

물 분자막의 두께와 윤활특성의 상관관계에 대한 분자시뮬레이션 연구

김현준^{1,2†} · 허세곤³

¹경북대학교 정밀기계공학과 부교수

²경북대학교 미래과학기술융합학과 부교수

³한국기계연구원 3D프린팅장비연구실 책임연구원

Molecular Simulation Study on Influence of Water Film Thickness on Lubrication Characteristics

Hyun-Joon Kim^{1,2†} and Segon Heo³

¹Associate Professor, Department of Precision Mechanical Engineering, Kyungpook National University

²Associate Professor, Department of Advanced Science and Technology Convergence, Kyungpook National University

³Principal Researcher, Department of 3D printing, Korea Institute of Machinery and Materials

(Received October 17, 2022 ; Revised October 29, 2022 ; Accepted October 31, 2022)

Abstract – This paper presents a numerical investigation of the influence of water molecule thickness on frictional behavior at the nanoscale using molecular dynamics simulation. Three different models, comprising water thin films of various thicknesses, were built, and indentation and sliding simulations were performed using the models. Various normal loads were applied by indenting the Si tip on the water film for the sliding simulation to evaluate the interplay between the water thin film thickness and the normal load. The results of the simulations showed that the friction force generally increased with respect to the normal load and thickness of the water thin film. The friction coefficient varied with respect to the normal load and the water film thickness. The friction coefficient was the smallest under a moderate normal force and increased with decreasing or increasing normal loads. As the water film became thicker, the contact area between the tip and water film became larger. Under well-lubricated conditions, the friction force was proportional to the contact area regardless of the water film thickness. As the normal force increased above a critical condition, the water molecules beneath the Si tip spread out; thus, the film could not provide lubrication. Consequently, the substrate was permanently deformed by direct contact with the Si tip, while the friction force and friction coefficient significantly increased. The results suggest that a thin water film can effectively reduce friction under relatively low normal load and contact pressure conditions. In addition, the contact area between the contacting surfaces dominates the friction force.



© Korean Tribology Society 2022. 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 – Contact area(접촉면적), Film thickness(유막 두께), Lubrication(윤활), Molecular simulation(분자 시뮬레이션), Water molecule(물분자)

[†]Corresponding author: Hyun-Joon Kim

Tel: +82-54-530-1273, Fax.: +82-54-530-1278

E-mail: hjoonkim@knu.ac.kr

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

1. 서 론

나노 및 마이크로 스케일에서 상대습도가 마찰력이나 응착력과 같은 표면에서의 현상에 크게 영향을 미친다는 사실이 잘 알려져 있다. 이러한 현상은 대체로 고체 표면에 응축된 물분자에 의한 capillary 효과가 접촉면의 기계적 거동에 지배적으로 영향을 미치기 때문이라고 여겨지나, 경우에 따라서는 물분자에 의한 표면의 passivation 혹은 물분자의 층간침투(intercalation) 등의 현상이 표면에 크게 영향을 미치기도 한다[1-4]. 지난 수십년간 상대 습도의 마찰 및 응착력에 대한 영향을 실험적으로 규명한 많은 연구가 발표되어 왔다.

Moutinho는 atomic force microscopy(AFM)을 이용하여 AFM 팁의 형상, 표면거칠기, 상대습도 조건이 응착력에 미치는 영향을 실험적으로 평가하였는데, 이 연구에서는 습도가 증가할수록 대체로 응착력이 높아진다는 결과를 제시하였다. 이러한 현상의 원인은 팁과 바닥면 사이의 capillary 상호작용에 의한 것이라고 추정하였으며, 특히 물분자의 두께가 충분히 두꺼운 경우에는 capillary 힘이 응착력에 주도적으로 영향을 미친다고 파악하였다[5].

Shi는 수소가 함유된 다이아몬드상 탄소(DLC-H)와 무수소 다이아몬드상 탄소(DLC)에 대해 상대습도를 바꾸어가며 마찰시험을 수행하였다. DLC-H 시편은 습도가 증가함에 따라 마찰력이 증가하는 경향을 나타냈으나, DLC 시편은 낮은 습도에서 마찰력이 더 높은 현상을 보여주었다. 저자들은 이러한 현상의 원인으로 DLC가 갖는 dangling bond가 수소에 의해 passivation이 되는 현상과 물분자에 의한 capillary 현상을 제시하였다[6].

Bhowmick은 여러층을 갖는 그래핀의 마찰거동과 상대습도사이의 상관관계를 실험을 통해 규명하였다. 이 연구에서는 물분자의 H 및 OH의 흡착이 그래핀의 결합(sp², sp³)을 변화시켜 마찰의 변화를 가져온다는 주장을 제안하였다[7].

그 외에도 상대습도에 따른 이황화몰리브덴 박막(MoS₂) 및 육방정 질화붕소(h-BN)와 같은 소재의 마찰 특성에 대한 연구도 몇몇 연구자들에 의해 진행된 바 있다[2,8].

이처럼 다양한 연구가 이루어졌음에도 불구하고, 물분자가 마찰에 미치는 영향에 대한 더 깊은 이해를 위해서는 원자수준에서의 메커니즘에 대한 지속적인 연구가 수행될 필요가 있다. 따라서 이 연구에서는 고체표면에 응축된 물분자막의 두께가 마찰현상에 미치는 영향을 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 규명하고자 하였다.

2. 연구방법 및 내용

2-1. 시뮬레이션 모델수립

물분자막의 두께가 마찰특성에 미치는 영향을 규명하기 위하여 Fig. 1에 나타난 것과 같이 물분자의 개수를 다르게 설정한 3종류의 모델을 수립하였다. 모델은 크게 바닥재, 물 분자, 그리고 상대재로 구성된다. 바닥재로는 면심입방격자 구조를 갖는 대표적 연성소재인 단결정 Cu를 적용하였고, 15.3 × 13.3 × 2.5 nm³ 크기의 육면체로 설정하였다. 연성소재를 바닥재로 설정한 것은, 바닥재의 변형으로 인하여 물분자가 계면에서 쉽게 탈락되지 않을 수 있어 비교적 넓은 하중범위에서의 윤택효과를 알아보기에 적합하기 때문이다[9].

물분자는 단결정 Cu 바닥재 위에 임의의 배향과 위치를 갖도록 배치하였는데, 이 연구에서는 물분자막의 두께를 2, 3, 5 레이어로 각기 다르게 모델링 하고, 각각을

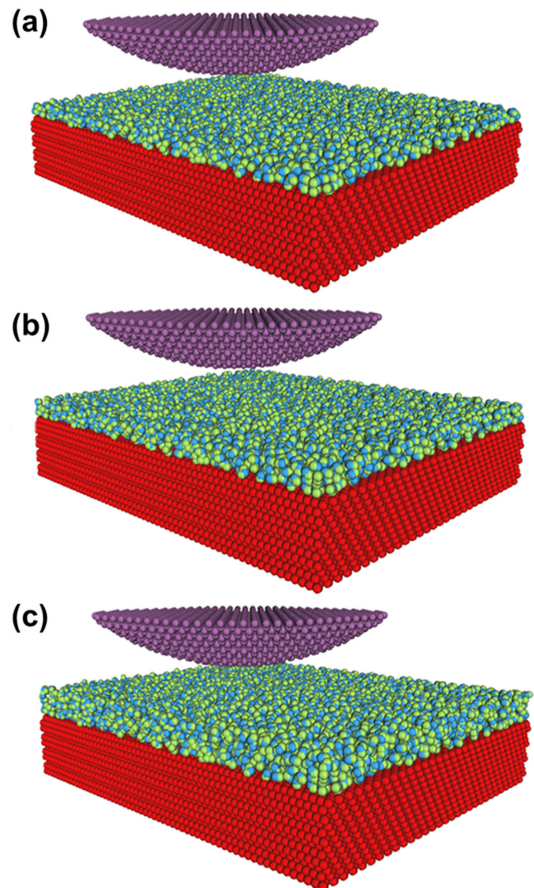


Fig. 1. Simulation models with (a) 2 layers, (b) 3 layers and (c) 5 layers of water molecules.

W2, W3, W5 모델이라고 명명하였다. 이 때, 한 레이어는 총 1050개의 물분자로 구성되도록 하였으므로, 서로 다른 3 종류의 모델이 갖는 물분자 개수는 각각 2100, 3150, 5250개이다.

상대재는 바닥재 및 물분자와 마찰을 일으키기 위한 것으로서, 이 연구에서는 반구형의 Si 단결정 팁을 상대재로 설정하였다. 단결정 Si구조에 비하여 Cu 순금속 바닥재의 기계적 강도가 현저하게 낮으므로, 계산의 편의를 위하여 상대재는 강체로 지정하였다.

2-2. 시물레이션 조건

시물레이션은 NVT 앙상블 조건을 토대로 수행되었고, 모든 구간의 시물레이션에서 온도는 Nose-Hoover thermostat을 활용하여 300 K으로 일정하게 유지되었다. 바닥재인 Cu 단결정 구조의 거동을 모사하기 위하여 Morse 포텐셜 함수를 적용하였고, 물분자의 거동은 simple point charge/extended (SPC/E) 모델을 적용하여 해석하였다. SPC/E 모델을 적용할 경우, 비결합 상호작용(non-bonded interaction)과 물분자의 부분 전하(partial charge)의 영향을 각각 계산함으로써 물분자의 거동을 모사할 수 있다. 화학적 결합을 하지 않는 것으로 간주하는 원자쌍의 상호작용 계산은 Lennard-Jones 포텐셜 함수를 활용하여 진행하였다. 포텐셜 함수에 적용되는 파라미터 값은 기존의 문헌을 참고하여 결정하였다[10-13].

시물레이션은 안정화, 압입, 안정화, 수평이송의 순서로 진행되었고, 안정화 과정은 최소 100 ps의 기간동안 진행되었다. 초기 모델에서는 물분자의 배향과 위치가 무작위로 지정되어 에너지가 매우 높은 상태이므로, 충분히 긴 시간동안 안정화를 수행함으로써 전체 시스템이 낮은 에너지 상태를 획득할 수 있도록 하였다. 이 과정에서 무작위로 배치된 물분자들이 초기 상태에 비하여 보다 조밀하게 배열되는 현상이 나타남을 확인하였으며, W2, W3, W5 모델의 평균 막 두께는 각각 0.306, 0.523, 0.750 nm로 안정화되었음이 확인되었다.

안정화 과정 이후에는 수직하중 인가를 위한 압입과정이 진행되었다. 결정질 실리콘 팁을 수직방향으로 0.05 nm/ps의 속도로 하강시켜 수직하중이 인가되도록 하였으며, 이 연구에서는 수직하중 값이 30, 50, 70, 100, 150 nN일 때의 마찰 거동을 알아보고자 하였다. 다만, 압입과정 이후 재안정화 과정을 거치며 실리콘 팁 하단의 물분자가 주변으로 밀려나면서 수직하중이 감소되는 현상이 나타났으며, 그로 인하여 압입과정에서 인가한 수직하중이 동일하더라도, 수평이송 과정에서 각 모델 별 평균 수직하중은 서로 상이하게 나타났다. 수평이동 과

Table 1. Simulation conditions

Simulation condition	Value/Method		
Layer of water molecules	2	3	5
Number of water molecules	2,100	3,150	5,250
Thickness of water molecules (nm)	0.306	0.523	0.750
Periodic boundary condition	X, Y axis		
Normal load (nN)	30-150 (indentation) 10-100 (sliding)		
Ensemble	Canonical (NVT)		
Sliding/Indentation speed (nm/ps)	0.05		
Potential functions	Morse, L-J		

정에서는 결정질 실리콘 팁을 수평방향으로 0.05 nm/ps의 속도로 이송하며 실리콘 팁에 가해지는 힘을 합산하여 수직력 및 마찰력을 관찰하였고, 이 과정에서 나타나는 물분자와 실리콘 팁 사이의 접촉면적을 측정하였다.

3. 시물레이션 결과

3-1. 물분자 두께에 따른 마찰특성

수평이송 시물레이션을 수행한 결과 Fig. 2에 나타난 것과 같이 마찰력이 획득되었다. 모델에 따라 X축 상의 위치 (평균 수직하중)가 각기 다른 것은 앞서 서술한 것과 같이 재안정화 과정에서 실리콘 팁 하단에 위치한 물분자가 주변으로 밀려나는 정도가 달라 안정 상태에서의 수직하중이 서로 다르기 때문이다. 수직하중이 약 50 nN 이하일 경우, W2 및 W3 모델은 비교적 낮은 마찰력을

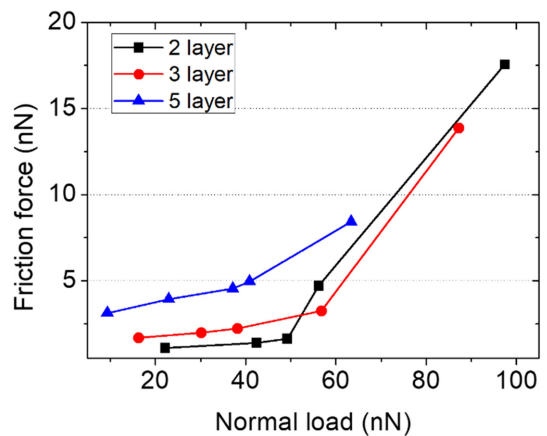


Fig. 2. Friction force of models with 2,3, and 5 layers of water molecules.

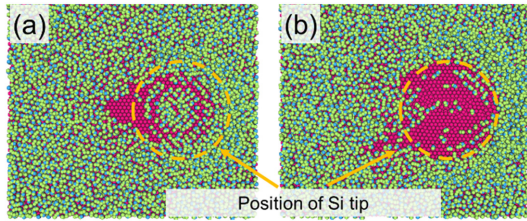


Fig. 3. Water molecules beneath the Si tip under normal load of (a) 22 nN and (b) 97 nN.

나타내는 것에 비하여 W5 모델의 경우에는 상대적으로 더 높은 마찰력을 나타냈다. 수직 하중이 50 nN 이상으로 증가할 경우, W2, W3 모델은 마찰력이 급격하게 증가하는 것에 비하여 W5 모델의 마찰력 증가율은 상대적으로 낮게 나타났다. W2, W3 모델이 급격한 마찰력 증가를 보이는 이유는 수직하중이 증가함에 따라 실리콘 팁이 바닥재와 직접적으로 접촉하기 때문이다. Fig. 3은 W2 모델에 대해 시뮬레이션을 수행하였을 때, 실리콘 팁의 시각화를 비활성화하여 물분자의 분포를 나타낸 것이다. Fig. 3(a)와 (b)는 각각 평균수직하중이 22 nN 및 97 nN일 때의 결과이며, 저하중이 인가되었을 때에는 팁 하단에 상당량의 물분자가 존재하는 것에 비하여 고하중이 인가되었을 때에는 대부분의 물분자가 팁 하단에서 밀려나 있음을 알 수 있다. 물분자막의 두께가 더 얇은 W2 모델의 급격한 마찰력 증가현상이 W3 모델보다 더 작은 수직하중 조건에서 나타난다는 점 또한, 이러한 추정을 뒷받침한다. 이러한 이유로 W5 모델은 동일한 수직하중 조건일 때, 실리콘 팁과 바닥재 사이의 접촉이 W2 및 W3 모델에 비해 적게 나타나, 비교적 낮은 마찰력 증가율이 나타난 것으로 판단된다.

마찰력을 수직하중으로 나누어 마찰계수로 환산한 결과는 Fig. 4와 같다. 가장 낮은 수직하중 (초기 수직하중 30 nN 조건)에서는 W5 모델의 마찰계수는 약 0.33으로 W2, W3 모델이 각각 0.05, 0.1의 마찰계수를 나타낸 것에 비하여 매우 크게 나타난 것을 알 수 있다. 물 분자막의 유효효과에 대한 기존 연구결과에서, 바닥재에 심각한 소성변형이 일어나는 경우 획득된 마찰계수가 0.3 수준이라는 것을 고려할 때 W5 모델의 마찰계수 0.33은 물분자에 의한 유효성이 충분히 일어나고 있다고 추정되는 상황임에도 이례적으로 높은 값이라고 할 수 있다[9]. 세 모델 모두 수직하중이 약 40-50 nN 수준으로 증가할 때까지는 마찰계수가 지속적으로 감소하였고, 수직하중이 그 이상으로 증가하는 경우에는 반대로 마찰계수가 다시 증가하는 현상이 발견되었다. W2, W3, W5 모델의 최소 마찰계수는 0.033, 0.057, 0.12로 나타났으며,

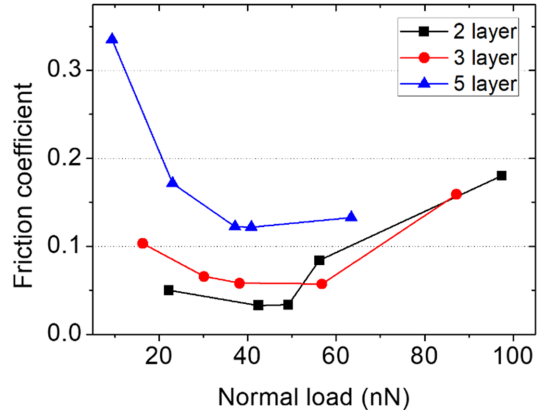


Fig. 4. Friction coefficient of models with 2, 3, and 5 layers of water molecules.

W2와 W3 모델의 마찰계수는 유체유효성에 근접하는 수준이었음을 알 수 있다. 그에 비하여 W5 모델은 물분자막의 두께가 상당히 두꺼움에도 불구하고 모든 수직하중 조건에서 혼합유효 및 경계유효에 해당하는 수준의 마찰계수가 나타났다.

고하중에서 마찰계수가 증가하는 현상은 Fig. 3에서도 확인할 수 있듯, 물분자가 실리콘 팁으로부터 전달되는 수직하중을 충분히 지지하지 못하여 유효효과를 상실하기 때문으로 판단된다. 팁과 바닥재가 직접적으로 접촉하고, 바닥재가 소성변형이 일어나는 것이 마찰계수 상승의 주된 원인으로 추정된다. 반면, 저하중에서 물분자막의 두께가 두꺼울수록 마찰계수가 높은 현상은 물분자에 의한 점성저항이 작용하였기 때문으로 판단되었다.

3-2. 접촉면적 분석

물분자 두께에 따라 마찰계수가 상이하게 나타나는 현상의 원인을 분석하기 위하여 물분자와 실리콘 팁 사이의 접촉면적을 분석하였다. 나노스케일에서는 원자 사이의 접촉면적에 대한 정의가 모호하므로, 이 연구에서는 접촉상태에 놓인 원자에 대한 정의와 원자반지름을 이용한 면적 계산을 활용하여 접촉면적을 규정하였다[14,15].

실리콘 원자와 물분자의 산소 혹은 수소원자 사이의 거리가 평형거리의 105% 보다 짧은 경우 두 원자가 접촉상태라고 가정하였다. 두 원자 사이의 평형거리 대신 평형거리의 105% 값을 사용한 것은 원자들의 순간적인 진동에 의하여 거리가 일시적으로 멀어지는 경우를 고려하여 5%의 여유값을 부여하였기 때문이다. 접촉상태로 간주되는 실리콘 원자의 개수를 N_c , 실리콘 원자의 원자 반지름을 r_{Si} 라고 하였을 때, 총 접촉면적은 다음과 같

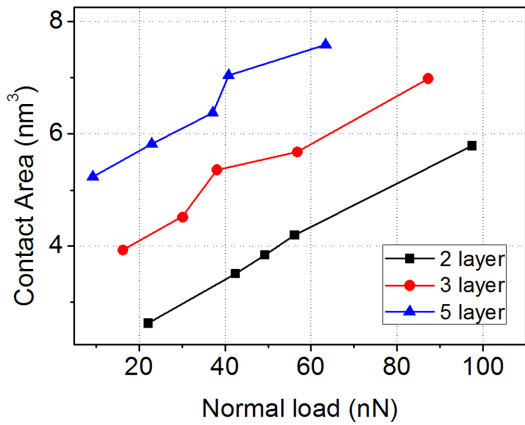


Fig. 5. Contact area between the Si tip and the water molecules with respect to normal load.

은 수식을 이용하여 계산하였다.

$$A_{total} = N_c \cdot \pi r_{si}^2$$

모델별로 수직하중 조건에 따라 나타나는 접촉면적을 계산한 결과 Fig. 5에서 확인할 수 있듯, 수직하중과 접촉면적이 비례관계에 가깝게 나타났고, 모델의 물분자막 두께가 두꺼울수록 접촉면적이 더 크게 나타났다. 특히 동일한 수직하중 조건이 인가되더라도 물분자막이 두꺼운 경우 접촉면적이 두배에 가깝게 차이가 나는 것을 확인할 수 있었다.

물분자와 팁 사이의 접촉면적이 마찰력에 미치는 영향에 대해 알아보기 위해 Fig. 6과 같이 접촉면적과 마찰력 관계를 그래프로 표현하였다. 접촉면적이 넓어질수록 마찰력이 증가하는 경향이 나타나는데, 물분자막의 두께에 따라 마찰력 증가율이 급격하게 달라지는 시점이 다르게 나타난다는 사실을 확인할 수 있었다. 마찰거동을 마찰력의 증가율을 기준으로 크게 두 영역으로 나눌 수 있는데, 마찰력의 증가율이 작은 경우는 물분자에 의한 윤활효과가 효과적으로 나타나는 경우이고, 마찰력의 증가율이 큰 경우는 팁과 바닥재 사이의 직접적인 접촉이 일어나 ploughing 현상이 일어나는 상황으로 규정할 수 있다. Fig. 6에 나타난 결과에서 한가지 흥미로운 점은 물분자에 의한 윤활효과가 효과적인 구간에서는 물분자막의 두께와 무관하게 마찰력의 증가율이 비교적 일정하게 나타났다는 사실이다. 이러한 결과는 윤활상태에서의 마찰력이 명백하게 팁과 물분자 사이의 접촉과 점성저항에 의한 결과임을 시사한다. 다만, W5 모델의 증가율은 W2 및 W3 모델의 마찰력 증가율 그래프와 비

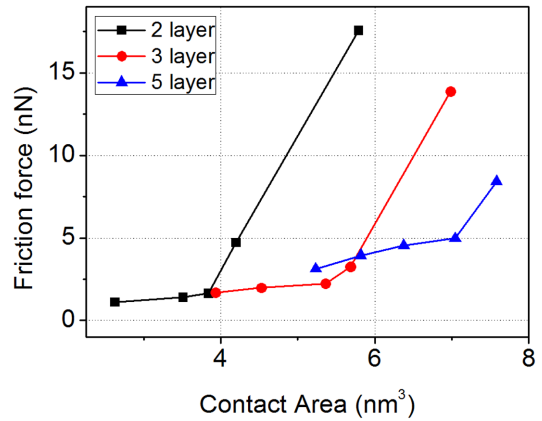


Fig. 6. Friction force with respect to the contact area.

교하여 y축방향으로 약간의 수평이동이 나타나는데, 이것은 W5 모델의 경우 다른 모델에 비하여 물분자의 capillary 효과가 더 두드러지게 나타나 물분자가 팁 주변을 둘러싸는 pile-up을 발생시켜 추가적인 저항력을 제공하였기 때문으로 추정된다.

Fig. 7은 마찰력 증가율의 천이가 일어나기 전, 후의 바닥재 변형을 나타낸 것이다. Fig. 7(a)는 윤활이 효과적으로 이루어져 접촉면적에 따른 마찰력 증가율이 작은 경우, 바닥재가 탄성변형을 함을 나타낸다. Fig. 7(b)는 마찰력 증가율이 큰 경우, 바닥재가 소성 변형함을 나타내고 있다. 이러한 현상은 고하중에서 마찰력이 크게 증가하는 현상의 원인이 팁과 바닥재의 직접적인 접촉과 바닥재의 소성변형임을 시사한다. 반대로 물분자에 의한

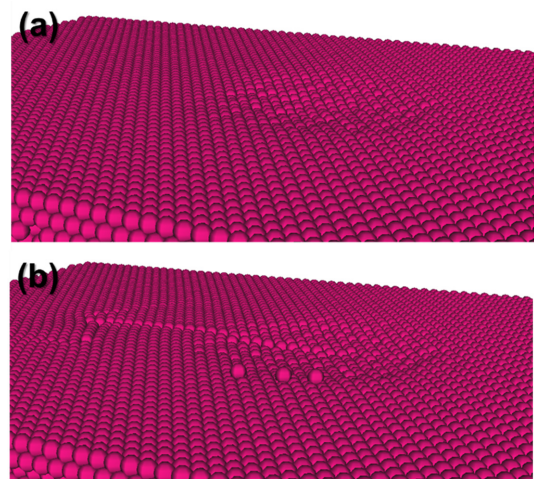


Fig. 7. Substrate deformation of W2 model under (a) well lubricated condition and (b) poor lubricated condition.

윤활효과는 접촉압력을 낮춰, 바닥재의 변형을 막고 기계적 걸림현상을 저감하는 과정에서 나타나는 것으로 판단된다[9].

4. 결 론

고체표면에 응축된 물분자막의 두께에 따른 마찰력의 경향을 분자동역학 시뮬레이션을 통해 계산한 결과, 다음과 같은 사실을 확인할 수 있었다.

1. 고체 표면에 응축된 물분자는 물분자의 두께와 수직하중 조건에 따라 윤활효과를 제공할 수 있으며, 이 연구에서 활용한 조건에서는 유체윤활상황에 준하는 0.03 수준의 마찰계수를 획득할 수 있었다.

2. 고체 표면에 응축된 물분자의 두께가 두꺼워질수록 대체로 마찰력이 높아지는 현상이 나타났다.

3. 충분히 두꺼운 물분자막에 의해 고체 사이의 접촉이 분리되는 유체윤활 상태가 나타나더라도 점성저항에 의해 마찰계수가 0.3 이상으로 매우 높게 나타날 수 있음을 확인하였다.

4. 유체윤활 상태에서 물분자와 팁 사이에 형성되는 접촉면적과 마찰력 사이에는 선형 비례관계에 가까운 경향이 나타남을 확인하였다.

이러한 결과는 다습한 환경에서 고체표면에 응축된 물분자의 두께가 나노스케일 마찰에 미치는 영향을 파악하기 위한 기초지식으로 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

Acknowledgements

이 논문은 2021년도 정부(교육부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 기초연구사업임(No. 2021R111A3060608).

References

- [1] Abou Gharam, A., Lukitsch, M., Qi, Y., Alpas, A., "Role of oxygen and humidity on the tribo-chemical behaviour of non-hydrogenated diamond-like carbon coatings", *Wear*, Vol.271, pp.2157-2163, 2011.
- [2] Tran-Khac, B.-C., Kim, H.-J., DelRio, F. W., Chung, K.-H., "Operational and environmental conditions regulate the frictional behavior of two-dimensional materials", *Appl. Surf. Sci.*, Vol.483, pp.34-44, 2019.
- [3] Tian, H., Matsudaira, T., "The role of relative humidity, surface roughness and liquid build-up on static friction behavior of the head/disk interface", Vol.115, No.1, pp.28-35, 1993.
- [4] Jones, R., Pollock, H. M., Cleaver, J. A., Hodges, C. S., "Adhesion forces between glass and silicon surfaces in air studied by AFM: Effects of relative humidity, particle size, roughness, and surface treatment", *Langmuir*, Vol.18, pp.8045-8055, 2002.
- [5] Moutinho, H. R., Jiang, C.-S., To, B., Perkins, C., Muller, M., Al-Jassim, M. M., Simpson, L., "Adhesion mechanisms on solar glass: Effects of relative humidity, surface roughness, and particle shape and size", *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol.172, pp.145-153, 2017.
- [6] Shi, J., Gong, Z., Wang, Y., Gao, K., Zhang, J., "Friction and wear of hydrogenated and hydrogen-free diamond-like carbon films: relative humidity dependent character", *Appl. Surf. Sci.*, Vol.422, pp.147-154, 2017.
- [7] Bhowmick, S., Banerji, A., Alpas, A. T., "Role of humidity in reducing sliding friction of multilayered graphene", *Carbon*, Vol.87, pp.374-384, 2015.
- [8] Zhao, X., Perry, S. S., "The role of water in modifying friction within MoS2 sliding interfaces", *ACS applied materials & interfaces*, Vol.2, pp.1444-1448, 2010.
- [9] Kim, H.-J., "Lubrication Characteristics of Condensed Water Molecules at Solid Surface through Molecular Simulation", *Tribol. Lubr.*, Vol.37, pp.195-202, 2021, <https://doi.org/10.9725/kts.2021.37.5.195>
- [10] Pei, Q., Lu, C., Fang, F., Wu, H., "Nanometric cutting of copper: A molecular dynamics study", *Comput. Mater. Sci.*, Vol.37, pp.434-441, 2006, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2005.10.006>
- [11] Xie, L., Brault, P., Thomann, A.-L., Bedra, L., "Molecular dynamic simulation of binary ZrxCu100-x metallic glass thin film growth", *Appl. Surf. Sci.*, Vol.274, pp.164-170, 2013, <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.03.004>
- [12] Zhang, Q., Chan, K.-Y., Quirke, N., "Molecular dynamics simulation of water confined in a nanopore of amorphous silica", *Mol. Simul.*, Vol.35, pp.1215-1223, 2009, <https://doi.org/10.1080/08927020903116029>
- [13] Xu, Z., Buehler, M. J., "Nanoengineering heat transfer performance at carbon nanotube interfaces", *ACS nano*, Vol.3, pp.2767-2775, 2009, <https://doi.org/10.1021/nn9006237>
- [14] Kim, H.-J., "Determination of Contact Area of Cylindrical Nanowire using MD Simulation", *J. Korean Soc. Tribol. Lubr. Eng.*, Vol.32, No.1, pp.9-17, 2016, <http://doi.org/10.9725/kstle.2016.32.1.9>
- [15] Kim, H.-J., Chung, K.-H., "Atomistic investigation of the effect of contact condition on frictional properties of nanowire", *Appl. Surf. Sci.*, Vol.534, pp.147629, 2020.