

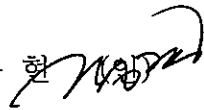
## 연차 보고서 (1차)

사업명	KAIST Grand Challenge 30 Project		
과제명	(국문) 마찰력의 원천적 이해: 제5원소		
	(영문) Fundamental Understanding of Friction Force: The Fifth Element		
연구책임자	김용현	소속	한국과학기술원
총수행기간 (1단계)	2018. 01. 01. ~ 2022. 12. 31. (5년)		
당해연도 협약기간	2018. 01. 01. ~ 2018. 12. 31. (1년)		
당해연도 사업비(원)	20,000,000		

자체연구협약서(KAIST Grand Challenge 30 Project)제5조에 의거하여  
연차보고서 2부를 제출합니다.

2019년 1월 14일

연구책임자: 김용현



한국과학기술원 총장 귀하

## I. 해당 연도 추진 현황

### I-1 기술개발 추진 내용

미시세계에서 나타나는 마찰 현상은 거시세계에서 익히 알려진 법칙으로는 설명되지 않는다. 마찰력은 두 접촉하여 움직이는 두 물질의 계면에서 나타나는 일종의 저항력으로 생각할 수 있다. 그러나 미시세계에서의 마찰현상은 여전히 원천적으로 이해되지 않고 있으며, 근본적으로 마찰력을 증가시키는 변수와 동작원리가 모호한 개념으로 남아있다.

거시세계에서 알려진 법칙은 Amontons 법칙이다. 마찰력은 수직항력과 관련되며, 움직이는 물체에서 접촉 면적과 속도는 변수가 되지 않는다. 나노수준의 계면에서는 이 법칙이 통용되지 않는다. Bowden and Tabor에 의하면, 미시적인 표면의 거칠기와 원자수준의 접촉 면적이 마찰력의 크기를 결정짓는 변수가 된다. 이때 국소적 전단응력은 마찰력과 관련되어 있는데 이는 접촉하는 면적이 크게 작용한다.

또한 두 물질이 접촉하고 상대적인 운동을 하게 되면 두 계면의 원자간 상호작용으로 인해 접촉력 및 저항력이 발생하게 된다. 기본적으로 틱을 고체 시편위에서 이동시키면서 측정하게 되면, 틱과 시편 사이의 계면에서 원자간의 상호작용으로 운동에너지가 발생하게 된다. 이 운동에너지는 열의 형태로 계면에서 변환되어 사라질 것이다. 이러한 에너지 소실의 관점에서 마찰력을 이해하려는 것이 본 연구의 기본적인 목표이며, 열 에너지는 물질이 고체인 경우에는 특히 포논과 관련되어 있음이 잘 알려져 있다. 마찰력과 열 에너지 발생 및 소실 그리고 관련된 포논의 기여도의 상관관계를 밝히면 근본적인 미시적 마찰 현상을 규명할 수 있다.

예를 들어, 다이아몬드 표면을 수소와 중수소로 처리하여 마찰력을 측정하였을 때, 그 크기가 다름이 보고되었는데 이는 에너지를 소실하는 능력이 두 표면에서 차이가 나기 때문이다. 수소보다 무거운 중수소의 경우 낮은 진동 에너지를 갖고 있기 때문에 같은 시간동안 수소에 비해 열 에너지를 잘 소실 하지 못한다. 반대로, 수소 표면에서는 에너지 소실이 더 크기 때문에 큰 마찰력이 나타나게 된다. 또한 이층 구조의 그래핀이 단일층 그래핀보다 마찰력이 작다는 사실도 보고되었다. 이는 단일층 그래핀이 전자-포논 커플링 정도가 크고, 에너지 소실에 관여하는 채널이 많기 때문이다.

따라서, 나노수준 계면에서의 마찰현상을 이해하기 위하여 열 에너지, 정확히는 고체에서 정의되는 포논 에너지의 소실과정을 파악해야 한다. 마찰에 의한 운동 에너지 발생으로 여기되는 포논 모드를 이해하면 마찰력의 크기 변화를 정성적으로 예측할 수 있다.

## I-2 해당 연도 추진 실적

나노 수준 계면에서 마찰현상을 근본적으로 이해하려면, 마찰력 그리고 미시적 열 에너지 소실과 관련된 포논 모드 분석이 필요하다. 마찰력과 포논의 상관관계를 파악하는 것은 마찰력 기초이론 개발을 위한 첫 단계로, 대표적인 2차원 물질인 그래핀 계면을 모델링하여 연구를 수행하였다. 해당 결과를 통하여 미시적 계면에서 포논 전도 및 에너지 소실 특성을 이해할 수 있으며, 마찰력과 포논의 상관관계를 규명할 수 있었다. 또한 포논 모드를 면내 방향과 면외방향으로 분석하여, 열 에너지 수송 또는 소실이 계면에서 특정한 방향성을 갖는 지 분석할 수 있었다. 이는 특정한 모드를 갖는 물질 계면에서는 마찰력이 달라 질 수 있음을 나타낸다.

계면에서 나타나는 에너지 소실과 마찰력의 관계를 이해하기 위하여, 그래핀과 삼입된 물 층 그리고 마이카 기판 구조를 모델링하여 포논 계산을 수행하였다. 특히 각 포논모드를 면내 방향과 면외 방향 모드로 분해하여 면밀히 분석하였다. 이 때 물층은 그래핀과 상호작용하여 면외 방향으로의 새로운 포논모드를 형성하는 것을 알 수 있었으며, 이는 그래핀이 면외 방향으로 강하게 진동하여 에너지 소실 및 마찰력을 증가시키는 결과를 가져왔다. 표면에서 움직이는 팁의 운동에너지는 물과 그래핀에 의해 만들어진 새로운 면외 방향 진동모드에 의해서 기판으로 빠져나갈 수 있다. 또한 면내 방향모드는 물 층에 관계없이 일정하여 에너지 소실 변화에 큰 영향을 주지 않을 것으로 예측하였다.

$D_2O$ 와  $H_2O$ 가 삼입될 시에 동위원소 효과에 의한 마찰력 차이도 발생함을 규명하였다.  $D_2O$ 같은 경우에  $H_2O$ 보다 질량이 무겁기 때문에 낮은 진동 주파수를 갖게 되며 이는 단위 시간당 에너지 소실이 적게 일어나게 한다. 반대로 수소는 빠르게 진동하여 기판과의 충돌이 많아지고 이는 에너지 전달이 효율적으로 일어나 마찰력도 클 수 있음을 보여주었다.

## II. 결론 및 차기 연도 계획

1차년도의 구체적인 연구목표는 계면에서 포논과 마찰력의 상관관계를 분석하고, 마찰력 이론 구축 및 개발을 위한 토대를 마련하는 것이며, 팁과 2차원 물질 계면 그리고 기판 시스템을 모델링하고 분석한 결과는 포논과 마찰력의 상관관계를 잘 보여주었다. 결론적으로 면외 방향과 면내 방향으로의 포논모드 분석으로, 물질의 포논 특성 차이가 에너지 소실 및 마찰력 차이를 가져옴을 규명하였다. 이는 예측했던 것처럼, 마찰력에 의한 팁의 운동 에너지가 계면에서 열 에너지로 변환되고 고체내부의 특정한 포논 모드를 통해 에너지가 소실될 수 있음을 의미한다.

차기 연도에는 그래핀과 더불어 대표적인 이차원 물질인  $\text{MoS}_2$ 에서도 포논 동역학에 의한 에너지 소실 메커니즘이 작동하는지 규명되어야 한다. 이를 통해 일반적인 이차원 물질에서 나타나는 마찰 현상 이론으로 확장해 나갈 수 있다. 또한 그래핀과 달리  $\text{MoS}_2$ 는 같은 조성내에서 다양한 상변화 상태를 갖을 수 있는데, 이런 상변화 상태 및 포논 모드의 변화가 에너지 소실 및 마찰력 차이로 나타날 수 있는 지, 그 때 특정 포논모드가 관여하는 지에 대한 이론적인 메커니즘 파악이 추가로 요구된다.

마찰력과 포논 동역학의 이해를 바탕으로, 또 다른 단기 목표중의 하나인 마찰력에 의한 포논-전자 상호작용 현상의 근본적 원리를 파악할 계획이다. 마찰력에 의한 에너지 발생 및 소실 그리고 그 결과로 형성된 전하 발생에 의한 마찰전기 현상을 근본적으로 설명할 수 있는 모델을 구축하고자 한다. 마찰로 인해 계면에서 발생된 포논의 운동 에너지는 고체 물질 내부의 온도 변화를 야기할 것으로 예상된다. 이런 온도 변화와 전하 분포의 상관관계를 파악하는 것이 차기 연도 목표이다.