

## 분자동력학 시뮬레이션과 일축압축강도시험을 이용한 $\alpha$ -quartz의 결정축에 따른 강도이방성 검토

서용석<sup>1)</sup> · 이진국<sup>2)</sup> · 市川康明<sup>3)</sup> · 河村雄行<sup>4)</sup> · 정교철<sup>5)</sup> · 김교원<sup>6)</sup>

A study on anisotropic characteristics of axial strengths in  $\alpha$ -quartz by using molecular dynamics simulation and uniaxial compression test

Yong-Seok Seo, Jin-Kook Lee, Yasuaki Ichikawa, Katsuyuki Kawamura, Gyo-Cheol Jeong and Gyo-Won Kim

**ABSTRACT** We carried out NPT-ensemble (constant-number of particles, pressure, and temperature) Molecular Dynamics (MD) simulations for measuring strength anisotropy under uniaxial compressive stress related to the crystallographic axes in  $\alpha$ -quartz. Uniaxial compressive strengths of a single quartz crystal were measured in directions of the a- and c-axis. Measured uniaxial strength of a single quartz crystal was higher in the direction parallel to the c-axis than that measured in the direction normal to the c-axis. However the reverse was found in calculated uniaxial strengths by MD simulation. The contradictive result of strengths was observed in both cases but was found to be different in origin. Strength anisotropy of defectless  $\alpha$ -quartz crystal in MD simulation is basically caused by structural difference of quartz. By contrast, anisotropy of measured strength in the uniaxial compression test is related to oriented micro-defects developed during crystal growth.

**Key words** :  $\alpha$ -quartz, micro-defect, anisotropy of strength, MD simulation

**초 록** : 입자수, 압력, 온도일정의 앙상블(NPT-ensemble) 분자동력학(MD) 시뮬레이션을 이용하여 300° K에서  $\alpha$ -quartz의 결정축에 따른 일축압축강도를 계산하고, 자연산  $\alpha$ -quartz 단결정 코어를 제작하여 일축압축강도시험을 실시하였다.  $\alpha$ -quartz 단결정 코어에 대한 일축압축시험에서 측정된 결과에 의하면 재하 방향이 c축에 평행한 경우가 수직인 경우보다 높은 강도를 나타내지만, MD 시뮬레이션에서 계산된 완전무결함  $\alpha$ -quartz의 경우 이와 반대의 결과를 보이고 있다. 두 경우 모두 재하방향에 따른 강도 이방성을 보이고 있으나, 그 이유는 서로 다르다. MD 시뮬레이션에 의해 계산된 무결함  $\alpha$ -quartz의 강도 이방성은 결정구조의 차이에 기인하는 것으로 사료된다. 이에 반해 일축압축시험을 통해 측정된  $\alpha$ -quartz의 강도 이방성은 결정성장과정에서 생기는 주상 미세결함에 의해 영향을 받는다.

**핵심어** :  $\alpha$ -quartz, 미세결함, 강도이방성, MD 시뮬레이션

### 1. 서 론

최근 컴퓨터의 고속화 및 대용량화에 따라서 분자 궤도법, 몬테카를로법, 분자동력학 시뮬레이션(Molecular Dynamics Simulation, 이하 “MD 시뮬레이션”으로 표기함) 등을 이용한 물질의 에너지 구조, 공간 구조 또는 그 동적 변화 계산이 많이 행해지고 있다. 특히 이러한 계산들은 대형계산기에 의존하던 것에서 탈피하여, 기본적인 계산장치를 구비한 개인용 컴퓨터에서도 이루어지고 있는 추세이다.

지구의 지각이나 맨틀, 핵 등에 분포하는 지구내부 물질의 물리적 구조 혹은 화학적 구조를 해석하기 위해서는 고온·고압 하에서의 극히 정밀한 구조·물성 데이

- 1)정회원, 경북대학교 지질학과, Post-Doc.
  - 2)경북대학교 지진 산업지질연구소, 객원연구원
  - 3)名古屋大學 地圏環境工學科, 교수
  - 4)東京工業大學 地球惑星科學科, 교수
  - 5)정회원, 안동대학교 지구환경과학과, 조교수
  - 6)정회원, 경북대학교 지질학과, 조교수
- 원고 접수일 : 1999년 10월 2일  
원고심사완료일 : 2000년 1월 7일

터가 필요하다. 그러나, 최근의 고온·고압 실험기술의 발달에도 불구하고, 고 정밀의 실험데이터는 특히 부족한 실정이다. 이러한 실현 불가능한 조건하에서의 실험을 대신해 줄 수 있는 것으로 최근 컴퓨터를 이용한 MD 시뮬레이션이 많이 활용되고 있다.

최근에는 무기재료의 역학적 성질을 구하기 위하여 실험 대신 MD 시뮬레이션을 많이 이용하고 있다. 예를 들면, Quesnel 등<sup>1)</sup>에 의해 fcc 결정구조를 가지는 Lennard-Jones 고체의 온도에 따른 탄성계수의 변화가 계산되었고, Miyazaki 등<sup>2)</sup>은 Johnson 포텐셜을 이용하여  $\alpha$ -Fe의 탄성계수와 열팽창계수 등의 역학적 성질을 계산하였다. Okamoto 등<sup>3)</sup>은 체적, 온도 일정의 앙상블(NVT-ensemble)<sup>4)</sup>을 이용하여, 일축과 삼축응력 하에서의  $\alpha$ -Fe 단결정의 탄성계수를 계산한 바 있다. 이들은 Johnson과 Morse 포텐셜에 의한 계산 결과를 비교, 분석하여  $\alpha$ -Fe 단결정의 역학적 성질을 더욱 잘 나타내는 수정된 Johnson 포텐셜을 제시하고 있다. Matsui 등<sup>5)</sup>은 중요한 지구심부 구성물질인 MgSiO<sub>3</sub>의 고온·고압 하에서의 체적 탄성률, 체적 열팽창률, 분자구조 계산 등을 MD법을 이용하여 계산했다.

암석은 크게 몇 가지의 구성광물들과 미세결합들로 구성되어 있다. 이러한 구성요소들의 역학적 성질을 밝히는 것은 암석의 역학적 성질을 이해하는데 있어서 중요하다. 특히 암석에 분포하는 미세결합의 역학적 성질을 실험을 통해서 구하기는 대단히 어려운 실정이다. 본 논문에서는 이러한 암석 미세결합의 역학적 성질을 구하는 첫 단계로서, 암석의 주 구성광물 중 하나인  $\alpha$ -quartz의 MD시뮬레이션과 자연산 석영의 일축압축시험을 실시하여 응력-변형률 곡선을 구하고, 결정축에 따른 일축압축강도 이방성을 고찰하였다.

## 2. MD 시뮬레이션 및 일축압축시험

### 2.1 MD 시뮬레이션의 개요

MD 시뮬레이션은 다수의 입자로 구성되는 가상적인 계를 설정하여 주어진 원자간 상호작용을 적용시켜 입자 상호 간에 작용하는 힘을 계산하고, 운동방정식에 따라서 각 입자를 운동시켜 계산되어진 매 시간에 대한 모든 입자의 위치와 속도 등으로부터 통계 열역학에 의해 물리량을 구하는 해석적 방법이다.

$n$ 개의 독립된 입자(원자 또는 이온)로 구성된 기본셀이 있고, 실제로 계산되어지는 계는 이 기본셀의 3차원적

반복구조로 생각한다(2.3 주기경계조건 참조). 기본셀을 정할 때는 셀의 크기나 형태가 시뮬레이션 결과에 영향을 미치지 않을 정도로 충분히 크고, 현실성을 반영한 형태로 선정할 필요가 있다. 그리고 결정의 경우, MD 시뮬레이션 결과에 의해 실측의 결정대칭성이 재현되는 것이 중요하다. 이하에 서술되는  $\alpha$ -quartz의 모든 MD 시뮬레이션 결과는 실측의 결정대칭성을 재현하고 있다.

MD 시뮬레이션에서는  $n$ 개의 독립된 원자로 구성된 계에 대하여 고전역학을 적용하여 각 원자의 위치와 운동량을 시간에 대한 함수로 계산한다. 즉, 매 시간에 따라 변하는 계의 동적인 움직임을 어떤 제약도 부여하지 않고 직접 구하는 것이 가능하다. 또 평형상태의 성질은 충분히 긴 시간의 시간평균을 계산함으로써 도출할 수 있다.

다른 입자로부터 힘을 받으면서 운동하는  $n$ 개의 입자로 구성되는 계에서, 질량  $m_i$ 를 가지는 입자  $i$ 가 받는 힘을  $F_i$ 라 하면 운동방정식은 다음과 같다.

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i \quad (1)$$

여기서,  $r_i$ 는 입자  $i$ 의 위치이다. (1)식의 미분방정식을 풀기 위하여 본 논문에서는 Verlet 알고리즘을 다음과 같이 적용하였다.

$$r_i(t+\Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t-\Delta t) + (\Delta t)^2 \frac{F_i}{m_i} \quad (2)$$

$$v_i(t) = \frac{r_i(t+\Delta t) - r_i(t-\Delta t)}{2\Delta t} \quad (3)$$

여기서,  $v_i$ 는 입자  $i$ 의 속도를 나타낸다.

### 2.2 원자간 상호작용 모델

MD 시뮬레이션에서 각 원자간에 작용하는 힘은 원자간 상호작용 포텐셜에너지  $U$ 로 표현된다. 계의 전체 입자수를  $n$ 이라고 하면 계의 전체 포텐셜에너지는 다음과 같다.

$$U = \sum_i^n u_1(r_i) + \sum_i^n \sum_{j>i} u_2(r_{ij}) + \sum_i^n \sum_{j>i} \sum_{k>j} u_3(r_{ijk}) + \dots \quad (4)$$

여기서  $r_{ij}$ 는 입자  $i$ 와  $j$ 사이의 거리이며,  $r_{ijk}$ 는 입자  $i, j, k$  사이의 거리를 나타낸다. 우변 첫 번째 항은 외부장, 즉 중력장이나 전기장 등이 존재할 경우에 작용하는 포텐셜을 나타내고, 두 번째 항은 두 입자간 포텐셜로서

쌍으로 이루어진 입자들 사이에 작용하는 포텐셜이며, 세 번째 항은 세 개의 입자가 한 쌍을 이룰 때 작용하는 세 입자간 포텐셜을 나타낸다. 일반적으로 (4)식에서 두 입자간 포텐셜 이상의 항들은 전체 계에 미치는 영향이 미비하기 때문에 전통적인 분자동력학에서는 무시된다. 또한 중력장이나 전기장의 영향이 없을 경우에는 계 전체의 포텐셜에너지를 다음 식으로 나타낼 수 있다.

$$U = \sum_i \sum_{j>i}^n u(r_{ij}) \quad (5)$$

이러한 포텐셜 함수  $U$ 가 주어지면, 두 입자사이에 작용하는 힘  $F_{ij}$ 는 포텐셜 함수를 미분함으로서 구해진다.

$$-F_{ij} = \text{grad } u_{ij}(r_{ij}) \\ = i \frac{\partial u_{ij}(r_{ij})}{\partial x} + j \frac{\partial u_{ij}(r_{ij})}{\partial y} + k \frac{\partial u_{ij}(r_{ij})}{\partial z} \quad (6)$$

여기서  $r_{ij}$  ( $= r_i - r_j$ )는 입자  $i$ 와  $j$ 를 연결하는 위치벡터이고,  $i, j, k$ 는 각각  $x, y, z$ 방향의 기본벡터이다. 따라서 입자  $i$ 에 작용하는 힘  $F_i$ 는 그 주위의 다른 모든 입자  $j$ 에 관한 합을 구하면 된다.

$$F_i = \sum_{j>i} F_{ij} \quad (7)$$

원자간 상호작용 포텐셜은 크게 경험적 포텐셜, 모델 포텐셜, 전자론적 계산에 의한 포텐셜로 구분된다. 이중 원자수가 많은 응축계 등의 MD 시뮬레이션에서는 경험적 포텐셜을 사용하는 경우가 많다. 이를 간단히 소개하면 다음과 같다. 응축계의 전 에너지와 각 원자에 작용하는 힘은 원리적으로는 원자배치에 대한 전자구조계산을 수행하여 斷熱 近似에 의해 주어진다. 그러나 전자규모에서 생각하지 않고 전자가 포텐셜에 미치는 영향을 모두 원자간 포텐셜에 포함시켜 취급한다. 계가 고체인 경우에는 탄성계수, 격자정수, 결정구조 등 실험치의 재현성으로부터 포텐셜을 구한다. 경험적 포텐셜에는 두 입자간 포텐셜과 세 입자 이상에 적용되는 다입자간 포텐셜이 있다.

본 연구에는 두입자간 포텐셜모델이 적용되었으며, Tsuneyuki 등<sup>5)</sup>이 결정질 silica와 용융물에 존재하는  $[\text{SiO}_4]$ 사면체의 비경험적 계산을 이용하여 만든 모델에 공유결합 포텐셜 항을 추가한 부분 이온성 모델<sup>4)</sup>을 이용하였다. 전하는 부분전하를, 공유결합 포텐셜은 Morse형 함수로 표시한 것을 이용하였다.

$$U_{ij}(r_{ij}) = \frac{z_i z_j e^2}{r_{ij}} + f_0(b_i + b_j) \exp\left(\frac{a_i + a_j - r_{ij}}{b_i + b_j}\right) - \frac{c_i c_j}{r_{ij}^6} \\ + D_{ij} [\exp\{-2\beta_{ij}(r_{ij} - r_{ij}^*)\} - 2\exp\{-\beta_{ij}(r_{ij} - r_{ij}^*)\}] \quad (8)$$

여기서 오른쪽 제 1항은 Coulomb 상호작용이며,  $r_{ij}$ 는 이온  $i$ 와  $j$ 사이의 거리,  $z_i$ 는 이온의 전하를 나타낸다. 제 2항은 단거리 반발 상호작용을 나타내며,  $f_0$ 는 단위환산을 위한 정수로서  $6.9478 \times 10^{-11}$  N이다.  $a, b$ 는 에너지 인자로서 이온의 크기와 소프트니스에 관계된다. 제 3항은 van der Waals 상호작용으로 거리의 6승에 반비례하는 함수이며,  $c_i$ 는 분극되기 쉬운 정도를 의미한다. 제 4항은 Morse형 함수로 표시되는 공유결합 포텐셜이다.  $D_{ij}$ 는 포텐셜의 깊이,  $\beta_{ij}$ 는 형상요소이며,  $r_{ij}^*$ 는 진공중에 분포하는 이온쌍의 평행거리를 의미한다. 본 연구에서는 Coulomb항의 에너지 계산을 위하여 일반적으로 널리 알려진 Ewald법을 적용하였다. Table 1은 본 계산에 이용된 포텐셜 요소들을 나타낸 것이다.

### 2.3 주기경계조건(Periodic boundary condition)

MD 시뮬레이션을 수행함에 있어 현재 슈퍼컴퓨터를 사용하면 1만개 정도의 입자계 시뮬레이션이 가능하다. 하지만 이것도 1몰 중의 분자 수  $6.02 \times 10^{23}$ 에 비교하면 극히 적은 수이다. 이와 같이 MD에서는 계산기의 계산 수행 능력에 의해 해석 가능한 입자수가 제한되어 있기 때문에 대상 물체 전체를 그대로 해석하는 경우는 매우 드물다. 이러한 계산기 능력을 극복하기 위하여 주기경계조건을 고려하는 방법이 이용된다. 주기경계조건 하에서 운동하는 수백 개 정도의 입자계는 일반적으로 거시적 계(계산 대상물체 전체)의 열역학적 성질 등을 잘 표현하는 것으로 알려져 있다.

Fig. 1은 주기경계조건을 만족하며 운동하는 입자들을 모식적으로 나타낸 것이다. 중앙의 사각형 셀을 기본셀

Table 1. Potential Parameters for  $\alpha$ -quartz [after Kawamura<sup>7)</sup>]. \* $\omega$  is atomic weight.

Morse term	D kJ/mol	$\beta$ 1/nm	$\gamma^*$ nm
Si-O	310	20.00	0.151

Ion	* $\omega$ (gmol <sup>-1</sup> )	z (e)	a (nm <sup>-1</sup> )	b (nm <sup>-1</sup> )	c (kJ <sup>1/2</sup> nm <sup>3</sup> mol <sup>-1/2</sup> )
O	16.00	-1.2000	0.1926	0.0160	0.0409
Si	28.09	2.4000	0.0945	0.0090	0.0000

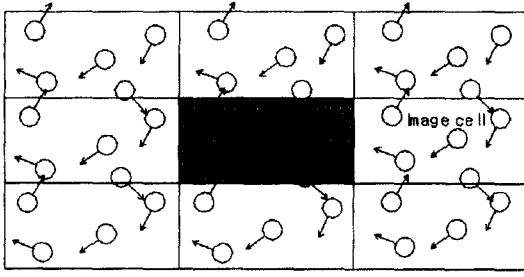


Fig. 1. Periodic boundary condition

(basic cell)이라 하며, 기본셀의 상하좌우의 셀을 이미지 셀(image cell)이라고 한다. MD시뮬레이션에서 운동방정식은 기본셀 내에 존재하는 입자에 대해서만 계산하지만, 입자간에 서로 작용하는 힘은 기본셀과 이미지셀을 구분하지 않고 힘이 작용하는 범위내(cutoff)에 존재하는 모든 입자들에 대해서 계산한다. Fig. 1에서 보는 바와 같이 기본셀 내의 입자의 운동은 이미지셀에서 똑같이 반복되므로, 시뮬레이션 중에 기본셀의 밖으로 나가는 입자는 대칭 되는 상대 면으로부터 동일속도로 들어오게 된다. 이러한 주기경계조건을 도입함으로써 기본셀 내의 입자수가 적을지라도 이미지셀에 존재하는 입자들을 모두 시뮬레이션 한 것과 같은 결과를 얻을 수 있다.

2.4 속도 스케일링법(Velocity scaling method)

MD 시뮬레이션에서 계의 온도를 일정하게 유지하는 방법 중 자주 이용되는 것으로 속도 스케일링법이 있다. 통계열역학에서 계의 온도는 입자의 질량  $m_i$ 과 속도  $v_i$ 를 이용하여 다음의 운동 에너지 식으로부터 계산된다.

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_i^N m_i v_i^2 = \frac{3}{2} N k_B T \tag{9}$$

여기서  $N$ 은 입자수,  $k_B$ 는 Boltzmann 상수이다. 온도  $T$ 는 입자의 속도를 이용하여 다음과 같이 계산된다.

$$T = \frac{\sum_i m_i v_i^2}{3 N k_B} \tag{10}$$

따라서 온도의 제어는 설정온도를  $T_{set}$ , 각 시각에서 온도를  $T$ 라 하면 이들의 비의 평방 근을 계수로 하는 아래의 식으로 행해진다.

$$v'_i = \left( \frac{T_{set}}{T} \right)^{1/2} v_i \tag{11}$$

즉,  $T < T_{set}$  일 경우에는 모든 입자속도를 일제히 빠르게 하고,  $T > T_{set}$  의 경우에는 느리게 한다. 이와 같이 각 입자의 속도를 변화시킴(scaling)으로서 강제적으로 계의 온도를 설정 값에 일치시킬 수 있다.

2.5 압력의 계산과 제어

입자간 상호작용이 존재할 때 압력은 Virial<sup>8)</sup> 정리에 의해 다음과 같이 계산된다.

$$P = \frac{N k_B T}{V} - \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i < j} (-F_{ij}) \cdot r_{ij} \right\rangle \tag{12}$$

여기서  $F_{ij}$ 는 거리  $r_{ij}$ 에 존재하는 입자  $i$ 와  $j$ 사이의 힘이다. 본 논문에서는 단위 면적 당 압력을 사용하므로 압력을 응력과 동일한 의미로 사용한다. 압력은 다음과 같은 응력 행렬로 표시되며,

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \tag{13}$$

각 응력성분은 (14)식 에 의해 계산된다.

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left( N k_B T_{\alpha\beta} - \left\langle \sum_{i < j} F_{\alpha}^{ij} r_{\beta}^{ij} \right\rangle \right) \tag{14}$$

여기서  $\alpha$ 와  $\beta$ 는 직교좌표계를 따르며,  $i, j$ 는 입자들의 미한다. 단 (14)식에서 총화규약(summation convention)은 적용하지 않는다. 또한  $T_{\alpha\beta}$ 는 다음 식으로 표현된다.

$$T_{\alpha\beta} = \frac{\sum_i m_i v_{i\alpha} v_{i\beta}}{N k_B} \tag{15}$$

MD시뮬레이션에서 각 시각에서의 압력을 설정압력으로 조정할 때 널리 사용되는 방법으로 강제 스케일링에 의한 압력 제어법이 있다. 계산된 압력  $P_{ij}$ 가 설정압력  $P_{ij}^{set}$ 이 되도록 (14)식을 따라서 기본셀의 형상(변의 길이  $L_i$ 와 주축사이의 각도  $A_{ij}$ )을 변화시킴으로서 압력을 일정하게 유지할 수 있다.

$$L_x = L_x [1 + k_L (P_{xx} - P_{xx}^{set})] \tag{16}$$

$$A_{xy} = A_{xy} + k_A (P_{xy} - P_{xy}^{set}) \tag{17}$$

여기서  $k_L$ 과  $k_A$ 는 적당한 초기치를 주고 압력과 압력 행렬성분의 변동에 따르도록 자동적으로 증감시킨다.

## 2.6 계산방법

본 연구에 사용된 프로그램은 Kawamura가 개발한 MXDTRICL<sup>9)</sup>을 이용하였다. 기본셀은 Fig. 2와 같이 주기적 환경조건을 갖는 단위격자의 100배(5a×5b×4c, 900원자)를 이용하였으며, 계산스텝시간은 2×10<sup>-15</sup>sec/step으로 하여 계산하였다. 결정의 초기구조(a축 길이는 0.4913 nm, c축 길이는 0.5405 nm, 수평축 a는 120°로 교차하고, a와 c는 직각임)는 Wright 등<sup>10)</sup>이 측정된 결과를 이용하였다.

결정초기구조의 평형과정으로 결정의 초기구조를 이용하여 300°K, 0 GPa, NPT-en-semble 하에서 5,000 타임스텝을 계산하여 원자간 상호작용의 파라미터의 최적화를 실시하였다. Fig. 3은 최적화 과정중의 계산치 들을 나타낸 것이다.

여기서 T는 온도, P는 단위 면적당 압력, E는 에너지, D는 밀도이며, a, b, c는 결정축의 길이, alpha, beta, gamma는 결정축간의 각도를 의미한다. 최적화된 파라미터를 이용하여 현실계에 필요한 평형상태 (본 연구에서는 압력만을 달리함)에서 초기강화를 각각 5,000 타임스텝 실시한 후, 압력을 0 GPa에서 파괴 시까지 1 GPa씩 증가시키면서 20,000 타임스텝 계산을 실시하여 변형률을 얻었다. 시뮬레이션 상에서는 압력행렬성분  $P_{ij}$ 를 조정함으로써 축 응력과 전단응력을 자유롭게 줄 수가 있다.

## 2.7 MD 시뮬레이션에서의 응력과 변형 계산

탄성체는 일반적으로 Hooke의 법칙에 따르며 다음과

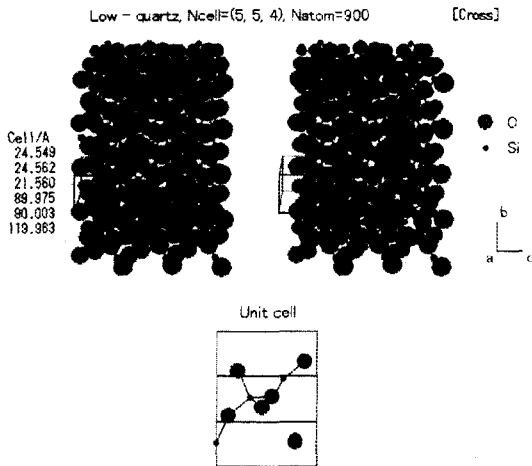
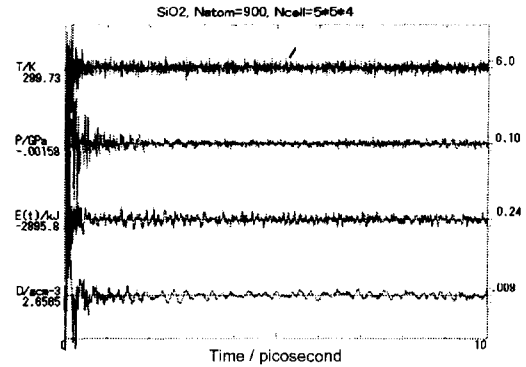
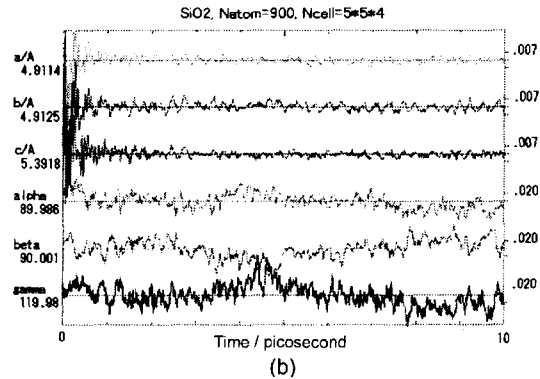


Fig. 2. Stereoscopic pair-view of basic cell in  $\alpha$ -quartz



(a)



(b)

Fig. 3. MD simulation of  $\alpha$ -quartz for equilibration under the condition of 300°K and 0 GPa by using the NPT-ensemble

같이 나타낼 수 있다.

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (18)$$

여기서  $\varepsilon_{ij}$ 는 변형률 행렬,  $S_{ijkl}$ 은 탄성정수 행렬 (elastic compliance tensor),  $\sigma_{kl}$ 는 응력 행렬이다.  $\varepsilon_{ij}$ 와  $\sigma_{kl}$ 의 대칭성을 고려하면 다음과 같이 간략하게 표현된다.

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \text{symm} & -\sigma_2 & \sigma_4 \\ \text{etric} & & \sigma_3 \end{bmatrix} \quad (19)$$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \gamma_6 & \gamma_5 \\ \text{symm} & -\varepsilon_2 & \gamma_4 \\ \text{etric} & & \varepsilon_3 \end{bmatrix} \quad (20)$$

여기서  $\gamma_4 = 2\varepsilon_{yz}$ ,  $\gamma_5 = 2\varepsilon_{xz}$ ,  $\gamma_6 = 2\varepsilon_{xy}$ 이다. 따라서 (18) 식은 다음과 같이 행렬식으로 표현된다.

$$\begin{Bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \\ \epsilon_6 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{16} \\ & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{26} \\ & & \text{symm-} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{36} \\ & & & \text{etric} & s_{44} & s_{45} & s_{46} \\ & & & & s_{55} & s_{56} \\ & & & & & s_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{Bmatrix} \quad (21)$$

NPT-ensemble 시뮬레이션에서 압력이 기본셀에 일축/인장 또는 전단방향으로 주어지면 변형률은 각 구조요소 (셀 축의 길이  $L_i$ 와 축간 각  $\theta$ )의 앙상블 평균으로부터 계산된다. 수직변형률  $\epsilon_i$ 는

$$\epsilon_i = \frac{\Delta L_i}{L_i} \quad (i=1, 2, 3) \quad (22)$$

전단변형률  $\gamma_i$ 는 결정축간의 각의 변화량으로부터 다음 식으로 구해진다.

$$\gamma_i = \tan\theta \quad (i=4, 5, 6) \quad (23)$$

2.8 자연산 석영의 일축압축 강도시험

석영(SiO<sub>2</sub>)은 육방정계( $a_1=a_2=a_3 \neq c$ , 수평축  $a$ 는 120°로 교차하고,  $a$ 와  $c$ 는 직각임)에 속한다. 결정성장시 이웃입자에 의해 간섭받지 않고 자라서 완전한 결정면으로 둘러싸인 自形을 보이는 석영으로부터  $c$ 축에 평행한 공시체와  $a$ 축에 평행한 공시체를 제작하여 각각 3개씩 일축압축 강도시험을 실시하였다(Fig. 4). 시험장치는 재

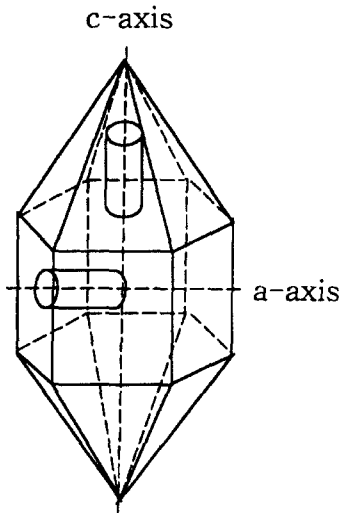


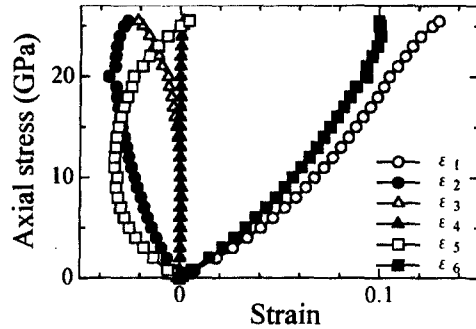
Fig. 4. Quartz crystal and specimen preparation.

하장치(MTS제 유압식 축재하시험기, 재하능력 10 ton)와 계측장치(디지털 변형률 측정기, 일본, TDS-301)로 구성되어 있다. 변형률은 공시체에 부착된 두 개의 변형률계이지(strain gauge)로부터 측정되었다. 공시체는 일본 地 科 學 社에서 원주형 비트로 가공하였으며, 직경 10 mm, 높이 20 mm의 원주형 공시체를  $c$ 축에 평행 및 수직되게 각각 제작하여 시험하였다.

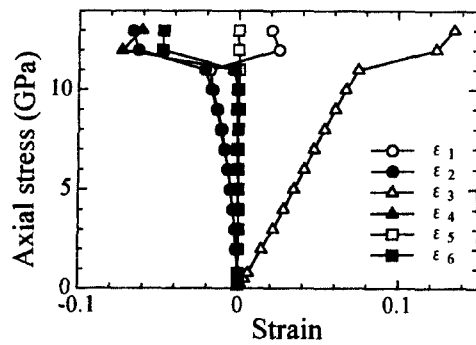
3. 결과 및 고찰

3.1 MD 시뮬레이션에서의 강도

NPT-ensemble MD 시뮬레이션을 이용하여 300°K 조건에서 무결함  $\alpha$ -quartz의 결정축에 따른 응력-변형률 곡선을 구했다(Fig. 5). 시뮬레이션에서는 한번의 일축압축 재하를 통하여 6개의 변형요소  $\epsilon_i$ (21식 참조)를 구할 수 있다. MD 시뮬레이션에서는 재하압력이 증가함에 따라서 결정구조의 변형이 증가되고, 결국에는 초기의 결정구조를 잃게 됨에 따라 시뮬레이션이 중단된다. 본 시뮬레이션에서는 시뮬레이션이 중단되는 압력이 시뮬레이



(a) The loading direction is parallel to a-axis.



(b) The loading direction is parallel to c-axis.

Fig. 5. Stress-strain response of  $\alpha$ -quartz in MD simulation.

선에 의한 최대강도와 거의 일치되고 있으나, 재하방향이 c축에 평행한 경우(Fig. 5b)를 보면 12 GPa부터 변형률의 급격한 변화가 인지되어 시뮬레이션은 진행이 되지만 일축압축 강도는 11 GPa로 보는 것이 타당하리라 생각된다. 재하방향이 c축에 수직인 경우(Fig. 5a)의 일축압축 강도는 26 GPa로 현저히 높다. 모든 응력-변형률 곡선의 저응력 부분에서는 선형관계를 보이고 있으나, 응력이 증가함에 따라 비선형 관계를 나타내고 있음을 알 수 있다.

3.2 자연산 석영의 강도 이방성

석영은 육방정계에 속하고, 産狀은 柱形과 錐形이 합해진 聚形으로 산출되며, 결정면 중 주면은 c축에 평행하게 발달되어 있다. 벽개(cleavage)가 발달하지 않으므로 쪼개지는 특징은 없고, 패각상(conchoidal)으로 깨어지는 특성이 있다.

Fig. 6a는 c축에 수직으로 제작된 공시체를 이용한 일축압축강도시험의 결과이다. 강도는 517~662 MPa의 범

위에 분포하며, 재하축 변형률은 약 1%내의, 횡변형률은 0.2~0.4%범위에 분포하고 있다. 그에 반해 c축에 평행하게 제작된 공시체의 강도는 662~800 MPa 범위에 분포하고 있으며, 재하축 변형률은 0.6~1.25%, 횡변형률은 0.1~0.5%범위에 분포하고 있다(Fig. 6b). 단, Fig. 6b에서 포어슨 비가 0.83까지 나오는 것은 변형률계이지의 이상으로 인한 실험의 오차로 사료된다.

3.3 석영의 결정축에 따른 강도 이방성

MD 시뮬레이션에 의한 석영의 강도는 미세결합을 전혀 포함하고 있지 않은 결정의 강도를 의미한다. 이는 계산모델 내에서 방향에 관계없이 동일하게 적용되는 포텐셜함수로 표현되는 원자상호간에 작용하는 힘과 원자구조에 지배를 받는다. 본 연구에 이용된 포텐셜함수는 Seo 등<sup>11,12</sup>에 의한 MD 시뮬레이션 연구에서 탄성정수, 열팽창계수 등 석영의 역학적 성질을 잘 재현함이 밝혀진 바 있다.

압축방향에 따른 일축압축강도는 MD 시뮬레이션에 의한 강도가 시험에 의한 강도와 서로 상이한 특징이 있다. 즉, MD 시뮬레이션에서는 c축에 수직인 공시체가 c축에 평행한 공시체보다 강도가 두배 이상 높게 나타난다. 이는 결정축 길이 등의 결정구조의 차에 기인하는 것으로 사료된다.

자연산 석영의 일축압축강도시험에서는 c축에 평행한 공시체가 c축에 수직인 공시체보다 강도가 다소 높게 나타난다. 이는 석영이 포함하고 있는 미세결합의 유무에 따른 결과라고 생각된다. 국내의 연양 자수정 광산에서 채취한 석영 내에서 상기와 같은 미세결합이 관찰되는데, 이들 미세결합은 결정의 외형에 평행하게 발달한다(Photo. 1). 따라서 이들 미세결합들은 결정의 성장과 밀접한 관계가 있는 것으로 판단된다. 본 연구에 이용된 공시체는 제작 방향에 따라 공시체에 포함되는 미세결합의 기하학적 형태가 달라지게 된다. 즉 c축에 평행하게 제작된 공시체의 경우, 서로 연결된 3차원적 주상 미세결합을 포함하고 있으며(Fig. 7a), c축에 수직인 공시체는 2차원적 판상 미세결합을 포함하게 된다(Fig. 7b). 이에 따른 강도이방성이 시험 결과에 반영된 것이라 사료된다. 단, 본 논문에서는 결정 성장후의 지질학적 운동 및 풍화작용에 의한 결함 등은 고려하지 않았음을 밝혀둔다.

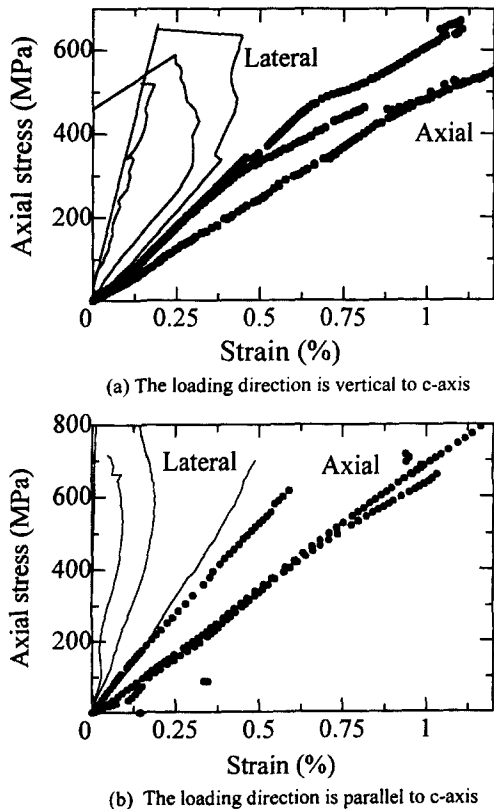


Fig. 6. Stress-strain response of quartz specimens in uniaxial compression test.

4. 결 론

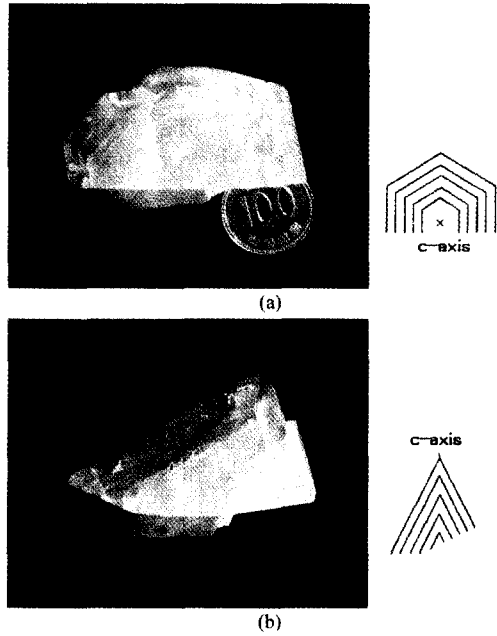


Photo. 1. Quartz rystal showing crystal growth lines.

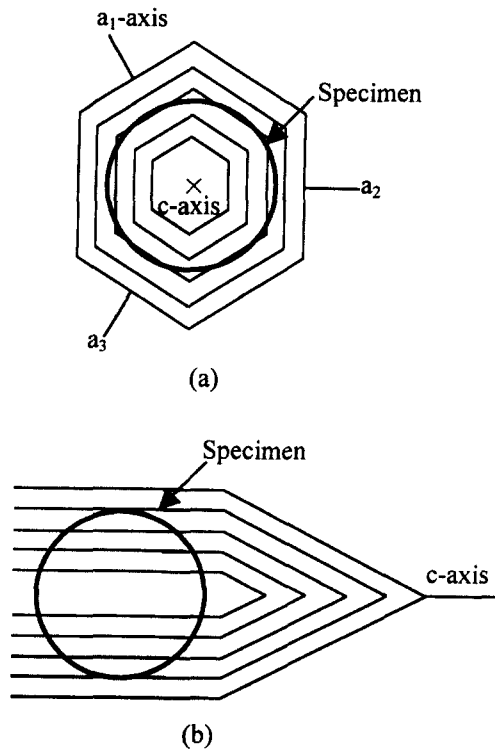


Fig. 7. Cross-sections showing quartz crystal Growth lines and specimen.

본 연구에서는 컴퓨터의 가상공간을 이용하여 암석을 시뮬레이션 하는 그 첫걸음으로, 암석을 구성하고 있는 조암광물의 일종인 석영의 강도이방성에 대하여 검토하였으며, 일축압축시험 결과와 비교하였다.

첫째, 자연산 석영을 이용한 일축압축강도시험의 결과와 MD 시뮬레이션의 결과로부터 석영 단결정의 강도는 결정이 가지는 미세결함에 의해 주로 지배됨이 밝혀졌다.

둘째, 완전무결함 석영은 자연산 석영에 비해 약 20~30배 높은 일축압축강도를 보인다.

셋째, 결함을 고려하지 않은  $\alpha$ -quartz의 MD 시뮬레이션 결과에 의하면 강도는 c축에 수직인 방향이 c축에 평행한 방향보다 약 2배 강한 강도를 보인다. 이는 결정 구조의 차이에 기인하는 것으로 사료된다.

넷째, 자연산 석영의 경우 재하방향이 c축에 평행한 것이 c축에 수직인 경우보다 약 100 MPa 높은 강도 값을 보인다. 이는 강도가 자연산 석영이 가지는 미세결함의 기하학적 형태에 지배되기 때문으로 사료된다.

사 사

본 연구를 수행함에 있어 실험 및 자료정리에 많은 도움을 준 경북대학교 지질학과 도미란 양, 최정해 군과名古屋大學 地圏環境工學科 地圏空間設計學 연구실 여러분께 감사드립니다.

참 고 문 헌

1. Quesnel, D. J., D. S. Rimai and L. P. DeMejo, 1993, Elastic compliances and stiffnesses of the fcc Lennard-Jones solid, Phys. Rev. B, 48.10, 6795-6807.
2. Miyazaki, N. and Y. Shiozaki, 1996, Calculation of mechanical properties of solids using molecular dynamics method, Japan, Soc. Mech. Eng., A62.594, 430-436.
3. Okamoto, S. and A. Masaki, 1996, Calculations of mechanical material constants and evaluation of potentials for a simple crystalline metal by molecular dynamics method, Japan. Soc. Mech. Eng., A62.599, 1597-1604.
4. 河村雄行, 1990, パソコン分子シミュレーション, 海文堂, 東京, 7-65.
5. Matsui, M. and G. D. Price, 1992, Computer simulation of the MgSiO3 Polymorphs, Phys. Chem. Minerals, 18, 365-372.
6. Tsuneyuki, S., M. Tsukada and Aoki, 1988, First-Principles Interatomic Potential of Silica Applied to Molecular Dynamics, Phys. Rev. Lett., 61.7, 869-872.



7. Kawamura, K., 1992, *Molecular Dynamics Simulations* (ed. by F. Yonezawa), Springer, Tokyo, 88.
8. 上田顯, 1996, コンピュータシミュレーション, 朝倉書店, 東京, 54-57.
9. Kawamura, K., 1995, MXDTRICL, JCPE Newslett., 6.4, 72.
10. Wright, A. and M. S. Lehmann, 1981, The structure of Quartz at 25 and 590°C determined by neutron diffraction, *J. Solid State Chemistry*, 36, 371-380.
11. Seo, Y., Y. Ichikawa and K. Kawamura, 1999, Stress-strain response of rock-forming minerals by molecular dynamics simulation, *Mat. Sci. Res. Int.*, 5.1, 13-20.
12. Seo, Y., Y. Ichikawa and K. Kawamura, 1999, Calculation of the thermal expansion coefficient of quartz using molecular dynamics simulation, Proc. 11th Japan geotech. eng. symp., Nagoya, 103-106.

**서 용 석**



1991년 경북대학교 자연과학대학  
지질학과, 이학사  
1993년 경북대학교 대학원 지질학  
과, 이학석사  
1999년 일본 名古屋大學 大學院 地  
圏環境工學科, 공학박사

Tel : 053-950-6344  
E-mail : geo21th@yahoo.co.kr  
현재 경북대학교 대학원 지질학과, Post-Dr.

**이 진 국**



1985년 경북대학교 자연과학대학 지  
질학과, 이학사  
1987년 경북대학교 대학원 지질학과,  
이학석사  
1993년 경북대학교 대학원 지질학과,  
이학박사

Tel : 053-950-6344  
E-mail : leejkk@hanmail.net  
현재 경북대학교 지진 산업지질연구소, 객원연구원

**市川 康明**



1971년 京都大學 工學部, 공학사  
1978년 미국 Texas대학교 자연과학  
대학, 이학석사  
일본 名古屋大學 대학원 토목공학과,  
공학박사

Tel : +81-52-789-3829  
E-mail : a40346a@nucc.cc.nagoya-u.ac.jp  
현 재 名古屋大學 大學院 地圏環境工學科, 조교수

**河村 雄行**



1975년 일본 岡山大學 理學部 화학  
과, 이학사  
1977년 일본 岡山大學 大學院 理學  
研究科, 이학석사  
1985년 일본 東京大學 大學院 理學  
研究科, 이학박사

Tel : +81-3-5734-2617  
E-mail : kats@geo.titech.ac.jp  
현 재 일본 東京工業大學 理學部, 교수

**정 교 철**



1982년 경북대학교 자연과학대학  
지질학과, 이학사  
1987년 경북대학교 대학원 지질학  
과, 이학석사  
1994년 일본 名古屋大學 大學院 土  
木工學科, 공학박사

Tel : 0571-850-5753  
E-mail : jeong@andong.ac.kr  
현 재 안동대학교 지구환경과학과, 조교수

**김 교 원**



1976년 경북대학교 자연과학대학  
지질학과, 이학사  
1982년 태국 Asian Institute of  
Technology 지반공학과, 공  
학석사  
1989년 미국 Northwestern Univ.  
토목공학과, 공학박사

Tel : 053-950-5357  
E-mail : gyokim@kyungpook.ac.kr  
현 재 경북대학교 지질학과, 조교수