한국소성가공학회 2003년도 추계학술대회 논문집 pp.339~346

분자동역학을 이용한 나노 인덴테이션과 상변화 해석 연구

김동언*·손영기*·임성한**·오수익***

Molecular Dynamic Simulation of Nano Indentation and Phase Transformation

D.U. Kim, Y.K. Son, S.H. Rhim, and S.I. Oh

Abstract

Molecular dynamic simulations of nano indentation on single-crystal silicon (100) surface were performed using diamond indentor. Silicon substrate and diamond indentor were modeled diamond structure with Tersoff potential model. Phase transformation of silicon, incipient plastic deformation, change of incident temperature distribution are investigated through the change of potential energy distribution, displacement-load diagram, the change of kinetic energy distribution and displacements of silicon atoms. Phase transformation is highly localized and consists of a high-density region surrounding the tip. Axial load linearly increased according to the indenting depth. Number of atoms with high kinetic energy increased at the interface between substrate and indentor tip.

Key Words : Molecular Dynamics, Nano Indentation, Phase Transformation, Tersoff Potential

1. 서 론

최근 공학기술의 주된 흐름은 나노기술(NT), 바이오기술(BT), 로봇기술(RT), 정보기술(IT) 등의 첨단 기술이 주도하고 있다. 그런데 이러한 기술들의 공통 기반이 되는 것은 결국 나노 기술이 이루어내는 각종 나노 소재, 구조, 소자, 시스템의 기술이다. 따라서 이러한 나노 스케일 소재나 구조의 물성을 규명하거나 소자, 시스템을 제작하는 공정을 해석하고 분석하는 일은 매우 중요하다. 현재 나노기술의 경우 아직은 분야에 따라 초보적인 수준에 머물거나 실험적인 면에서의 진보가 주된 경우도 있으나 가까운 시일안에 보다 넓은 분야에서 나노기술의 응용이 이루어질 것이다. 이 때 가장 필요한 것은 나노 소재의 물성을 예측하고 나노 공정을 전산모사하는 기술이다. 결국 일정 기간의 기술 축적기 이후에는 물성 측정 및 전산 해석 기술의 확보가 전체 나노기술을 선도하는 역할을 수행할 것이다.

나노 소재의 물성을 추출할 수 있는 방법으로는 미세 인장 혹은 굽힘 시험기를 사용하는 방법도 있으나, 가장 많이 쓰이는 방법이 AFM(atomic force microscope)과 STM(scanning tunneling microscope)을 포함하는 원자현미경 계열(scanning probe microscope, SPM)의 장치를 사용하여 나노 인덴테이션(nano indentation)을 수행하는 방법이다. 나노 인덴테이션은 나노 미터 크기의 탐

* 서울대학교 기계항공공학부 대학원
** 서울대학교 정밀기계공동실계연구소
*** 서울대학교 기계항공공학부

침을 사용하여 탐침의 변위에 따라 작용하는 하중을 통해서 물질의 탄성 계수나 항복 강도, 경도 등 물리적, 기계적 성질을 측정하는 실험 방법이다. 이상의 측정 기법을 이용한 물성의 실측 방법도 개발이 진행중이지만, 유한요소해석 기법이 상당한 양의 실험과 디자인을 대신하여 연구 개발 비용 및 시간을 절감할 수 있었듯이 나노크기의 연구에서도 전산해석을 통하여 측정 과정을 모사 및 모델링하여 물성을 예측할 수 있을 것으로 기대된다. 원자 단위에 근접한 나노미터 단위의 현상을 해석하기 위해 연속체 개념에 기반한 유한요소 해석 기법을 사용하는 것은 다소 무리가 있다. 나노크기의 소재에서 원자층 혹은 원자 간의 거동으로 인한 물리적 현상을 예측하기 위해서는 원자들 사이에 작용하는 상호 포텐셜을 이용하여 다수의 원자들로 이루어진 다체계 운동방정식을 수치 계산하여 원자들의 궤적을 구하는 분자동역학(molecular dynamics, MD)기법[1-3]을 활용하는 것이 타당한 것으로 알려져 있다. 분자동역학 기법은 상호 원자 간의 정의된 포텐셜에 의해 결정되는 힘에 의해서 이루어지므로 해당 연구에 선택된 포텐셜 모델의 적합성 여부를 확인해야 한다. 포텐셜 모델은 크게 나누어 두 개의 원자 간의 상호작용 에너지의 성질을 나타내는 이원자 포텐셜(pair potential)과 이러한 이원자 포텐셜함수의 범함수로 된 이원자 범함수포텐셜, 세 개 원자 간의 에너지 변환 및 복수 원자의 위치 좌표를 모두 고려하는 군집포텐셜(cluster potential)과 군집 범함수포텐셜이 있다. 실리콘과 같은 공유결합으로 이루어진 소재의 경우 원자들에 주어진 결합길이, 결합각 주위에서의 진동 운동뿐 아니라 결합의 분리 등과 같은 변화도 고려할 수 있는 군집 범함수포텐셜을 사용하는 것이 필요하다. 이러한 분자동역학 해석 기법을 이용하면 원자 단위의 거동, 마찰, 전위 발생, 크랙 발생 및 파괴 현상 등에서 상변이 등에 이르기까지 다양한 현상에 대한 연구가 가능하다. 특히 EAM(embeded atom method)[4-5]과 Tersoff 모델[6-7] 등 다양한 군집 범함수 포텐셜 모델을 이용하여 구리(Cu), 금(Au), 은(Ag) 등의 금속과 실리콘(Si)에 대해서 나노 인덴테이션[8-15,19], 나노 절단[16-17], 나노 스케일 접촉[12,18] 과 같은 다양한 공정에 대한 해석을 수행하여 초기 소성 변형, 전위핵 생성 및 성장, 결정 방위와 가공 방향에 따른 변화, 상변화 마찰 계수의 계산 등의 결과를 구할 수 있다.

본 논문에서는 분자동역학을 이용하여 반도체 공정의 주 재료인 실리콘에 대한 물성 파악과 관련된 나노 인덴테이션 해석을 수행하였다. 단결정 실리콘 소재 (100) 표면에 다이아몬드 탐침을 이용한 나노 인덴테이션 해석을 통해 탐침의 변위에 따른 실리콘 원자의 변위와 격자 변화로 인한 상변화, 변위-하중 곡선, 운동에너지 분포 변화등을 관찰하였다. 실리콘 원자와 다이아몬드 내부의 탄소 원자 간 각각의 상호 작용력과 두 이종 원자간의 상호 포텐셜은 Tersofff 포텐셜 모델을 사용하였다.

2. 해석 방법

2.1 분자동역학 기법

분자동역학 기법은 다수의 입자로 이루어진 다체계 운동방정식을 수치 적분을 통해 입자의 속도와 궤적을 얻어내는 방법이다. 이때 입자들 사이에 작용하는 힘은 입자들 간에 정해진 포텐셜의 기울기(gradient)를 통해서 얻어진다.

$$m_i \frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{F}_i = \nabla_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_i} E_{total}$$

위의 식에서 $\mathbf{r}_i$는 입자의 위치 벡터이면 $\mathbf{F}_i$는 입자에 작용하는 힘 벡터이다. E_{total}은 해석하는 시스템 전체의 포텐셜 에너지이다.

2.2 원자간 포텐셜 모델

Si와 Si, C와 C, Si와 C 각각에 대해서 Tersoff[6,7] 모델을 사용하였다. Tersoff 모델은 공유결합의 강도가 주위의 원자 배치에 의해서 결정되는 해석적 함수 형태의 포텐셜 모델로 실리콘에 대해서는 상온에서 다이아몬드 구조와 β-실리콘 구조를 적절히 표현 할 수 있다고 알려져 있어 이번 해석에 적용하였다.[6,7] Tersoff 포텐셜 모델은 지수 함수로 표현되어 있는 이원자 간의 인력, 척력 함수와 원자가(valence) 전자들 사이에 공유 결합을 표현하는 함수로 구성되어 있다. 다원자에 의한 영향은 국부적인 원자들의 결합 환경을 경험적인 결합 차수(bond order)함수로 표현된다. 이원자 항과 결합차수 함수는 수많은 실험적 결과들을 통해서 결정된다. 전체 Tersoff 에너지(E_{total})는 아래의 식과 같이 원자들의 결합 에너지(W_{ij})의 합으로 표현된다.

$$E_{total} = \sum_i E_i = \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} W_{ij}$$

$$W_{ij} = f_C(r_{ij}) = \left[f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij}) \right]$$

위 식의 결합에너지(W_{ij})는 아래와 같이 cut-off 함수(f_C), 반발력 함수(f_R), 인력 함수(f_A)로 표현되고 그 자세한 파라미터는 Table 1에 나타내었다.

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

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

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & r_{ij} \le R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos\left[\frac{\pi(r_{ij} - R_{ij})}{(S_{ij} - R_{ij})}\right] & R_{ij} \le r_{ij} \le S_{ij} \\ 0 & r_{ij} \ge S_{ij} \end{cases}$$

$$b_{ij} = \chi_{ij}\left(1 + \beta_i^{n_i}\zeta_{ij}^{n_i}\right)^{-1/2n_i}$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \ne i,j} f_C(r_{ik})\, g(\theta_{ijk})$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + c_i^2/d_i^2 - c_i^2/[d_i^2 + (h_i - \cos\theta_{ijk})^2]$$

$$\lambda_{ij} = (\lambda_i + \lambda_j)/2 \qquad \mu_{ij} = (\mu_i + \mu_j)/2$$

$$A_{ij} = (A_i A_j)^{1/2} \qquad B_{ij} = (B_i B_j)^{1/2}$$

$$R_{ij} = (R_i R_j)^{1/2} \qquad S_{ij} = (S_i S_j)^{1/2}$$

위에서 r_{ij}는 i원자와 j원자사이의 거리를 , θ_{ijk}는 r_{ij}와 r_{ik}사이의 각을 의미한다. A_{ij}, B_{ij}, R_{ij}, S_{ij}, μ_{ij} λ_{ij} 는 서로 다른 원자 유형i와 원자 유형j 사이의 값이다.

Table 1 Parameters in Tersoff potential

Parameter	Carbon	Silicon
$A\,(eV)$	1.3936 x 10^3	1.8308 x 10^3
$B\,(eV)$	3.4670 x 10^2	4.7118 x 10^2
$\lambda\mu$	34.879	24.779
μ	22.119	17.322
β	1.5724 x 10^{-7}	1.1000 x 10^{-6}
n	7.2751 x 10^{-1}	7.8734 x 10^{-1}
c	3.8049 x 10^4	1.0039 x 10^5
d	4.384	1.6217 x 10^1
h	-5.7058 x 10^{-1}	-5.9825 x 10^{-1}
$R\,(nm)$	0.18	0.27
$S\,(nm)$	0.21	0.30
$\chi_{C-Si} = 0.9776$	$\chi_{C-C} = 1.0$	$\chi_{Si-Si} = 1.0$

2.3 초기 형상 및 해석 조건

온도 300K에서의 나노 인덴테이션 해석을 수행하였다. 실리콘(Si)의 결정 구조는 상온에서의 구조라고 알려져 있는 격자 상수 5.43Å을 갖는 다이아몬드 구조로 모델링하였다. 기판의 전체 크기는 81.45Å x 81.45Å x 108.6Å로 총 36000개의 원자로 구성되어 있다. 경계조건으로 X,Y 방향으로는 주기경계 조건을 ,+Z 방향으로 (100)표면을, -Z 방향으로는 아래의 8개 층을 고정시켜 벌크의 성질을 갖도록 하여 전체적으로 (100)표면을 갖는 초기 기판 모델을 만들었다. 초기 온도를 300K 으로

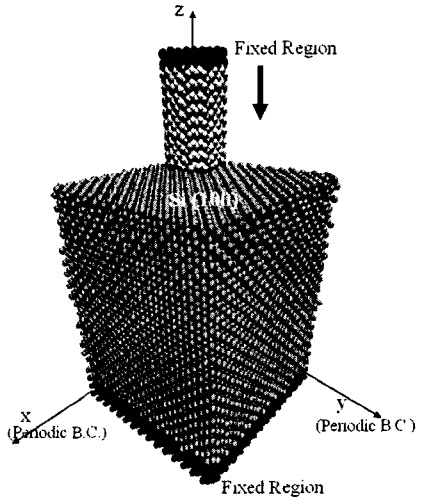


Fig. 1(a) Substrate and cylindrical indentor

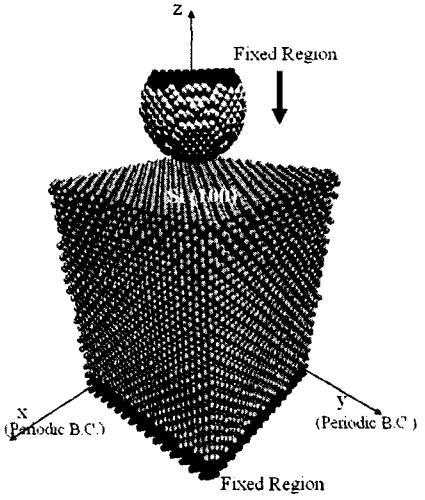


Fig. 1(b) Substrate and hemispherical indentor

설정하여 8ps 동안의 충분한 완화(relaxation)를 수행하여 평형 상태를 갖도록 하였다.

다이아몬드 탐침은 탄소(C) 원자를 격자 상수 3.567Å을 갖는 다이아몬드 결정 구조로 하여 실린더 형태와 반구 형태 두 가지 형상으로 모델링 하였다. 실린더의 형상은 반지름 10.7Å, 길이 35.67Å로 총 2186개의 원자로 이루어져 있으며 반구 형상의 탐침은 반지름이 17Å인 구형에서 Z+방향의 1/3 부분을 제거한 형상으로 총 3741개의 원자로 이루어져 있다. 나노 인덴테이션 해석에서 탐침의 변위 제어를 위해 탐침의 +Z 방향의 바깥쪽 3개 층에 대해서 강체 조건을 부여하였다. 탐침 역시 초기 온도를 300K 으로 설정하여 8ps의 충분한 완화시간을 가졌다.

탐침의 초기 위치는 기판에서 +Z 방향으로 5Å 떨어진 곳으로 하였다. 이 거리는 Tersoff 포텐셜 모델의 실리콘과 탄소 원자 사이의 cut-off 반경보다 큰 값으로 기판과 탐침 사이에 어떠한 영향도 미치지 않는 거리이다. 나노 인덴테이션이 진행되는 동안은 별도의 온도제어 영역을 두지 않았다. 시간 적분법은 5차 Gear적분법(Nordsieck 적분법)을 사용하였으며 적분 시간 간격은 1.0fs 으로 하였다. 이 시간 간격은 Si과 C 원자의 진동 시간과 비교하여 충분히 작은 값으로 Tersoff 포텐셜 모델의 경우 다이아몬드는 1.0fs, Si는 2.5fs 에서도 충분히 정확한 결과를 얻을 수 있다고 알려져 있다[11]. 탐침의 변위 제어는 각각의 스텝마다 탐침의 강체 부분을 2.0×10^{-4}nm 씩 -Z 방향으로 이동하였으며 속도로는 200m/s이다. 전체 해석 시간 15ps, 전체 실리콘 변위 25nm의 나노 인덴테이션 해석을 수행하였다.

3. 해석 결과 및 고찰

두 가지 탐침 형상을 가지고 탐침의 변위에 따른 실리콘의 상변화와 변위-하중곡선, 운동에너지 분포 변화 및 원자들의 평균 변위에 대해서 관찰하였다.

3.1 상변화 관측

상온의 다이아몬드 격자 구조 실리콘에 나노 인덴테이션을 가하는 경우 탐침 아래에서 β-실리콘으로 상변화가 일어난다는 것은 많은 실험과 해석[11,14,20,21]에 의해 이미 알려져 있다. 분자동역학을 이용하여 이러한 상변화를 알아낼 수 있는 방법은 원자 주위의 대칭성이나 원자들 간의 결합 길이 또는 최근접 원자의 개수의 변화를 통해서 알 수 있다. 본 논문에서는 포텐셜 에너지 분포의 변화를 통해서 상변화를 관찰하였다. 완전한 다이아

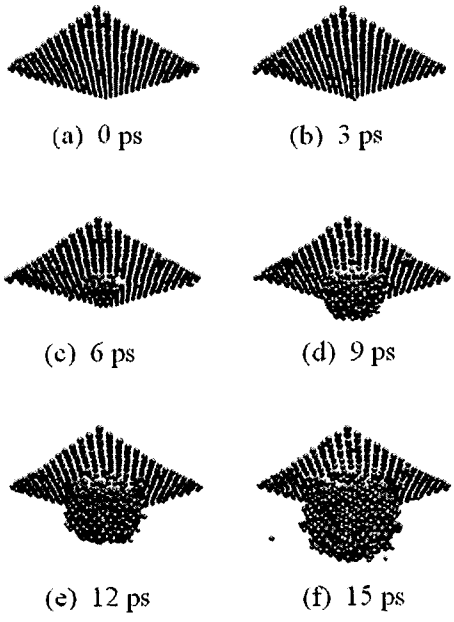


Fig. 2 Growth of phase transition area (3D)

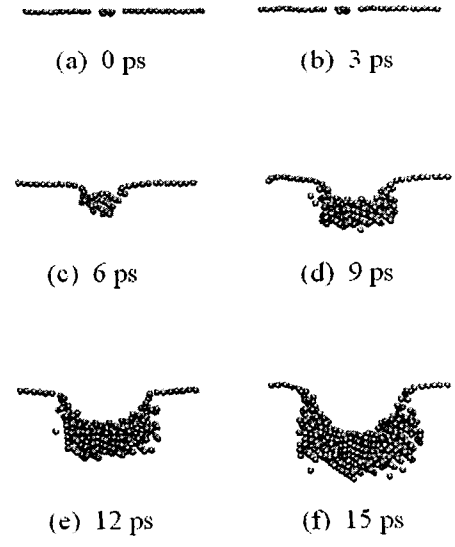
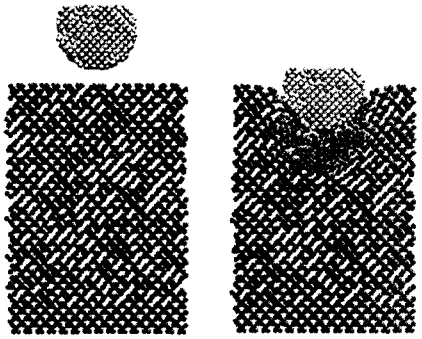


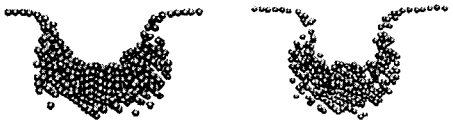
Fig. 3 Growth of phase transition area (XZ plane)

몬드 격자 구조의 실리콘의 경우 포텐셜 에너지는 -7.4169×10^{-12} erg 이며 표면에서의 값은 -4.0116×10^{-12} erg 이다. 이에 반하여 β-실리콘이나 비정질 실리콘의



(a) 0 ps (b) 15 ps

Fig. 4 Potential energy distribution
Blue(dark): low potential energy
Green(bright): high potential energy



(a) Hemisphere (b) Cylinder

Fig. 5 Comparison of phase transition area between hemispherical and cylindrical indentor

경우는 둘 사이의 값을 갖게 된다. 그림 2의 경우는 포텐셜 에너지가 -7.0×10^{-12} 에서 -3.0×10^{-12} 사이에 있는 원자들을 표현한 것으로 표면의 원자들을 포함한다. 인덴테이션이 진행됨에 따라서 탐침의 아래 부분에서 상변화가 일어나는 것을 확인할 수가 있다. 이는 그림 3에서 더 자세히 확인할 수 있는데 이 그림은 X = 40Å 단면 근방에 위치한 원자들 중 포텐셜 에너지가 그림 2와 같은 범위 안에 있는 원자를 나타낸 것이다. 그림 4는 포텐셜 에너지 분포를 명암 분포를 통해서 표현한 것이다. 결론적으로 상변화가 일어나는 부분이 모두 탐침의 아래 부분과 근접한 부분에서 국한되어 일어나며 이러한 현상은 탐침의 모양과는 상관이 없는 것을 확인할 수가 있다. 이는 탐침의 아래 부분에서 압축 응력이 작용하고 이로 인해 변위에 의한 상변화가 일어나기 때문이다.[11] 이 범위 안에 있지 않은 원자들의 변위는 극히 작으며 포텐셜 에너지의 변화도 극히 작은 것을 확인할 수가 있다.

3.2 변위-하중 곡선

탐침의 변위에 따라 탐침에 가해지는 하중을 구하였다. 그림 6을 살펴보면 변위가 진행됨에 따라서 Z방향의 하중이 선형적으로 증가하는 것을 확인할 수 있었다. 또한 모든 방향으로 많은 진동을 보이는데 이는 탐침의 변위에 따라서 탐침 주위에 위치한 원자의 수의 변화로 인해 그 하중이 진동하는 것으로 보인다.[17] 금속의 경우 변위-하중 곡선과 포텐셜 에너지 변화를 통해서 소성 변형이 처음으로 일어나는 변위를 측정 한 연구가 있다.[9,10,13] 본 논문에서도 이와 같은 연구를 진행 했으나 소성 변형의 시작을 판단할 수 있는 적절한 결과를 얻어내지 못했다. 이는 본 연구에서 사용한 나노 인덴테이션 모델이 제한적이며 탐침의 불충분한 변위 제어 때문이라고 판단된다. 그림 7에서 실린더 형태의 탐침의 경우 반구 형태의 탐침보다 인덴테이션 초기에 더 큰 힘이 작용하는 것을 확인할 수 있었다.

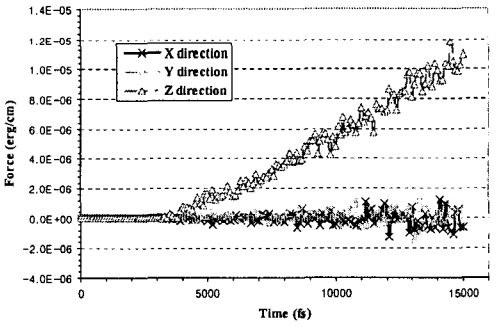


Fig. 6 Displacement-load curve of hemispherical shape indentor

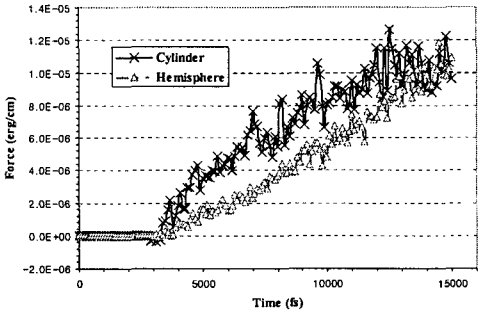


Fig. 7 Z-direction force of hemispherical and cylindrical shape indentor

3.3 운동에너지 분포 변화

그림 8을 통해서 인덴테이션이 일어나는 동안의 운동에너지의 변화를 색 분포를 통해서 확인할 수 있다. 운동에너지가 직접적으로 통계 열역학적 성질인 온도를 의미하는 것은 아니지만 일시적인 온도 변화를 확인할 수가 있는 것으로 판단된다. 초기 운동에너지는 주어진 온도 300K에 따른 볼츠만 분포를 따르고 있다. 하지만 인덴테이션이 진행되면서 탐침에 근접한 부분에서 운동에너지가 증가하고 운동에너지가 높은 원자들이 몰려 있다는 것을 확인할 수가 있었다. 탐침과 기판의 온도가 같은 300K에서 해석이 시작되었으므로 이러한 현상은 거시적인 측면에서 마찰에 의한 온도 증가와 의미가 같다고 판단된다. 마찰에 대한 원자 단위의 정확한 메카니즘을 보여주기는 어렵지만 경향은 보여줄 수 있었고, 이로부터 분자동역학의 이용가능성을 확인하였다.

3.4 실리콘 원자의 변위 측정

그림 9는 탐침의 변위에 따른 X = 38~42Å 사이에 위치한 실리콘 원자들의 변위를 측정한 것이다. 그림 9를 살펴보면 평면에 수직 방향인 X성분이 다른 Y나 Z 성분보다 월등히 작은 것을 확인할 수가 있다. 이는 3.1의 결과와 함께 판단할 때 Z방향 단면적이 대칭인 탐침을 사용할 경우 나노 인덴테이션 해석을 평면 변형률(plane strain)을 기반으로 하는 2차원 해석이 가능하다고 판단된다. 그러나 만약 대칭이 아닌 탐침을 이용하여 작은 변위의 나노 인덴테이션을 하는 경우 그 변형이 탐침의 형태를 따르지 않는다는 것이 알려져 있다.[14]

본 연구에서 수행한 분자 동역학 해석은 실리콘 원자와 탄소원자 사이에 작용하는 힘을 Tersoff 모델을 적용하였고 온도 제어 영역을 별도로 두지 않았으며 200m/s라는 빠른 변위 제어라는 문제점을 가지고 있다. 서로 다른 개체에 대해서는 인력을 포함하지 않는 이원자 포텐셜 모델이 많이 사용된다. 이는 인력을 포함하는 포텐셜 모델의 경우 서로 다른 개체에 큰 인력이 발생하여 jump to contact 과 같은 현상들이 발생하기 때문이다. 그러나 인력을 포함하지 않는 이원자 포텐셜 모델 또한 개체의 표면과 계면에 대해서는 정확한 값을 표현하는 것은 아니다. 온도 제어의 방법으로는 한정된 모델에서 일정 온도를 유지하거나 변형이 일어나는 부분에서 벌크 부분으로의 열전달을 모사하기 위해서 속도를 스케일링 하거나 속도에 감쇠 계수를 주는 방법을 많이 사용한다. 그러나 이러한 모델링 방법이 얼마나 정확한 값을 갖는지는 더 많은 연구를 통한 확인이 필요하다고 판단된다.

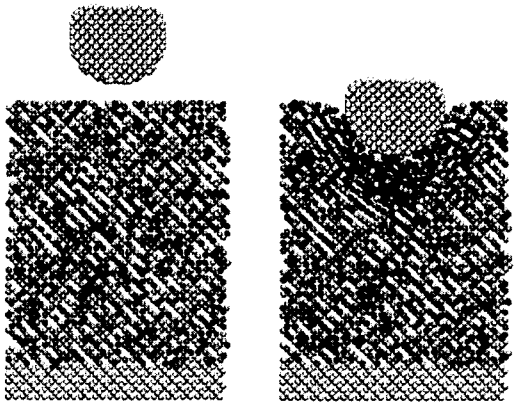


Fig. 8 Kinetic energy distribution
Dark(red) color : high kinetic energy
Bright(blue) color : low kinetic energy

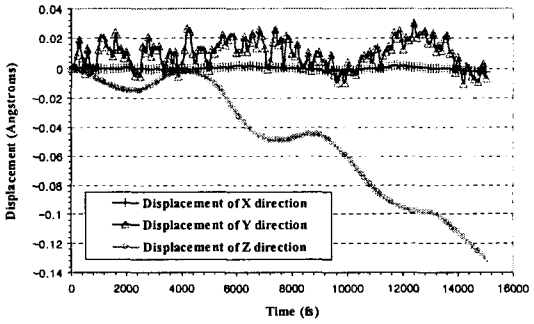


Fig. 9 Displacement of silicon atoms in X=38~42Å box

나노 인덴테이션과 같은 공정을 한정된 모델에서 해석하기 위해서는 모델에 사용되는 주기경계 조건과 강체 조건에 의한 영향이 최소가 되도록 여러 가지 문제를 고려해야 하며 이때 선택할 수 있는 속도는 매우 제한적이다. 위에 나열한 문제점의 해결과 함께 정확한 나노 스케일의 해석을 위한 연구가 현재 본 실험실에서 진행 중에 있다.

4. 결 론

본 논문에서는 분자동역학을 이용하여 단결정 실리콘에 대한 나노 인덴테이션 해석을 수행하였다. 탐침의 변

위에 따른 실리콘의 상변화와 변위-하중곡선, 운동에너지 분포변화, 실리콘 원자의 변위를 관찰하여 다음과 같은 결론을 얻을 수가 있었다.

(1) 탐침의 압입에 따라 압축력에 의한 상변화가 탐침에 근접한 아래 부분에서 집중적으로 일어났다. 탐침의 형상에 의해 발생되는 상변화의 전체적인 모양에는 다소 차이가 있지만 탐침에 근접한 부분에만 상변화가 관측되었다.

(2) 변위-하중곡선을 통하여 변위에 따라서 Z방향의 하중이 선형적으로 증가하는 것을 확인하였으며 일정 이상의 값에서는 진동이 증가하는 것을 확인할 수가 있었다.

(3) 나노 인덴테이션이 일어나는 동안 탐침의 아래 부분에서 원자들의 운동에너지가 증가하고 높은 운동에너지를 갖는 원자들이 많이 분포하는 것을 확인했다.

(4) 인덴테이션 방향이 아닌 다른 방향으로는 실리콘의 변위가 매우 작은 것을 확인할 수 있었다. 이를 통해 나노 인덴테이션 해석이 평면 변형률을 이용한 이차원 해석이 가능할 것으로 판단된다.

후 기

본 논문은 과학기술부 21세기프론티어연구개발사업의 나노메카트로닉스기술개발(M102KN010001-02K1401-01220)에 의해 수행되었으며, 이에 관계자 여러분들께 감사드립니다.

참 고 문 헌

(1) M. P. Allen and D. J. Tildesley, 2002, "Computer Simulation of Liquids", Oxford University Press.

(2) Daan Frenkel and Berend Smit, 1996, "Understanding Molecular Simulation" , Academic Press.

(3) Andrew R. Leach, 2001, "Molecular Modelling Principles and Applications", Prentice Hall.

(4) M. S. Daw and M. I. Baskes, 1983, "Semiempircal, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals", Phys. Rev. Lett. Vol.50, p. 1285.

(5) M. S. Daw and M. I. Baskes, 1983, "Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals", Phys. Rev. B, Vol.29, p. 6443.

(6) J. Tersoff, 1988, "Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties", Phys. Rev. B, Vol.38, p. 9902.

(7) J. Tersoff, 1988, "Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems", Phys. Rev. B, Vol.39, p. 5566.

(8) W. G. Hoover, A. J. De Groot, 1990, "Large-scale elastic-plastic indentation simulations via nonequilibrium molecular dynamics", Phys. Rev. A, Vol.42, p. 5844.

(9) C. L. Kelchner, S. J. Plimpton, 1998, "Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation", Phys. Rev. B, Vol. 58, p. 11085.

(10) Ju Li, K. J. Vliet, 2002, " Atomistic mechanisms governing elastic limit and incipient plasticity in crystals", Nature, Vol. 418, p.307.

(11) W C D Cheong and L C Zhang, 2000, " Molecular dynamics simulation of phase transformations in silicon monocrystals due to nano-indentation", Nanotechnology, Vol.11, p. 173.

(12) P. Vashishta, M. Bachlechner, 2001, "Multimillion atom simulation of materials on parallel computers - nanopoxel, interfacial fracture, nanoindentation, and oxidation", Appl. surf. sci, Vol.182, p. 258.

(13) Yongsheng Leng, Guiping Ynag, 2000, "Computer experiments on nano-indentation: Amolecular dynamics approach to the elasto-plastic contact of metal copper", JMS, Vol. 35, p.2061.

(14) D W Brenner, S B Sinnott, 1996, "Simulated engineering of nanostructures", Nanotechnology, Vol. 7, p. 161.

(15) Ju Li, Sidney Yip, 2002, "Atomistic Measures of Materials Strength", CMES, Vol. 3, p.219.

(16) Y Y Ye, R Biswas, J R Morris, 2003, "Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper", Nanotechnology, Vol. 14, p.390.

(17) 김영석, 안준석, 양승한, 나경환, 2003, "MEMS 부품 제조를 위한 나노 리소그래피 공정의 3차원 분자동력학 해석", 기계학회

(18) Oliver Miesbauer, Martin Gotzinger and Wolfgang Peukert, 2003, "Molecular dynamics simulations of the contact between two NaCl nano-crystals: adhesion, jump to contact and indentation", Nanotechnology, Vol. 14, p. 371.

(19) D. Mulliah, D. Christopher, S. D. Kenny, Roger smith, 2003, "Nanoscratching of silver (100) with a diamond tip", NIM B. Vol 202, p. 294.
(20) R. H. Wentorf and J. S, Kasper 1963, "Two New Forms of Silicon", Science, Vol. 139, p.338.
(21) M. C Gupta and A L Ruoff, 1980, " Static compression of silicon in the [100] and in the [111] directions", J, Appl. Phys., Vol. 51, p.1072.