

## 분자 동역학을 이용한 온도변화에 따른 단결정-/다결정-Si의 기계적 특성 연구

최용수<sup>1</sup>, 박영호<sup>2</sup>, 현상일<sup>3</sup>

<sup>1</sup>한경대학교 교양학부, <sup>2</sup>한경대학교 인간과학응용연구소, <sup>3</sup>한국세라믹기술원

나노 크기에서 존재하는 Grain Boundary나 Dislocation과 같은 결함들은 거시적인 물성을 크게 좌우하는 요인들이 되기도 한다. 또한 다결정을 이루고 있는 입도(Grain Size)에 따라 기계적인 강도 특성도 달라지는데, 금속의 경우에 입도가 비교적 큰 영역( $d > d_c$ )에서는 입도가 작고 균일해지면서 강도가 증가하는 'Hall-Petch 효과'를 보인다. 반면 입도가 작은 영역( $d < d_c$ )에서는 입도가 줄어들 때 강도가 감소하는 경향을 보이는데 이를 '역 Hall-Petch 효과'라고 한다. 본 연구에서는 분자 동역학을 이용한 단결정과 다결정의 Si에 대한 기계적 성질에 대해 조사한다. 입도와 온도 변화에 따른 단결정 Si와 다결정 Si의 Strain-Stress Curve와 Young's Modulus, Yield Point에 대해 관찰하고 특이점을 제시한다. 이를 통해 나노 영역에서의 기계적 성질의 예측과 거시적 영역에서의 성질의 연관성을 추구하고자 한다.