

분자동역학을 이용한 나노 와이어의 역학적 거동 해석

Analysis of Mechanical Behavior of Nanowire by Molecular Dynamics Simulation

이 병 용* · 조 맹 효**

Lee, Byeong Yong · Cho, Maenghyo

ABSTRACT

Mechanical behavior of copper Nanowire is investigated. An FCC Nanowire model composed of 1,408 atoms is used for MD simulation. Simulations are performed within NVT ensemble setting without periodic boundary conditions. Nosé-Poincaré MD algorithm is employed to guarantee preservation of Hamiltonian. Numerical tensile tests are carried out with constant strain rate. Stress-strain curve is constructed from the calculated Cauchy stresses and specified strain values. Non-linear behavior appears around $\epsilon=0.064$. At this instance, starting of structural reorientations are observed.

Keywords: *Molecular dynamics , Nanowire, Uniaxial tensile , Copper , Nose-Poincare , Reorientation*

1. 서 론

나노 와이어는 수 나노미터 이하의 직경을 가지는 와이어를 의미한다. 나노 와이어는 면심 입방 구조를 가지는 니켈, 금, 구리에서부터 반도체인 실리콘 등 여러 가지 재료로 만든다. 나노 기술이 과학 기술의 새로운 분야로 떠오르면서 나노 와이어도 주목 받는 나노 구조물 중 하나가 되었다. 반도체나 LCD의 백라이트필름, ATM의 탐침 등 여러 분야에서 그 응용성에 주목하고 있다.(Yang *et al*, 1997)

나노 와이어에 대한 일축인장 시험은 나노 와이어의 가장 기본적인 역학적 거동을 파악하기 위한 것이다.(Koh *et al*, 2005) 면심 입방 구조를 가지는 금속 나노 와이어의 경우 등인장률(constant strain rate)로 나노 와이어를 잡아당기면 $\epsilon=0.1$ 보다 작은 변형에서 재료 거동의 비선형성이 나타난다. 면심 입방 구조를 가지는 금속으로 된 나노 와이어의 경우 분자 동역학 시뮬레이션을 통해 일축인장시험에서 형상 기억 효과나 초탄성 거동을 관찰할 수 있음이 보고되어 있다.(Park *et al*, 2005)

모든 금속은 형상기억 효과를 가지고 있지만 거시적으로는 그 효과를 관찰하기 쉽지 않다. 그러나 나노 와이어와 같은 크기에서는 그 효과가 매우 크게 일어난다. 최근 니켈, 구리, 금에 대한 나노 와이어의 형상 기억 효과 및 초탄성 거동에 대한 시뮬레이션 연구가 이루어져 왔으며 이러한 효과는 단면의 폭이 2나노미터 이하에서 발생한다고 알려져 있다. 나노 와이어의 경우 일정 수준의 인장량 이상이 되면 형상이 틀어지는 structural phase transformation이 발생한다. 이후 하중을 제거하면 다시 영구변형이 남지만 열을 가하면 초

* 학생회원 · 서울대학교 기계항공공학부 석사과정 Email:domoda02@snu.ac.kr

** 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 교수 Email:mhcho@snu.ac.kr

기의 격자상태로 돌아가는 형상기억효과가 크다.(Park *et al*, 2005)

본 연구에서는 Nosé-Poincaré 알고리즘을 이용하여 인장 하중 하에서 나노 와이어의 시뮬레이션을 수행하여 역학적 거동을 파악하고자 한다.

2. 나노와이어의 모델링과 시뮬레이션

나노 와이어의 분자동역학 해석을 위한 모델링은 다음과 같다. 길이방향으로 22개, 폭 방향으로 4개, 높이방향으로 4개의 구리원자가 면심 입방 구조를 가지도록 배치하였다. 구조적 특성으로 인하여 실제 총 원자개수는 1408개이다. 그림 1은 면심 입방 구조로 배치 된 사각 단면 형상의 나노와이어 모델을 보여준다. 일축인장시험을 위하여 양단의 원자를 고정시켰다.

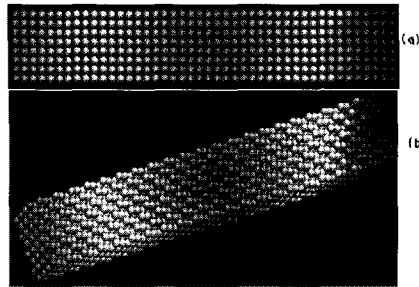


그림 1 구리 나노와이어의 초기형상
(a)옆에서 본 모습 (b)대각방향에서 본모습

각 원자들의 초기 속도는 Microsoft Visual Studio 6.0 라이브러리에서 제공하는 랜덤함수를 사용하여 주었으며, 비리얼 이론(Virial Theorem)으로 원자들의 평균온도가 380K이 되도록 하였다. 원자간 상호작용력으로 Lenard-Johns(12-6) 포텐셜을 사용하였다. Lenard-Johns(12-6) 포텐셜은 식(1)과 같이 주어진다.

$$\Phi_{LJ} = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (1)$$

시뮬레이션기법으로는 Nosé-Poincaré 알고리즘을 이용하였다. Nose-Poincare 알고리즘은 Nose-Hoover 알고리즘과 마찬가지로 시뮬레이션이 수행되는 동안 모델의 온도를 안정적으로 유지시켜주는 피드백 알고리즘을 내포하고 있다. Nose-Hoover 알고리즘과 달리 Nosé-Poincaré 알고리즘은 해밀토니안(Hamiltonian)이 보존되는 심플렉틱(Symplectic) 알고리즘이며, NoT(Choi and Cho, 2006) 알고리즘에 있어서도 열적인 안정성과 정준 심플렉틱 구조가 만족됨이 증명되었다. Nosé-Poincaré 알고리즘에 의한 해밀토니안은 식(2)와 같다.

$$H = \left(\sum_i \frac{\tilde{p}_i^2}{2m_i s^2} + V(q) + \frac{\pi^2}{2Q} + gkT \ln s - H_0 \right) s \quad (2)$$

$$H_0 = \left(\sum_i \frac{\tilde{p}_i^2}{2m_i s^2} + V(q) + \frac{\pi^2}{2Q} + gkT \ln s \right) \quad \text{at } 0ps \quad (3)$$

여기서 g 는 자유도, Q 는 thermostat의 질량, s 는 thermostat의 위치변수, π 는 thermostat의 운동량을 의미한다. Nosé-Poincaré 알고리즘에 의하면 이론적으로 H 는 0이나 수치적 계산법에 의해 H 는 0에 가까운 값을 가진다.(Stephen, 1998) 그림 1과 같이 구성된 나노 와이어 모델에 대해 인장 시뮬레이션을 수행하기 전, 하중이 가해지지 않은 상태에서 relaxation이 되도록 충분히 안정화시킨다. 충분히 안정화가 되고 나면 등인장률(constant strain rate, 0.0071/100ps)로 일축인장을 부가한다. 일축으로 인장한 후 다시 와이어가 정적 평형상태에 도달할 때까지 충분히 안정화시킨다. 안정화된 이후 코시 응력으로부터 응력-변형률 선도를 도출할 수 있다. 일반적인 Virial 응력은 식(4)에 주어진 것과 같으나 고체의 경우에는 식(5)와 같이 Cauchy 응력을 사용하여야 한다.(Zhou, 2003) 여기서 Ω 는 모델의 부피이며 $f_j^{(kl)}$ 은 k 번째 원자와 l 번째 원자 사이에 작용하는 힘이다. \bar{u}_i 은 원자 속도의 i 번째 성분의 평균이며 $u_i^{(k)}$ 은 k 번째 원자 속도의 i 번째 성분을 말한다.

$$\tau_{ij} = \frac{1}{\Omega} \sum_{k \in \Omega} \left(-m^{(k)} (u_i^{(k)} - \bar{u}_i)(u_j^{(k)} - \bar{u}_j) + \frac{1}{2} \sum_{l \in \Omega} ((x_i^{(l)} - x_i^{(k)}) f_j^{(kl)}) \right) \quad (4)$$

$$\tau_{ij} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{k, l \in \Omega} ((x_i^{(l)} - x_i^{(k)}) f_j^{(kl)}) \quad (5)$$

3. 해석 결과의 분석

그림 2는 나노 와이어의 일축인장에 대한 기계적 거동을 보여 준다. 인장이 0.064보다 작을 때는 나노 와이어에 인장이 가해지면서 내부의 원자들이 상호 작용력에 의해 재배열되면서 격자 간격을 넓히는 모습을 보인다. 이는 그림 2의 (a) 모습과 크게 다르지 않다. 그림2에서 보듯이 스트레인이 0.064일 때까지는 이러한 경향을 보이다가 이 이후부터 격자가 흐트러지는 고체 구조의 상변이가 발생한다. 이후 인장을 계속 함에 따라 그림 2의 (c)처럼 점점 얇아지는 병목현상을 보인다. 그림 3은 그림 2의 $\epsilon=0.12$, 1600ps에서 나노 와이어 형상에 대한 다른 각도에서 본 모습이다. 나노 와이어의 전위와 옆으로 틀어지는 형상이 완전히 발달해 있음을 알 수 있다.

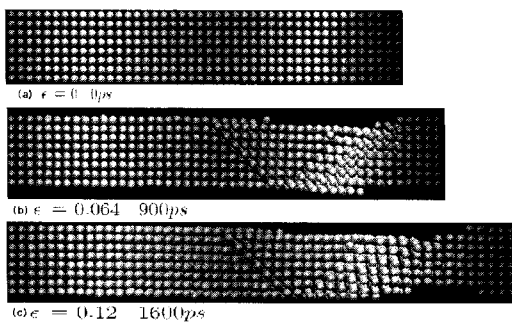


그림 2 일축인장에 대한 기계적 거동
(a)-(c):인장에 따른 나노 와이어의 형상

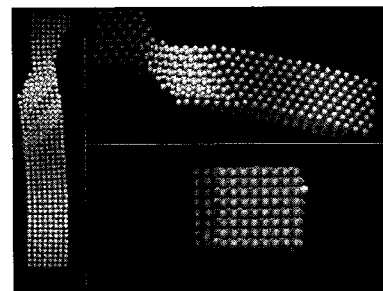


그림 3 $\epsilon=0.12$ 에서 구리
나노 와이어의 기계적 거동

응력-변형률 곡선을 그려보면 그림 4와 같은 결과를 얻게 된다. 전위가 발생하는 변형률($\epsilon=0.056$)까지는 선형적으로 응력이 증가함을 알 수 있다. Phase transform이 발생하는 지점($\epsilon=0.064$)부터는 비선형적 거동을

보이기 시작한다. 전위가 발생하면서 응력이 감소하고 이후의 인장에서는 응력 레벨이 비슷한 범위에서 변동하는 경향을 보인다. τ_{yy} 와 τ_{zz} 의 평균값은 매우 작다는 것을 알 수 있다.

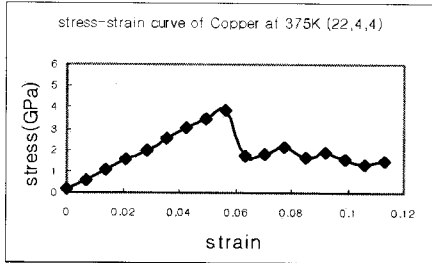


그림 4 구리 나노 와이어의 응력-변형률 선도 σ_{xx}

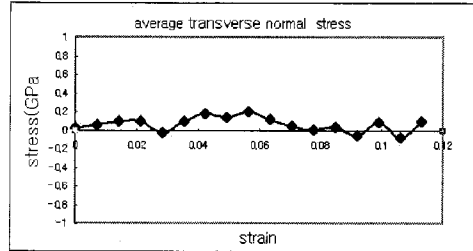


그림 5 Average transverse normal stress $(\tau_{yy} + \tau_{zz})/2$

그림 6, 7, 8은 시뮬레이션이 진행되는 동안의 에너지를 보여준다. Nosé-Poincaré 알고리즘은 해밀토니안 값이 0을 만족하는 구조이다. 그림 6에서 보는 것과 마찬가지로 해밀토니안이 매우 작은 값을 보임을 알 수 있다. 해밀토니안이 일정한 값을 유지하다가 한 번 씩 값이 떨어지는 현상은 나노 와이어가 인장될 때마다 인장 에너지가 와이어 시스템에 유입되기 때문이다. 유입된 에너지가 소산되지 않는다면 나노 와이어 내부의 에너지가 증가할 것이다. 그러나 온도를 일정 값으로 유지하기 위해 thermostat 변수를 도입하여 와이어 내부의 에너지를 소산시키면 운동에너지가 증가하지 않게 된다. 인장 변형에 의해 원자간 거리가 멀어지면 포텐셜에너지가 감소한다. 나노 와이어 내부의 물리적 에너지는 감소하는 것으로 사료된다. 그러나 thermostat 의 에너지는 증가하므로 전체적인 에너지는 아주 작은 범위 내에서 증가한다.

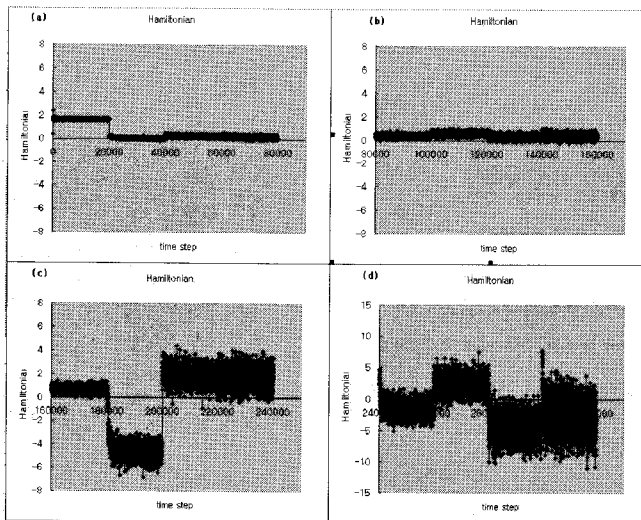


그림 6 구리 나노 와이어의 해밀토니안

그림 7은 구리 나노 와이어(22,4,4)와 비교를 위한 구리 나노 와이어(16,4,4)의 물리적 에너지로 포텐셜에너지

지와 운동에너지의 합을 나타낸 값이다. 구리 나노 와이어(16,4,4)의 물리적 에너지에 비해서 매우 작은 값을 가지는 구리 나노 와이어(22,4,4)의 해밀토니안은 구리 나노 와이어(22,4,4)의 물리적 에너지와 비교하면 훨씬 작은 값이 됨을 알 수 있다.

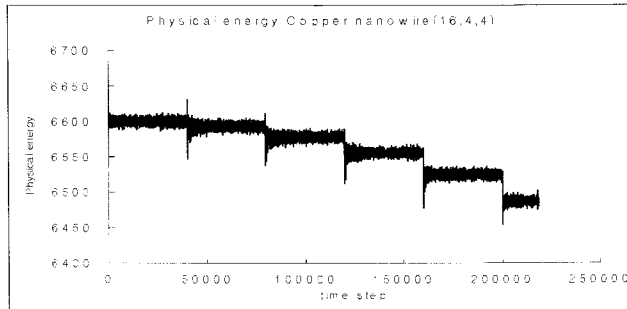


그림 7 구리 나노 와이어(16,4,4)의 물리적 에너지 300K

그림 8은 온도를 보여 주고 있다. 초기에 설정한 온도는 380K이다. 시뮬레이션을 수행하는 동안 온도 분포의 범위는 약 350K에서부터 400K 근방까지이다. 시뮬레이션이 수행되는 동안의 평균 온도는 약 382.47K으로 유지되는 것으로 관찰되었다. 그림 8에서 그래프 상에서 한 짐씩 튀어있는 점들은 온도가 비교적 높음을 보여준다. 이는 인장이 수행되면서 인장에 의한 에너지 유입으로 전체 온도가 순간적으로 높아짐을 의미한다. 이 에너지들은 thermostat 변수 s 에 의해 지배되는 온도 피드백 시스템에 의해 곧 이전의 온도로 돌아간다.

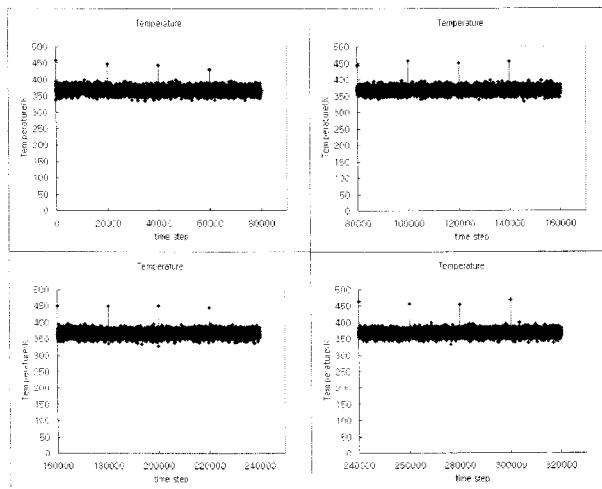


그림 8 구리 나노 와이어의 온도

4. 결론

본 연구를 통해 MD 기법을 이용한 시뮬레이션을 통하여 구리 나노 와이어의 역학적 거동을 살펴 보았다. Nosé-Poincaré 알고리즘을 적용하여 Nanowire의 시뮬레이션을 처음으로 수행하였다.

구리 와이어의 비선형적 거동을 확인하였으며 이는 구리의 구조적 상전이 효과임을 확인하였다. 추후 unloading 시뮬레이션 과정의 거동과 다양한 온도 상태와 온도 변화에 따른 복합 열-기계 하중에 따른 열탄성거동에 대한 연구를 수행할 예정이다.

후 기

본 연구는 한국과학재단이 주관하는 서울대학교 마이크로 열 시스템 연구센터의 지원을 받아 진행되었습니다.

참고문헌

- H. Park, K. Gall, and J. Zimmerman (2005) Shape Memory and Pseudoelasticity in Metal Nanowires, *Physical Review Letters*, 95, pp.25504.
- H. Park and J. Zimmerman (2006) Stable nanobridge formation in <110> gold nano-wires under tensile deformation, *Scripta Materialia*, 54, pp.1127-1132.
- K. Choi and M. Cho (2006) Fully Flexible Unit Cell Simulation with Recursive Thermostat Chains, *The Journal of Chemical Physics*, 125, p.18405-1.
- L. Yang, D. Srolovitz, and A. Yee (1997) Extended ensemble molecular dynamics method for constant strain rate uniaxial deformation of polymer systems, *Journal of Chemical Physics*, 107(11), pp.4396-4407.
- M. Zhou (2003) A new look at the atomic level virial stress: on continuum-molecular system equivalence, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 459, pp.2347-2392.
- S. Koh, H. Lee, C. Lu, and Q. Cheng (2005) Molecular dynamics simulation of a solid platinum nanowire under uniaxial tensile strain: Temperature strain-rate effects, *Physical Review B*, 72, pp.085414-10.
- S. Bond, B. Leimkler, and B. Laird (1998) The Nose-Poincare Method for constant Temperature Molecular Dynamics, *Journal of Computational Physics*, 151, pp.114-134.