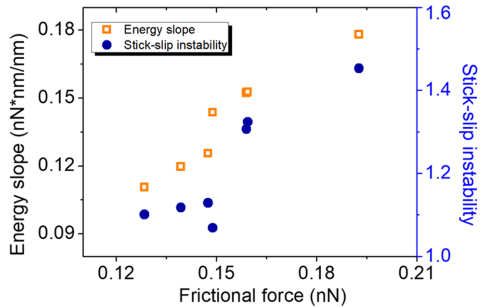


Fig. 6. Relationship between frictional force and potential energy slope/stick-slip instability.

E는 포텐셜의 크기, k 는 스프링 상수, a 는 포텐셜의 주기이다. Instability parameter η 의 값이 1보다 큰 경우, 평형상태를 가질 수 있는 지점이 다수 존재할 수 있는 가능성 때문에, 스틱-슬립이 발생하게 된다. 덧붙여 단위 이동거리 당 포텐셜 에너지의 변화(이하 에너지 기울기)를 계산한 결과 Fig. 6에 나타난 것과 같이 Stick-slip instability parameter와 에너지 기울기가 증가함에 따라 마찰력이 증가하는 경향을 확인할 수 있었다. 이러한 현상은 스프링 상수가 증가할 경우, 표면에 존재하는 포텐셜 에너지 최소점들 (local minima on potential energy surface)을 상대적으로 손쉽게 통과할 수 있기 때문으로 추정된다. 에너지 기울기가 감소한 것은 다시 말해서 팁이 이동하기 위해 필요한 단위 거리당 에너지의 감소를 뜻하며, 이는 에너지 최소점이 아닌 위치에 시스템이 존재함을 시사한다. 반대로 스프링 상수가 작을 경우, 각각의 에너지 최소점에 의하여 이동이 제한되는 현상이 빈번하게 일어나 에너지 우물을 벗어나기 위한 마찰력이 증가하였다고 추측할 수 있다.

4. 결 론

스프링 상수가 마찰력에 미치는 영향에 대해 분자동

역학 시뮬레이션을 수행한 결과, 스프링 상수가 작아질 경우 sick-slip instability와 에너지 기울기가 증가하며, 이 값이 커짐에 따라 스틱-슬립 거동이 촉진되어, 마찰력이 증가함을 확인하였다. 에너지 기울기의 변화는 스프링 상수에 따라 표면의 국부적 에너지 최소점들을 지나칠 가능성이 달라져 에너지 우물을 탈출하기 위한 손실과 마찰력이 영향을 받았음을 시사한다.

References

- [1] Feeny, B., Guran, A. shir, Hinrichs, N., Popp, K., "A historical review on dry friction and stick-slip phenomena", 1998.
- [2] Dong, Y., Li, Q., Martini, A., "Molecular dynamics simulation of atomic friction: A review and guide", *J. Vac. Sci. Technol. Vac. Surf. Films*, Vol.31, pp.030801, 2013.
- [3] Kim, H.-J., Kim, D.-E., "Nano-scale friction: A review", *Int. J. Precis. Eng. Manuf.*, Vol.10, pp.141-151, 2009.
- [4] Manini, N., Mistura, G., Paolicelli, G., Tosatti, E., Vanossi, A., "Current trends in the physics of nanoscale friction", *Adv. Phys. X*, Vol.2, pp.569-590, 2017.
- [5] Tambe, N. S., Bhushan, B., "Friction model for the velocity dependence of nanoscale friction", *Nanotechnology*, Vol.16, pp.2309, 2005.
- [6] Li, Q., Dong, Y., Perez, D., Martini, A., Carpick, R. W., "Speed dependence of atomic stick-slip friction in optimally matched experiments and molecular dynamics simulations", *Phys. Rev. Lett.*, Vol.106, pp.126101, 2011.
- [7] Zwörner, O., Hölscher, H., Schwarz, U., Wiesendanger, R., "The velocity dependence of frictional forces in point-contact friction", *Appl. Phys. Mater. Sci. Process.*, Vol.66, pp.S263-S267, 1998.
- [8] Gnecco, E., Bennewitz, R., Gyalog, T., Loppacher, C., Bammerlin, M., Meyer, E., Güntherodt, H.-J., "Velocity dependence of atomic friction", *Phys. Rev. Lett.*, Vol.84, pp.1172, 2000.
- [9] So, M., Jacobsen, K. W., Stoltze, P., "Simulations of atomic-scale sliding friction", *Phys. Rev. B*, Vol.53, pp.2101, 1996.
- [10] Yang, J., Komvopoulos, K., "A molecular dynamics analysis of surface interference and tip shape and size effects on atomic-scale friction", *J. Tribol.*, Vol.127, pp.513-521, 2005.
- [11] Girifalco, L. A., Weizer, V. G., "Application of the Morse potential function to cubic metals", *Phys. Rev.*, Vol.114, pp.687, 1959.
- [12] Maier, S., Sang, Y., Filleter, T., Grant, M., Bennewitz, R., Gnecco, E., Meyer, E., "Fluctuations and jump dynamics in atomic friction experiments", *Phys. Rev. B*, Vol.72, pp.245418, 2005.
- [13] Sircar, A., Patra, P. K., "A simple generalization of Prandtl-Tomlinson model to study nanoscale rolling friction", *J. Appl. Phys.*, Vol.127, pp.135102, 2020.