

# 분자동력학을 이용한 결정립 제어 레오로지 소재의 나노 변형거동 전산모사

김정원<sup>1</sup> · 윤성원<sup>1</sup> · 강충길<sup>#</sup>

## Molecular Dynamics Simulation of Nano-Deformation Behavior of the Grain-Size Controlled Rheology Material

J. W. Kim, S. W. Youn, C. G. Kang

(Received April, 27, 2004)

### Abstract

In this study, the nano-deformation behavior of semi-solid Al-Si alloy was investigated using a molecular dynamics simulation as a part of the research on the surface crack behavior in thixoformed automobile parts. The microstructure of the grain-size controlled Al-Si alloy consists of primary and eutectic regions. In eutectic regions the crack initiation begins with initial fracture of the eutectic silicon particles and inside other intermetallic phases. Nano-deformation characteristics in the eutectic and primary phase of the grain-size controlled Al-Si alloy were investigated through the molecular dynamics simulation. The primary phase was assumed to be single crystal aluminum. It was shown that the vacancy occurred at the zone where silicon molecules were.

**Key Words** : Molecular Dynamics Simulation, Nanoindentation, Grain-size Controlled Al-Si Alloy, Two Phases

### 1. 서 론

반응용 성형(결정립 제어 레오로지 성형) 공정은 자동차 부품의 고강도 경량화를 목적으로 엔진 브라켓트, 스테어링 너클, 마스터 실린더, 로우/어퍼 암 등의 제조에 적용되고 있으며, 자동차 산업뿐만 아니라 다양한 산업 분야로 그 적용영역이 넓어지고 있다.

반응용 상태에서 알루미늄 합금과 같이 고액공존영역을 가지는 소재 내부에는 초정(고상)과 공정(액상)이 공존하게 된다. 초정  $\alpha$  의 크기 및 형상과 공정조직 내에 있는 실리콘의 형상 및 크기는 소재의 기계적 성질 및 변형거동에 큰 영향을 미친다. 예를 들면, 알루미늄 합금의 크랙은 공정상내의 실리콘 입자에서 발생하며, 크고 긴 모양의

실리콘 입자가 많을수록 쉽게 발생한다[1~2].

따라서, 공정조직 내에 있는 실리콘의 분포와 크기 등을 고려한 반응용 재료의 변형거동에 관한 이론적 예측모델이 필요하다. 초정상과 공정상이 공존하는 이상(two phase) 소재의 경우, 인장, 압축 및 피로를 해석함에 있어서 연속체를 가정한 유한요소법이 사용되고 있다, 그러나 기존의 수치 해석 방법으로는 이상 조직을 고려한 초미세 변형 거동이나 입자단위로 발생하는 공공의 발생 등을 예측 하는데 있어 한계가 있다.

따라서 본 연구의 저자들은 분자동력학(molecular dynamics)의 개념을 도입하여 반응용 재료의 초미세 거동에 대한 이론적 연구를 수행 하고자 하였다. 1950년대 후반 Alder 와 Wainwright에 의해 연구가 시작된 분자동력학은, 나노 정밀도 절삭, 크

1. 부산대 정밀기계공학과  
# 교신저자 : 부산대 기계공학부, cgkang@pusan.ac.kr

랙 전파, 혹은 전위의 거동을 정성적으로 규명하는 분야에 적용되고 있다[3~10]. 현재 분자동력학은 조직성장[5], 압입[6~7], 마찰공학[6], 저압 다이아몬드 합성과 레이저 상호작용[8]에 관한 영역으로 넓게 적용되고 있다. 분자동력학의 최대 단점인 방대한 계산 시간을 줄이기 위해서 LRMD[11], ARMD[12], 입자등록법, 주기경계조건 등의 여러 가지 방법이 개발되고 있으나, 마이크로 레벨의 해석은 아직까지 현실적으로 불가능하며 수 나노 정도의 크기에 대한 해석이 대부분이다. 그러나, 컴퓨터 기술의 비약적인 발전과 분자동력학 분야의 발전에 따라 마이크로 레벨로의 적용이 가능할 것으로 판단된다.

현재까지 분자동력학은 순수 물질에 대한 연구가 주를 이루고 있으며, 반응용 소재와 같은 이상소재의 나노 변형시 발생하는 미세조직의 입자 거동에 대한 연구는 보고되지 않고 있다.

본 연구에서는 반응용 소재의 표면 크랙 및 변형거동을 예측하기 위한 연구의 일환으로, 공정상 내에 존재하는 실리콘 입자의 분포 변화에 따른 나노압입 실험의 분자동력학 시뮬레이션을 수행하였다. 또한, 압자의 형상과 압입 위치가 반응용 소재의 초미세 거동에 미치는 영향을 조사하였다.

## 2. 분자동력학의 원리

### 2.1 분자동력학의 개요

분자동력학은 소수 분자단위의 연구에 사용되는 양자역학을 응용한 분야이다. 양자역학은 전자의 운동을 포함시켜 해석하는 반면에 분자동력학은 분자를 원자로 국한시켜 하나의 원자핵으로 생각한다는 점이 가장 큰 차이점이다. 분자동력학은 원자를 원자핵만의 질점계로 가정하고 입자간의 포텐셜을 이용하여 입자간력을 구하고, 뉴턴역학을 적용하여 수치적분을 통해 위치벡터와 속도벡터를 구하며 이 값으로부터 각종 데이터 해석을 통하여 원하는 물리량을 구한다

분자동력학에서는 각 입자간에 작용하는 힘을 구하기 위해서 입자간 상호작용 포텐셜에너지를 가정한다. 해석하고자 하는 계의 전체 입자수를  $N$  이라고 하면 계의 전체 포텐셜에너지  $\phi$  는 일반적으로 식(1)과 같이 표시된다.

$$\phi = \sum_i \phi(r_i) + \sum_i \sum_{j>i} \phi(r_{ij}) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j>i} \phi(r_{ijk}) + \dots (1)$$

식(1)에서  $r_{ij}$  는 입자  $i$  와  $j$  사이의 거리를 나타내고  $r_{ijk}$  는  $i, j, k$  사이의 거리를 나타낸다.

우변 첫 번째 항은 외부장에 의한 포텐셜을 나타내는데 입자들이 중력장이나 전기장 하에 존재하는 경우에 작용하는 포텐셜의 크기를 나타낸다. 우변의 두 번째 항은 쌍으로 이루어진 입자들 사이에 상호 작용하는 포텐셜로 두 입자간 포텐셜(two-body potential)을 의미한다. 세 번째 항은 세 개의 입자가 한 쌍을 이룰 때 작용하는 세 입자간 포텐셜(three-body potential)을 나타낸다. 일반적으로 세 입자간 포텐셜과 그 이상의 포텐셜은 전체 계에 미치는 영향이 극히 적으므로 일반적으로 분자동력학에서 무시된다. 또한 중력장이나 전기장의 영향을 무시할 수 있다면 계 전체의 포텐셜 에너지는 식(2)와 같이 나타낼 수 있다.

$$\phi = \sum_i \sum_{j>i} \phi(r_{ij}) (2)$$

$$F_i = - \sum_{j=(j \neq i)}^N \nabla_i \phi(r_{ij}) (3)$$

원자핵만의 포텐셜에 대한 타당성을 확인하였으므로 위의 식을 뉴턴역학에 적용하기 위해 식(3)과 같이 입자간거리  $r_{ij}$  로 포텐셜 함수를 편미분하면 입자  $i$  에 작용하는 힘  $F_i$  를 구할 수 있다

본 연구에서는 모스포텐셜(Morse potential)[12]을 사용하였고 기본식은 식(4)와 같다.

$$\phi(r) = D \{ e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \} (4)$$

각 입자들 간 (Al-Al, Si-Si, Al-Si)의 모스포텐셜 함수 파라미터  $D, \alpha, r_0$  는 참고문헌[9~10]의 것을 사용하였다.

### 2.2 분자동력학 수치해석 기법

앞서 기술한 포텐셜식을 식(3)와 같이 입자간 거리로 편미분하여 입자간의 힘을 구하고 수치적분법을 이용하여 입자의 위치  $r_i$  와 속도  $v_i$  를 구한다.

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \Delta t v_i(t) + \frac{(\Delta t)^2}{2m_i} F_i(t) (5)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{\Delta t}{2m_i} [F_i(t + \Delta t) + F_i(t)] \quad (6)$$

본 연구에서는 식(5), 식(6)와 같이 Verlet[10]이 제안한 알고리즘으로 수치적분을 하여  $\Delta t$  시간 후의 입자  $i$ 의 위치  $r_i$ 와 속도  $v_i$ 를 구하였다. 수치적분 방법으로는 Verlet 알고리즘 이외에 Leap-Frog[13] 방법과 Schofield[14] 적분 알고리즘 등이 있다.

수치적분을 위해서 입자들의 초기 위치와 속도를 알아야 한다. 입자의 초기 위치는 해석 대상 물질의 원자구조에 기초하여 값이 정해지고 초기 속도는 계 중심의 속도가 0이 되도록 Maxwell 분산을 이용하여 초기화한다.

일반적으로 분자동력학의 수치적분에 사용되는 시간증분( $\Delta t$ )는 1 펨토초로 아주 작은 값이다. 따라서 계의 온도변화는 무시되며 식(7)의 Woodcock [14] 방법을 이용하여 온도를 일정하게 재설정한다. 온도 재설정은 매 스텝마다 하지 않고 일정한 간격을 두고 재설정 한다.

$$v_i^{new} = \sqrt{\frac{N_f N k_B T_0}{2} \left[ \sum_{i=1}^N \frac{m_i (v_i^{old})^2}{2} \right]^{-1}} v_i^{old} \quad (7)$$

식(7)은 변형이 진행되는 동안 시스템의 운동에너지는 일정하다고 가정하고, 온도 일정조건을 접목하여 얻어진 식으로  $T_0$ 는 온도,  $N_f$ 는 계의 자유도,  $k_B$ 는 볼츠만 상수로  $1.381 \times 10^{-23}$  J/K이다[10].

분자동력학 해석에서 계산 시간을 줄이기 위한 방법으로 주기경계조건과 컷오프정의에 의한 입자등록법 등이 있다. ARMD와 같은 주기경계조건은 중앙을 기본셀(fundamental cell), 기본셀 주위를 복제셀(image cell)로 설정함으로써 계산시간을 줄이는 방법이다. 본 연구에서는 기본셀 내에서의 거동내용의 조사과 목적이므로 도입하지 않았다. 입자등록법은 포텐셜 함수에서 두 입자의 거리가 일정한 컷오프 값( $r_c$ ) 이상이 되면 두 입자의 입자간력이 0에 가까워지는 점에 착안하여 포텐셜 함수의 미분값이 0이 되는 부근을  $r_c$ 로 정의하고  $r_c$  거리 이내에 존재하는 입자들 사이의 상호작용만 계산하는 방법으로 일반적으로  $r_c$  거리의 3-4배의 값이 주로 사용된다.

해석하고자 하는 계의 공구 속도와, 소재와 공

구에 대한 위치가 결정되면 맥스웰 분산을 이용하여 소재의 초기속도를 결정한다. 해석 과정은 정해진 시간증분을 증가시키면서 이루어지며 입자 사이의 거리와 포텐셜을 기초로 각 입자들의 분자간력을 구한다. 분자간력으로부터 시간증분 후의 입자의 위치 벡터와 속도 벡터를 구하고 이를 갱신하면서 해석을 진행한다. 일정한 시간증분 간격으로 계의 온도를 일정하게 재설정 하며 목적하는 시간 증분까지 해석을 수행한다.

### 3. 결정립 제어 소재의 분자동력학 해석

#### 3.1 분자동력학 해석 모델

알루미늄(Al)과 실리콘(Si)이 주 구성성분인 반응용 A356 합금이 모델로 사용되었다. 기계적 성질의 향상을 위하여 결정립을 제어한 소재는 초정상이 직경40-120 $\mu\text{m}$ 인 구상으로 존재한다. 본 연구에서 초정상은 순수 알루미늄으로 가정하였고, 초정상의 내부에는 포집된 공정상(entrapped eutectic)을 설정하였다. 공정상 내에는 알루미늄과 실리콘 입자를 일정한 비율(Al:Si = 93:7)로 분포시켰다. 결정립 제어 소재의 정확한 실리콘 격자구조가 보고되지 않았기 때문에 면심입방구조(FCC) (111)면의 입자분포를 가정하였다. 공구가 가질 수 있는 이론적인 최소반경은 2-2.6nm[15]이며, 실제 제작 가능한 다이아몬드 Berkovich 압자의 팁 최소 반경은 약 40nm로 알려져 있다. 만약 나노 인덴테이션 실험에 사용되는 40nm의 라운드를 가지는 공구를 사용할 경우 해석하고자 하는 계의 전체 윗면을 압입하는 결과가 되어 해석이 불가능하다. 본 연구에서 분자동력학 해석의 목적은 정성적으로 실리콘 입자에 따른 계의 입자 거동을 관찰하는 것이므로, 공구는 10nm의 라운드를 가지는 다이아몬드 공구로 설정하였다.

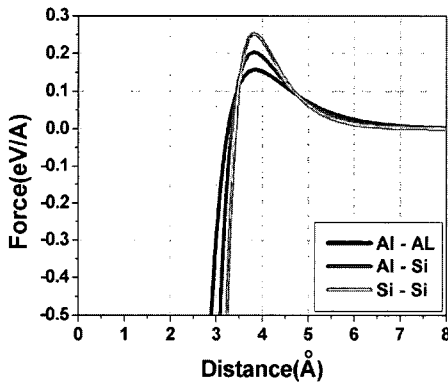
실리콘 입자의 분포에 따른 계의 입자거동을 조사하기 위하여 다양한 실리콘 입자 배치에 따른 해석을 수행하였다. Fig. 1은 해석하고자 하는 계에 대한 힘-원자간 거리 곡선을 나타내고 있다. Fig. 2는 시뮬레이션에 사용한 공구 및 소재의 모델을 나타내고 있으며, 치수는 Table 1에 정리하였다.

Fig. 3의 사각형 모델 1에서는 300m/s의 속도로 4000 스텝 동안 1.2nm 압입 한 후, 800 스텝 동안 홀딩(holding) 시켰다. 그 후 300m/s의 속도로 언로딩(unloading) 하였다. Fig. 3(a)과 Fig. 3(b)의 차이점

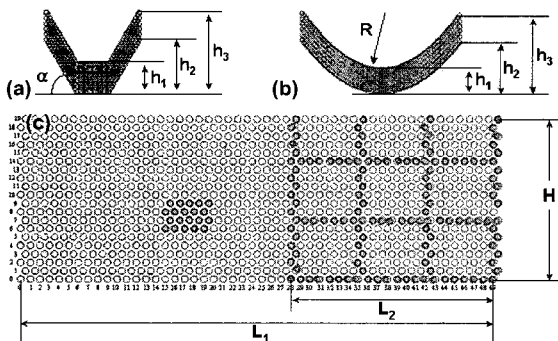
은 압입위치인데, 각각 초정상과 공정상을 압입하는 것을 나타내었다. Fig. 4에서는 라운드가 없는 공구를, Fig. 5와 Fig. 6에서는 라운드를 가지는 공구를 사용하였다. 본 연구의 목적은 표면 압입 시에 표면 부위(공정상과 초정상)의 실리콘 입자의 거동에 따른 크랙 발생 가능성을 조사하는 것이므로 틀과 소재의 형상은 임의로 설정하였다.

**Table 1 Geometry of tools used for molecular dynamics simulation (Fig. 3) [unit: nm]**

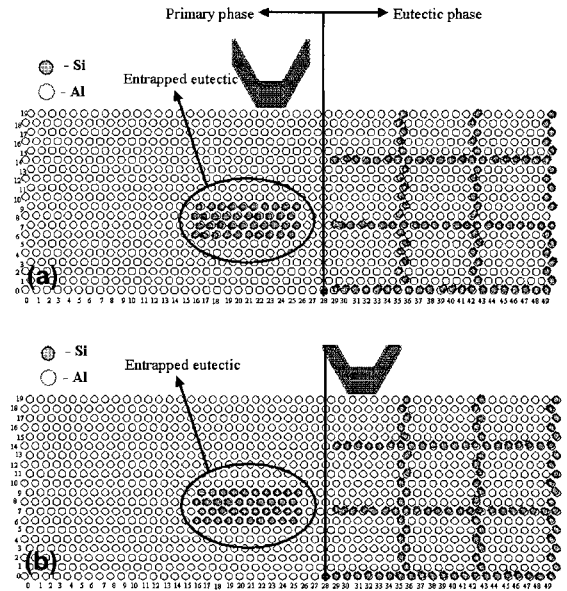
| Dimension    | Material | Tool shape |       |
|--------------|----------|------------|-------|
|              |          | Straight   | Round |
| $L_1 / h_1$  | 18.4     | 0.76       | 0.61  |
| $L_2 / h_2$  | 7.88     | 1.44       | 1.46  |
| $H / h_3$    | 6.47     | 2.19       | 2.2   |
| $\alpha / R$ | N/A      | $60^\circ$ | 10    |



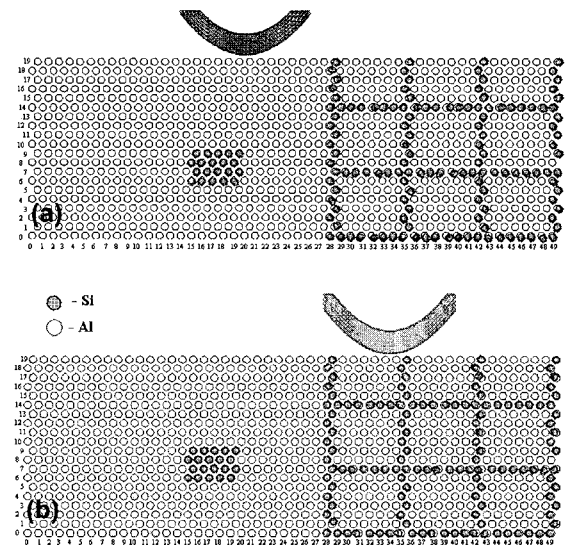
**Fig. 1 Forces between aluminum and silicon atom**



**Fig. 2 Geometries of (a) straight tool (b) round tools, and (c) material used for M/D simulation**



**Fig. 3 Rectangular model 1 for indentation simulation using straight tool on (a) primary Al and (b) eutectic with rectangular Si distribution**



**Fig. 4 Rectangular model 2 for indentation simulation using round tool on (a) primary Al and (b) eutectic with rectangular Si distribution**

Fig. 4 의 사각형 모델 2 에서는 300m/s 의 속도로 5000 스텝 동안 1.5nm 압입한 후, 5000 스텝

동안 홀딩 시켰다 Fig. 4(a)는 초정상을 압입한 경우이고, Fig. 4(b)는 공정상을 압입한 경우이다 Fig. 4의 사각형 모델 1 과의 차이점은 경계부분에 실리콘 입자를 배치하지 않은 것이며 배치 과정에서 전체적인 입자 비율을 맞추기 위해서 포집된 공정상의 크기를 감소시켰다.

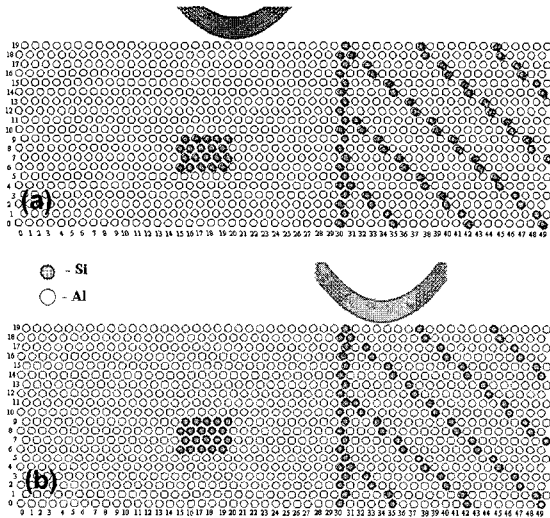


Fig. 5 Monolithic model for indentation simulation using round tool on (a) primary Al and (b) eutectic with gilled Si distribution (Model 3)

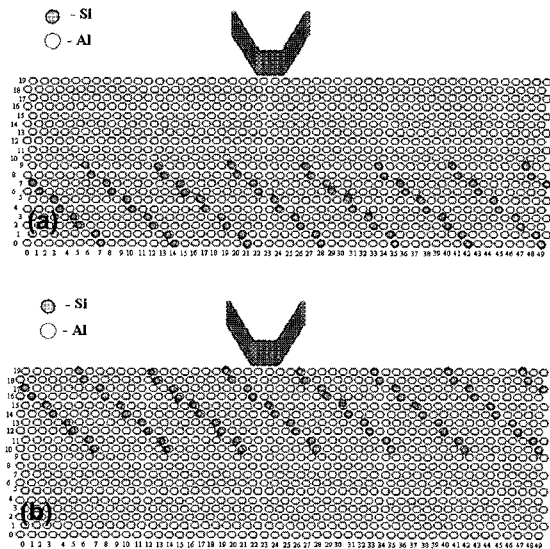


Fig. 6 Half-monolithic model for indentation simulation using round tool on (a) primary Al and (b) eutectic with gilled Si distribution

Fig. 6의 단사정계 모델 3에서는 300 m/s의 속도로 2500 스텝 동안 0.75nm 압입 한 후, 2500 스텝 동안 홀딩 시켰다. 그 후 300m/s의 속도로 3000 스텝 동안 표면에 평행한 방향으로 0.9nm 가압하였다. 단사정계 모델 3에서는 빗살 무늬 모양으로 실리콘 입자를 배치하였으며 공정상과 초정상의 경계부분에 실리콘 입자를 배치하였다.

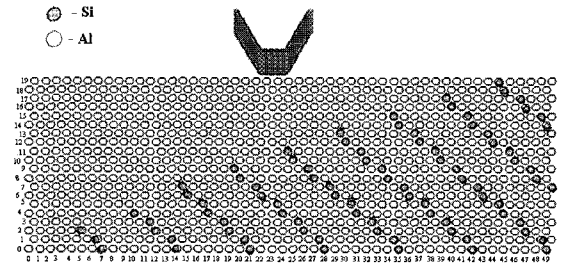


Fig. 7 Taper-monolithic model for indentation simulation using round tool on (a) primary Al and (b) eutectic with gilled Si distribution

Fig. 6 과 Fig. 7 은 각각 반단사정계 절반 모델과 테이퍼 단사정계 모델을 나타낸다. 300m/s 의 속도로 5000 스텝 동안 1.5nm 압입하고 4000 스텝 동안 홀딩 시킨 후 300m/s 의 속도로 언로딩 하였다. 반단사정계 모델과 테이퍼 단사정계 모델의 경우에는 공정상과 초정상을 상하로 설정하여 압입이 아랫면에 미치는 영향을 알아보기로 하였다.

각각의 해석 모델에 대한 해석조건을 Table 2 에 정리하였다.

Table 2 Simulation conditions

| Model name       | Tool shape | Distribution shape of Si | Depth (nm) | Tool Velocity (m/sec) |
|------------------|------------|--------------------------|------------|-----------------------|
| Rectangular 1    | Straight   | Rectangular              | 1.2        | 300                   |
| Rectangular 2    | Round      | Rectangular              | 1.5        | 300                   |
| Monoclinic       | Round      | Monoclinic               | 0.75       | 300                   |
| Half monolithic  | Straight   | Monoclinic               | 1.5        | 300                   |
| Taper monolithic | Straight   | Monoclinic               | 1.5        | 300                   |

### 3.2 분자동력학 해석 결과

Fig. 8(a), (b)는 사각형 모델 1(Fig. 4)에 대한 압입 시뮬레이션 결과를 나타내고 있다. 실리콘 입자를 배치한 곳에서 공공이 발생하였는데, 이는

소재의 변형이 진행됨에 따라서 각각의 입자들이 기존 위치보다도 더 안정적인 격자 구조로 이동하면서 나타나는 현상으로, 알루미늄 입자와 실리콘 입자가 서로 다른 격자구조를 가지려 하기 때문이다. 또한, 실리콘 입자의 크기가 알루미늄 입자 사이의 간극보다 훨씬 크기 때문에 격자구조를 재구성함에 있어서의 공공이 발생함을 예측할 수 있다. Fig. 8(b)은 실리콘 입자가 분포된 공정상에서 공공이 발생함을 보여주고 있다.

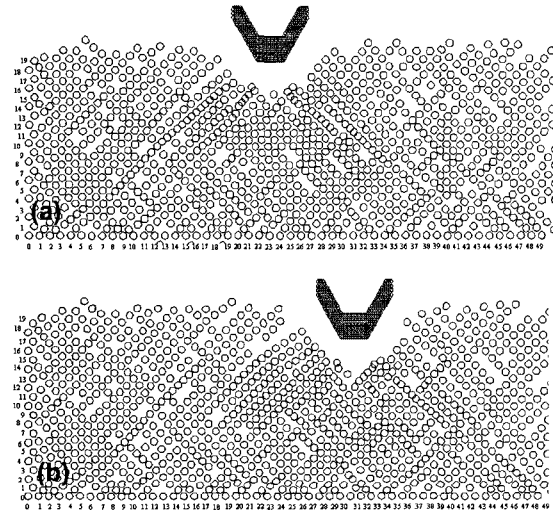


Fig. 8 Simulation results of indentation on (a) primary Al and (b) eutectic with rectangular Si distribution (rectangular model 1)

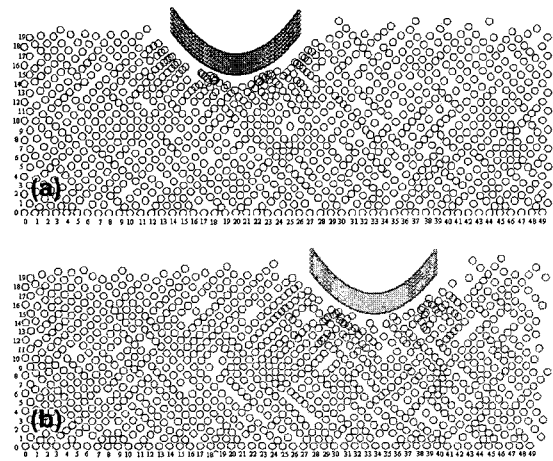


Fig. 9 Simulation results of indentation on (a) primary Al and (b) eutectic with rectangular Si distribution (rectangular model 2)

Fig. 9(a), (b)는 사각형 모델 2(Fig. 5)에 대한 결과를 나타내고 있다. Fig. 9(a)는 초정상의 위쪽을 압입한 후의 모습을 나타내고 있다. 압입 위치 주변의 입자 분포가 고르게 분포되어 있음을 관찰할 수 있다. Fig. 9(b)는 실리콘이 배치된 공정상을 압입한 후의 상태를 나타내고 있다. Fig. 8(b)의 결과와 유사하게 압입위치 아래에 공공이 발생하였으며 압입 위치 주변의 입자 분포가 고르지 못함을 관찰할 수 있었다.

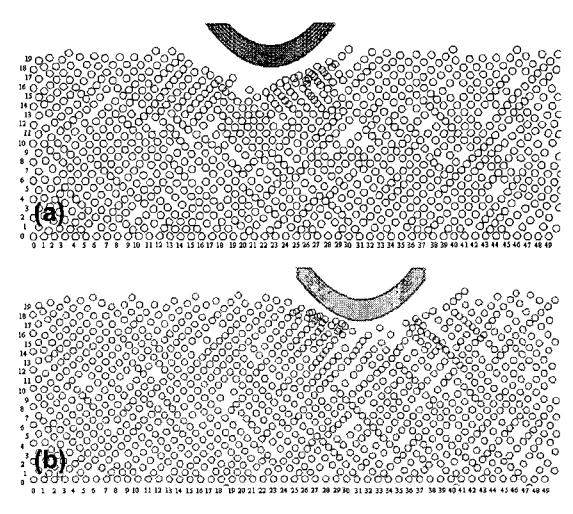


Fig.10 Simulation results of indentation on (a) primary Al and (b) eutectic with gilled Si distribution (Monolithic model)

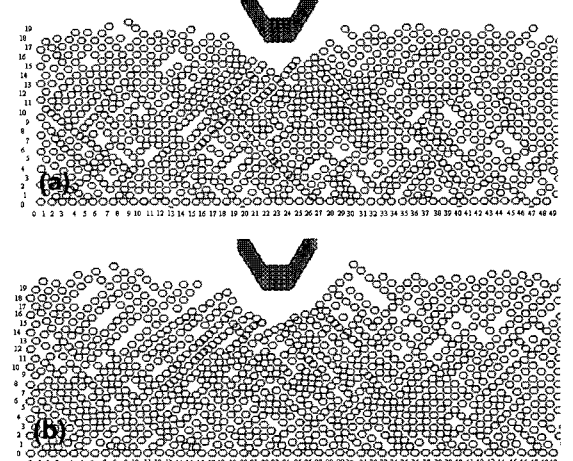


Fig.11 Simulation results of indentation on (a) primary Al and (b) eutectic with gilled Si distribution (half-monolithic model)

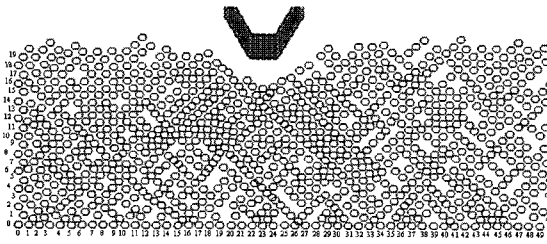


Fig.12 Simulation results of nano-indentation on (a) primary Al and (b) eutectic with gilled Si distribution (taper-monolithic model)

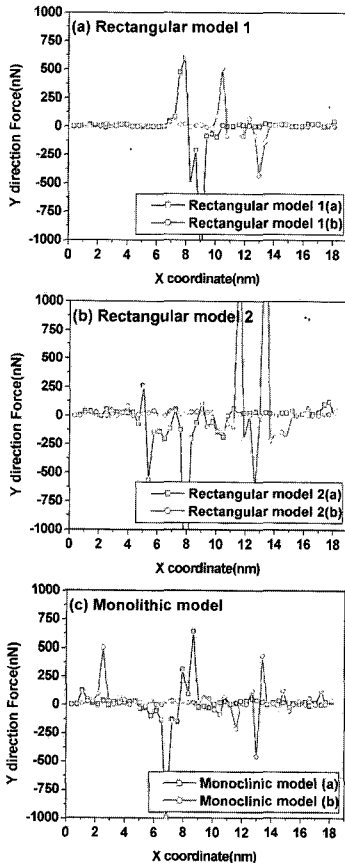


Fig.13 Y-directional force of several indentation simulation models

Fig. 10(a), (b)는 단사정계 모델(Fig. 5)의 결과로서 극미소 압입 (0.75nm) 후에 각각의 압입 위치에서 경계면 방향으로 가압한 결과이다. 공정상(Fig. 10(b))을 압입한 경우가 초정상(Fig. 10(a))을 압입한 경우보다 공공의 발생량이 많았다.

Fig. 11은 공정상과 초정상이 아래 위로 존재하는 반단사정계 모델(Fig. 6)에 1.5nm 압입한 결과

를 나타내고 있다. 공정상이 윗면에 존재할 경우(Fig. 11(b))가 초정상이 윗면에 존재할 경우(Fig. 11(a))보다 공공의 발생량이 많고 압흔이 깨끗하지 못함을 관찰할 수 있었다.

Fig. 12는 테이퍼 단사정계 모델(Fig. 7)에 1.5nm 압입한 결과를 나타내고 있는데, 경계 면에서 특별한 현상은 관찰되지 않았다.

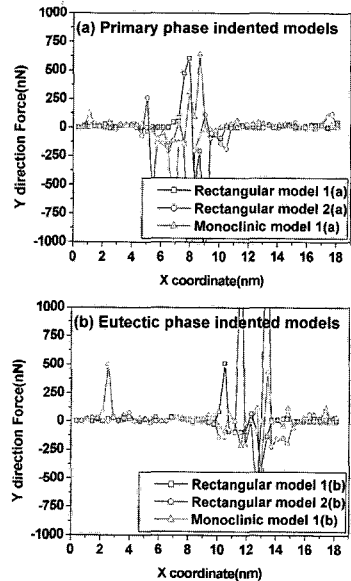


Fig.14 Y-directional force of several indentation simulation models

Fig. 13과 Fig. 14는 2500 스텝(0.75nm 압입)에서 얻은 표면 층의 분자간력을 나타내고 있다. Fig. 13에서는 공정상의 실리콘 배치 형태에 따라 정리하였다. Fig. 13(a)는 사각형 모델 1(Fig. 3)에서 직선공구를 이용하여 공정상과 초정상을 압입했을 때의 결과이다. 초정상을 압입할 때는 표면층의 입자들간의 분자간력의 감쇠가 적었으나, 실리콘 입자가 분포한 공정상에서는 초정상을 압입한 경우보다 분자간력의 감쇠가 많이 발생하였다. Fig. 13(b)의 결과는 라운드를 가지는 툴을 사용한 사각형 모델 2에서 공정상과 초정상을 압입한 경우이다. 공정상과 초정상 모두 분자간력의 감쇠 능력이 떨어지는 것으로 나타났다. 하지만 최대값을 제외한 평균값에서는 Fig. 13(a)와 유사하게 공정상을 압입할 때 분자간력의 감쇠가 많음을 알 수 있다. Fig. 13(c)에서도 유사한 결과를 관찰할 수 있다. 공정상에서 분자간력의 감쇠가 크다는 것은

입자들 사이에 상호작용이 활발함을 나타내며, 상호작용이 활발한 만큼 입자이동이 심화되어 공공의 발생을 유발하는 것으로 판단된다.

Fig. 14는 Fig. 13의 결과를 초정상을 압입한 경우와 공정상을 압입한 경우로 분류한 것이다. 공정상을 압입한 경우(Fig. 14(b))에는 인력 빈도가 높고, 초정상을 압입한 경우(Fig. 14(a))에는 반발력의 빈도가 높음을 알 수 있었다.

#### 4. 결론

공정상과 초정상으로 구성된 결정립 제어 Al-Si 소재의 분자동력학 해석을 통해 다음의 결과를 얻었다.

(1) 크랙 발생위치나 미세 변형거동을 예측하기 위하여, 각기 다른 실리콘입자의 배열(사각형, 단사정, 반단사정, 테이퍼단사정)구조를 가지는 분자동력학 해석 모델을 제안하였다.

(2) 나노압입 후 공공은 실리콘 입자가 위치한 곳에 주로 발생하였으며, 공공의 분포는 실리콘 입자들의 배열 구조에 큰 영향을 받았다.

(3) 공정상의 경우 초정상에 비하여 분자간력의 감쇠가 크게 나타났는데, 이는 입자들 사이에 상호작용이 활발함을 나타낸다. 이러한 상호작용에 의한 입자 이동의 심화가 공공 발생의 한 원인이 되는 것으로 판단된다. 또한, 공정상을 압입한 경우에는 인력 빈도가 높은 반면에 초정상을 압입한 경우에는 반발력의 빈도가 높았다

#### 후 기

본 연구는 과학기술부 국가지정연구실(NRL) 사업으로 진행된 결과입니다.

#### 참 고 문 헌

- [1] C. H. Caceres, J. R. Griffiths, 1996, Damage by the cracking of silicon particles in an Al-7Si-0.4Mg casting alloy, *Acta Mater.*, Vol.44, p. 25.
- [2] E. Cerri, S. Nenna, 2003, Evaluation of damage after straining in a heat treated thixofrmed aluminium alloy, *Materials Science and Engineering A*, Vol.355, p. 160.
- [3] 김찬일, 양승환, 김영석, 2003, 분자동력학을 이용한 나노 재료의 변형거동 전산모사, 한국소성가공학회지, 제 12 권, 제 3 호, p. 171.
- [4] 최덕기, 2002, 분자 동역학을 이용한 재료 거동 해석, *전산구조공학*, 제 15 권 제 3 호, p. 5.
- [5] B. W. Dodson, 1990, Molecular dynamics modeling of vapor-phase and very-low-energy ion-beam crystal growth processes, *Solid State Mater. Sci.* Vol. 16, p. 115.
- [6] U. Landman, W. Luedthe, N. Burnham, R. Colton, 1990, Atomistic mechanism and dynamics of adhesion, nano-indentation and fracture, *Science*, Vol. 248, p. 454.
- [7] 김동연, 손영기, 임성한, 오수익, 2003, 분자동력학을 이용한 나노 인텐테이션과 상변화 해석 연구, 한국소성가공학회 2003년도 추계학술대회 논문집, p. 339.
- [8] X. Chang, M. Perry, J. Pepsloski, D. Thompson, L. Raff, 1993, Theoretical studies of hydrogen-abstraction reactions from diamond and diamond-like surfaces, *J. Chem. Phys.*, Vol.99, p. 4748.
- [9] S. N. Luo, T. Cagin, A. Strachan, W. A. Goddard III, T. J. Ahrens, 2002, molecular dynamics modeling of stishovite, *Earth and Planetary Science Letters*, Vol. 202, p. 147.
- [10] R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L. M. Raff, 2000, M. D. Simulation of nanometric cutting of single crystal aluminium-effect of crystal orientation and direction of cutting, *Wear*, Vol. 242, p. 60.
- [11] N. Chandrasekaran, A. Noori-Khajavi, L. M. Raff, R. Komanduri, 1998, A new method for molecular dynamics simulation of nanometric cutting, *Philos. Mag. B* Vol. 77, p. 7.
- [12] K. Maekawa, A. Itoh, 1995, Friction and tool wear in nano-scale machining - a molecular dynamics approach, *Wear*, Vol. 188, p. 115.
- [13] D. K. Choi, J. W. Kim, 1998, Calculation of stress intensity factors using three-dimensional molecular dynamics simulation, *Met. & Mater.*, Vol. 4, p. 920.
- [14] 문찬홍, 김정두, 1994, 분자동력학을 이용한 공구형상에 따른 미소절삭현상에 관한 연구, 한국정밀공학회 1994년 추계학술대회논문집, p. 83.
- [15] M. Weck, H. Kunzmann, 1994, Ultraprecision in manufacturing engineering, *Proc. of the 3<sup>rd</sup> Int. Conf. on Ultraprecision in Manufacturing Eng.*, Achen, Germany, p. 21.