

반복하중을 받는 구리 나노 와이어의 기계적 거동

이상진[†] · 조맹효^{*}

Mechanical Behavior of Cu Nanowire under Cyclic Loading

Sangjin Lee and Maenghyo Cho

Key Words : Nanowire(나노와이어), Cyclic load(반복하중), Yield stress(항복응력), Dislocation(전위)

Abstract

Molecular dynamics (MD) simulations are used to analyze behavior of copper nanowires under cyclic loading. The embedded atom method (EAM) potential is employed to represent atomic interaction. Cyclic load is applied in two ways (Forward Tension / Reverse Compression and Forward Compression / Reverse Tension). The results show that dislocations are piled up as a result of plastic deformation during alternate tensile and compressive loading. After cyclic loading with a change of direction, yield stress decreases in consequence of the effect by the dislocation pileups. On the other hand, under FC/RT cyclic load, phase transformation represent associated with mechanical twinning. And copper nanowire can return to almost former undeformed condition during tensile loading at 300K.

1. 서 론

나노와이어는 재료의 단면적이 수십 나노미터 이하의 크기를 가지는 재료로써, 벌크상태에서는 관찰할 수 없었던 새로운 기계적, 전자기적, 광학적 성질을 보인다.⁽¹⁾ 나노 와이어는 표면적 대 부피비(surface-to-volume ratios)가 매우 크고 표면에너지가 높은 상태이다. 예를 들어 나노와이어의 표면 에너지는 센티미터 크기 일때의 10^7 배에 달한다. 이와 같이 나노스케일에서는 표면효과가 지배적이고 그로 인해 나타나는 성질에 대한 연구들이 근래에 집중적으로 이루어 지고 있다. 그렇기 때문에 나노 장치의 기초 빌딩블록으로 쓰여지는 나노와이어의 구조와 성질에 대한 이해가 필요하다.

나노와이어의 기계적 거동과 변형 메커니즘을 연구하기 위해서 분자동역학(molecular dynamics)

시뮬레이션이 사용되고 있다. 많은 연구자들이 분자동역학 시뮬레이션을 사용하여 나노와이어의 기계적 거동이 변형률속도(strain rate), 크기, 결정학적 방향(crystallographic orientation)에 대한 의존성^(2, 3, 4)을 띄는 것과 초탄성(pseudo-elasticity)⁽⁵⁾과 같은 나노 크기의 와이어에서 나타나는 독특한 성질에 대한 분석을 수행하고 있다.

본 연구에서는 반복하중 하에서 구리 나노와이어의 기계적 거동과 특성을 해석 하기 위해 분자동역학 시뮬레이션을 수행하였다. 인장-압축의 순서로 반복하는 경우와 압축-인장의 순서로 반복하는 두 가지 방법으로 반복하중을 주어 시뮬레이션을 수행하였다. 본 연구에서는 반복하중이 가해지는 동안 항복응력의 변화를 알아보고, 시뮬레이션의 결과로 얻은 나노와이어의 구조변화와 응력·변형률 거동과의 상관관계를 규명하여 반복하중을 받는 나노와이어의 거동을 살펴보고자 한다.

2. 해석 방법

2.1 모델링 개요

[†] 서울대학교 기계항공공학부

E-mail : sincesj1@snu.ac.kr

TEL : (02)880-1645 FAX : (02)886-1693

^{*} 서울대학교 기계항공공학부 교수

나노와이어의 거동을 분석하기 위해 Mishin 이 제시한 구리에 대한 EAM(embedded-atom-method)⁽⁶⁾ 포텐셜을 적용하여 분자동역학 시뮬레이션을 수행하였다. 시뮬레이션에서는 온도를 일정하게 유지하기 위해 Nosé-Hoover NVT 방법을 사용하였고, 주기경계(periodic boundary)조건은 사용하지 않았다.

2.2 나노와이어 모델 및 시뮬레이션 과정

본 연구에서는 [100], [010], [001] 방향의 면심입방정(FCC) 격자구조를 가진 단결정 구리 나노와이어를 사용하여 300K 에서 연구를 수행하였다. 구리의 격자상수(lattice constant)는 벌크상태일 때 300K 에서 0.3615nm 이다. 완화과정(relaxation)에 들어가기 전 초기 구리 나노와이어의 크기는 길이 방향으로 10.8nm 이고 단면은 2.16 X 2.16nm 이다.

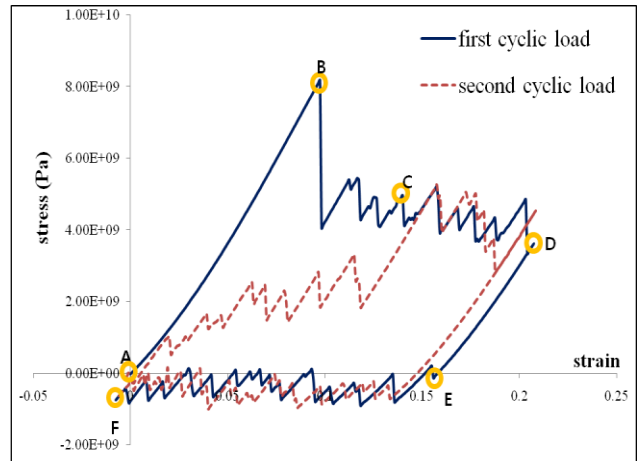
벌크상태의 격자상수를 적용하여 모델링한 나노와이어는 높은 표면에너지로 인해 초기형태를 유지할 수 없다.⁽⁵⁾ 300K 의 온도에서 와이어의 상변이(phase transform)는 일어나지 않지만, 완화과정에서 나노와이어가 안정된 상태로 가면서 원자 사이의 거리가 조정 되어 축 방향 길이가 줄어든다.

완화과정이 끝나면, 와이어의 양끝을 고정하고 한쪽을 일정한 속도로 당기거나 누르는 방법으로 인장 혹은 압축하중을 가한다. 변형률속도는 인장, 압축의 경우 모두 $1.67 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 로 일정하게 유지하였다. 300K 에서 구리 와이어의 항복응력은 인장의 경우에는 약 8GPa, 압축의 경우에는 약 1GPa 로 나타난다. 하중에 따른 항복응력의 차이는 표면응력에 의한 효과와 인장, 압축 하중에서 작용하는 슬립계(slip system)의 차이에 기인한다.⁽⁷⁾ 나노와이어의 소성변형은 인장의 경우는 슬립(slip), 압축의 경우 쌍정(twinning)에 의해서 이루어진다.

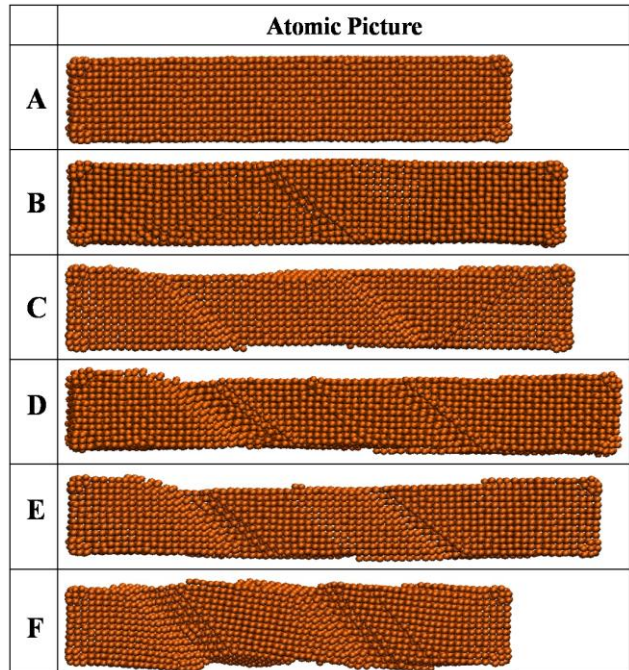
3. 결과 및 고찰

3.1 인장-압축의 반복하중

Fig1(a)는 300K 에서 인장-압축의 반복하중을 받는 구리 나노와이어의 응력변형률(stress-strain) 곡선이다. 전위의 생성과 이동에 의해 소성변형이 나타나면 그로 인한 에너지 감소는 응력이 급격히 떨어지는 것으로 곡선에 나타난다. 이후 응력-변형률 곡선은 증가와 감소가 연속적으로 반복되는 경향을 보이게 되며 이는 인장이 계속 되면서 전위의 생성과 전파가 반복되기 때문이다. 이와 같은 현상은 나노와이어의 응력변형률 곡선에서 관



(a) stress-strain curve under cyclic loading



(b) atomic configuration of nanowire matching to stress-strain curve under first cyclic loading

Fig.1 Forward tensile/reverse compressive case at 300K

찰되는 특징이다. 0.21의 변형률까지 인장한 이후 하중의 방향을 전환하여 압축하중을 가하였을 때 0.15의 변형률까지 탄성영역을 가진다(D-E 구간). 와이어는 소성변형된 상태이지만, 하중의 방향이 전환되면서 소성변형을 일으키는 슬립계가 바뀌기 때문에 다시 탄성의 거동을 보인다. 한 주기의 반복하중이 끝나고 다시 인장될 때에도 탄성 거동을 보이며, 3.2절에서 다루게 될 압축-인장의 반복하중 하에서도 하중의 방향을 바꾸어 주면 다시 탄성영역이 나타남을 확인할 수 있다.

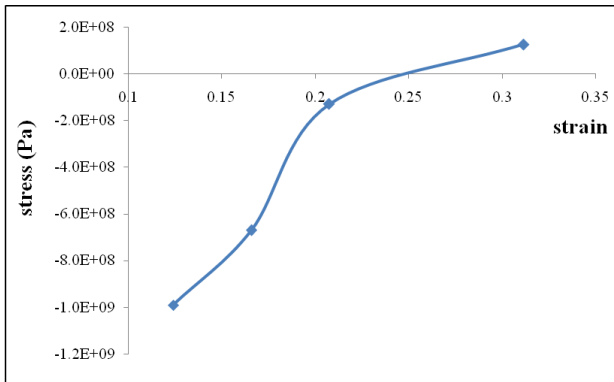


Fig.2 Decrease of yield stress under compressive loading of first cycle

반복하중을 받는 동안 나노와이어의 항복응력에는 변화가 생긴다. 나노와이어는 두 번의 반복하중을 받는 동안 두 번의 인장과정을 거친다. Fig1 (a)에서 보듯이 첫 번째 인장(실선)의 경우 항복응력은 8.18GPa 이지만 두 번째 인장(점선)의 경우에는 1.02GPa 로 항복응력이 급격히 감소했음을 알 수 있다. 반복하중 하에서 항복응력의 감소는 하중의 방향이 전환되는 동안의 전위가 누적되기 때문이다. Fig1 (b)는 (a)의 응력변형률곡선의 첫 번째 반복하중(실선)에 대응되는 나노와이어의 원자 그림이다. 인장하중을 가하는 동안 나노와이어의 소성변형은 슬립에 의해 주도 된다. 방향을 전환하여 압축하중을 가하면 나노와이어에 슬립이 남아 있는 상태에서 쌍정에 의한 소성변형이 발생하는 것을 볼 수 있다. 한 주기의 반복하중이 끝나면 나노와이어는 슬립과 쌍정의 누적으로 인해 변형 전과는 다른 형상을 가진다. 이 상태에서 다시 인장하중을 가하면, 누적된 전위의 영향으로 첫 번째 인장의 경우보다 낮은 응력에서 항복이 발생한다. Fig.2 는 구리 나노와이어에 한 주기의 반복하중을 가하였을 때, 압축하중을 가하기 전까지 인장된 변형률에 따른 압축하중 하에서 발생하는 항복응력의 변화를 보여준다. 인장하중에 의한 변형률이 커질수록 항복이 발생하는 응력 값이 감소하는 경향을 볼 수 있다. 인장하중에 의한 변형률, 즉 압축 하중으로의 방향 전환이 늦어질수록 전위의 누적 정도가 높아지게 되고, 누적된 전위에 의한 항복응력의 감소 정도가 커지게 된다.

3.2 압축-인장의 반복하중

압축-인장의 반복하중을 받는 와이어의 거동은 Fig.3 에서 알 수 있듯이 인장-압축에서의 거동과는 다른 모습을 보인다. 압축하중을 받는 구리 나

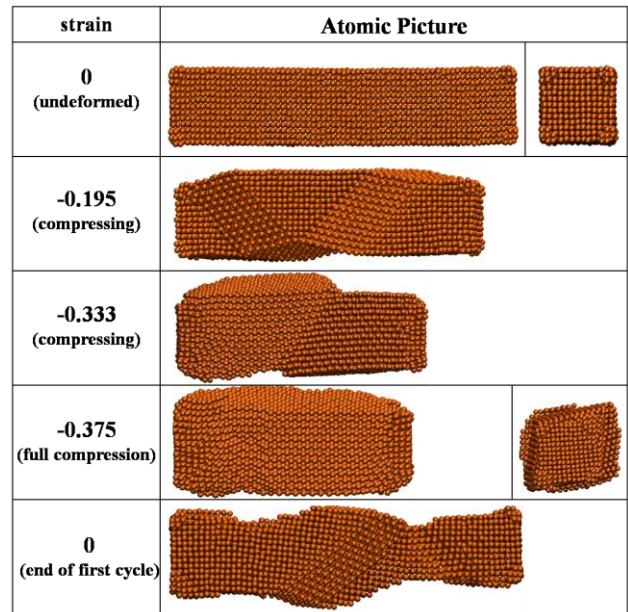
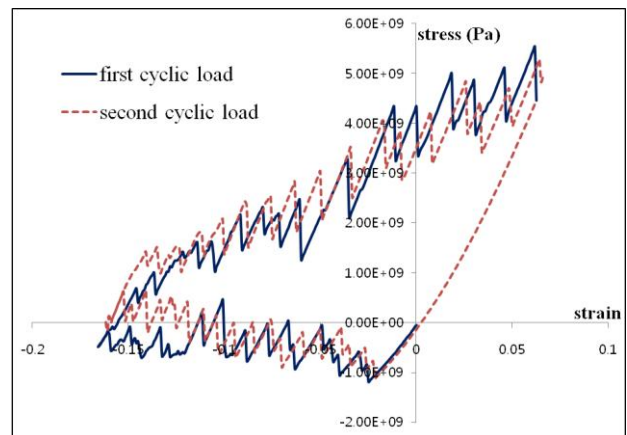
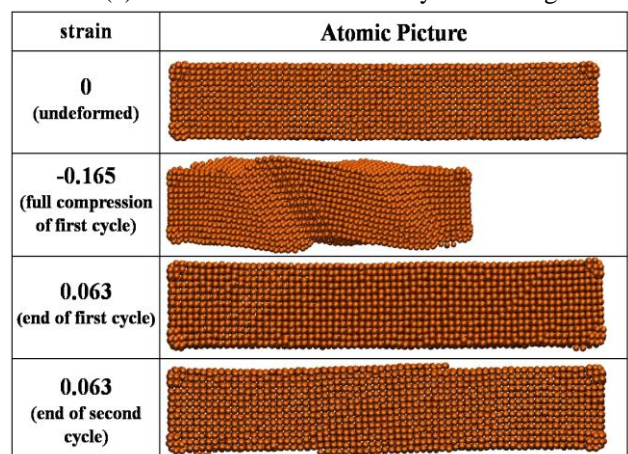


Fig.3 Atomic configuration during one cyclic loading until strain -0.375



(a) stress-strain curve under cyclic loading



(b) atomic configuration of nanowire during two cyclic loading

Fig.4 Forward compressive/reverse tensile loading until strain -0.165

노와이어의 소성변형은 쌍정에 의해 주도된다. 압축하중을 받는 동안 전위의 생성과 전과가 반복되고 더욱 압축되면 에너지가 낮은 상태가 되기 위해 쌍정들이 결합하게 된다. 그 결과 구리 나노와이어는 <100>-축/{100}-면을 가지는 구조에서 <110>-축/{110}-단면/{111}-측면을 가지는 구조로 상변이를 보인다. 상변이는 단면의 형상을 통해 단편적으로 드러난다. 300K 의 온도에서 나노와이어의 단면은 직사각형의 형태를 유지한다. 그러나 압축하중에 의한 상변이 과정에서 단면의 형상은 마름모(rhombic)의 형태로 바뀌게 된다.

700K 에서는 상변이가 일어난 후 인장하중을 가했을 때 나노와이어는 <100> /{100}의 구조로 복원될 수 있다. 하지만 300K 에서는 압축하중 하에서 쌍정에 의한 소성변형이 나노와이어의 상변이를 일으키더라도 나노와이어는 변형 전의 상태로 복원되지 못하는 것을 Fig.3 에서 확인 할 수 있다. 나노와이어의 양 끝 부분은 변형 전의 상(phase)으로 회복하지만, 소성변형이 집중적으로 나타난 중간 부분에서는 변형 전의 상으로 돌아오지 못하고 슬립과 쌍정의 누적이 나타난다.

그러나 Fig4 에서처럼 -1.65 이하의 변형률만큼 압축을 하게 되면, 나노와이어는 한 주기의 반복하중을 받은 후에도 변형 전의 상태로 돌아간다. 한번 더 반복하중을 가한 후에도, 전위의 누적이 나타나지만, 나노와이어는 초기의 형태로 복원됨을 확인하였다. 쌍정에 의한 소성변형은 나노와이어 상변이의 중간과정이기 때문에, 소성변형에서 상변이로 완전히 발달하지 못하더라도 나노와이어에 인장하중을 가하여 변형 전의 상태로 복원할 수 있는 것으로 판단된다.

4. 결 론

본 연구에서는 분자동역학 시뮬레이션을 수행하여 300K 에서 반복하중을 받는 구리 나노와이어의 거동을 분석하였다. 반복하중이 가해지는 동안 누적된 전위의 영향으로 항복이 나타나는 응력 값이 감소함을 확인하였고, 압축하중 시 쌍정에 의한 소성변형은 나노와이어의 상변이를 유발하며, 300K 에서 압축에 의한 변형이 16.5%이하 일 경우에는 인장 하중을 가하여 나노와이어를 변형 전의 상태로 복원할 수 있음을 확인 하였다.

후 기

본 연구는 교육과학기술부가 주관하는 국가지정연구실사업의 연구비 지원에 의해 수행되었습니다. (No. R0A-2007-000-20109-0)

참고문헌

- (1) Lieber, C. M., 2003, "Nanoscale science and technology : Building a big future from small things," *MRS Bull*, Vol. 28, No. 7, pp. 486~491
- (2) Liang, W., and Zhou, M., 2004, "Response of copper nanowires in dynamic tensile deformation," *Instn Mech. Engrs*, Vol. 218, Part C, pp.599~606
- (3) Park, H. S., Gall, K., and Zimmerman, J. A., 2006, "Deformation of FCC nanowires by twinning and slip," *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 54, pp.1862~1881
- (4) Koh, S. J. A., and Lee, H. P., 2006, "Molecular dynamics simulation of size and strain rate dependent mechanical response of FCC metallic nanowires," *Nanotechnology*, Vol. 17, pp.3451~3467
- (5) Liang, W., and Zhou, M., 2005, "Pseudoelasticity of Single Crystalline Cu Nanowires Through Reversible Lattice Reorientation," *ASME*, Vol. 127, pp.423~433
- (6) Mishin, W., 2001, "Structural stability and lattice defects in copper : AB initio, tight-binding, and embedded-atom calculation," *Phys. Rev. B*, Vol.63, p224106
- (7) Diao, J., Gall, K., and Dunn, M. L., 2004, "Yield Strength Asymmetry in Metal Nanowires," *Nano Lett.*, Vol. 4, No. 10, pp.1863~1867