

<학술논문>

DOI:10.3795/KSME-A.2008.32.12.1047

분자동역학을 이용한 나노구조물의 크기와 결정방향에 따른 응력-변형률 관계 해석

강 용 수* · 김 현 규*

(2008년 1월 25일 접수, 2008년 10월 16일 수정, 2008년 10월 31일 심사완료)

Analysis of Stress-Strain Relationship of Nano Structures According to the Size and Crystal Orientation by Using the Molecular Dynamics Simulation

Yong-Soo Kang and Hyun-Gyu Kim

Key Words: Molecular Dynamics(분자동역학), Crystal Orientation(결정방향), Face-Centered Cubics (면심입방), EAM(Embedded-Atom Method), Schmid Factor(슈미드지수), Stereographic Projection(극사영법)

Abstract

In this paper, the molecular dynamics (MD) simulations are performed with single-crystal copper blocks under simple shear and simple tension to investigate the effect of size and crystal orientation. There are many variances to give influences such as deformation path, temperature, specimen size and crystal orientation. Among them, the crystal orientation has a primary influence on the volume averaged stress. The numerical results show that the volume averaged shear stress decreases as the specimen size increases and as the crystal orientation changes from single to octal. Furthermore, the Schmid factor and yield stress for crystal orientation are evaluated by using the MD simulation on the standard triangle of stereographic projection.

1. 서 론

지난 반세기 동안 유한요소법을 비롯한 전산 수치해석 기법들은 공학 분야에서 중요한 연구의 수단이 되어왔다. 오랜 세월 동안 여러 학자들을 거치면서 잘 정립되어진 역학이론을 바탕으로 한 수치해석 기법들은 다양한 물성과 형상을 갖는 재료 및 구조의 역학적 거동을 해석할 수 있어서 공학과 산업 분야에서 유용한 수단으로 널리 사용되어 지고 있다. 한편, 최근의 과학이론과 기술의 발달로 인해, 나노스케일의 크기를 갖는 구조물 및 소자의 발명이 가능하게 되었다. 이에 따라 나노과학에 대한 관심이 급속도로 증가하고

있는 추세이다. 기계공학 분야에서도 나노 구조물과 소자에 대한 다양한 실험과 전사모사가 진행 되어 지고 있다. 하지만 나노 스케일 재료의 특성과 연속체 재료의 특성이 매우 상이한 것을 그 동안의 수많은 연구⁽¹⁻⁹⁾를 통해서 알 수 있었다. 또한 연속체 역학 이론에서는 없는 새로운 현상들이 나노 구조물 및 소자에서 나타났다. 이러한 새로운 현상들은 연속체 역학이론으로 더 이상 나노시스템 해석에 적합하지 않다는 것을 의미한다. 이러한 이유로 나노 시스템에 대한 전산 수치해석의 기법의 중요성이 더욱 강조 되고 있다. 나노 시스템의 역학적 거동을 전산모사 하기 위해서는 원자간의 상호작용을 기술할 수 있는 새로운 해석기법이 필요하게 되었다. 이러한 요구와 상황에서 분자동역학은 원자수준의 전사모사를 위한 대표적인 기법으로 주목을 받고 있다.

* 책임저자, 회원, 서울산업대학교 기계공학과

E-mail : khg@snut.ac.kr

TEL : (02)949-6310 FAX : (02)949-6310

* 회원, 서울산업대학교 에너지환경전문대학원

E-mail : kang79kr@snut.ac.kr

본 연구에서는 결정구조를 이루고 있는 단결정의 응력상태는 결정학적 방향, 변형경로, 온도, 변형률 증분, 시험편의 사이즈 등에 의존한다는 이전연구^(1,2)의 결과로부터 출발하여, 단결정 구리에 대해서 Embedded Atom Method(EAM)⁽³⁾와 분자동역학을 사용하여 단순인장과 단순전단을 해석하였다. 또한 이전연구에서는 결정방향이 네 가지 형태로 국한되어 있었지만 본 연구에서는 단결정 안에 존재할 수 있는 모든 슬립면으로 확장하여 결정방향에 따른 항복응력을 정량화하고자 한다.

2. 분자동역학

2.1 포텐셜(potential)

고전적인 분자동역학의 정확성은 원자간의 상호작용을 기술하는 포텐셜에 크게 의존하는데 불활성 기체의 적합한 Lennard-Jones 형태의 이원자 포텐셜, 금속결합에 적합한 EAM 형태의 포텐셜, 공유결합에 적합한 Tersoff 형태의 포텐셜이 널리 사용된다. 그 밖에도 재료와 상태에 따라 여러 가지의 포텐셜이 양자역학의 기반으로 만들어 졌다. 본 연구의 해석에는 가장 널리 사용되어지는 EAM 포텐셜인 Mishin 등⁽⁴⁾의 수정된 EAM 포텐셜을 사용하였다. Mishin 등에 의해 수정된 EAM 포텐셜에서 시스템의 총에너지는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V(r_{ij}) + \sum_i F(\bar{\rho}_i) \quad (1)$$

여기서 $V(r_{ij})$ 는 짝 포텐셜(pair potential)이며 원자 i 와 j 사이의 거리 r_{ij} 의 함수이다. 그리고 F 는 침입 에너지(embedding energy)로서 주 전자 밀도(host electron density) $\bar{\rho}_i$ 의 함수이다. 전자 밀도의 함수는 다음과 같이 나타내었다.

$$\bar{\rho}_i = \sum_{i \neq j} \rho(r_{ij}) \quad (2)$$

여기서 $\rho(r)$ 는 전자밀도(electron density)함수이다. 식 (1)은 실제의 물리 관점에서 금속의 결합을 바탕으로 하고 있지만, 식에서 사용되는 포텐셜 함수 $V(r)$, $\rho(r)$, 그리고 $F(\bar{\rho})$ 는 포텐셜 함

수의 역할을 하기 위해서 일정한 fitting 함수를 가지고 매개변수화 하여서 얻어지게 된다. EAM 포텐셜을 만들기 위해서 다음과 같은 과정을 통해서 수식화 하게 된다.

$$V(r) = [E_1 M(r, r_0^{(1)}, \alpha_1) + E_2 M(r, r_0^{(2)}, \alpha_2) + \delta] \times \psi\left(\frac{r-r^c}{h}\right) - \sum_{n=1}^3 H(r_s^{(n)} - r) S_n (r_s^{(n)} - r)^4 \quad (3)$$

포텐셜함수 $V(r)$ 은 실험적으로 얻어진 격자상수 a_0 에서 면심입방격자(FCC)의 기계적인 평형을 만족해야만 한다. 침입함수(embedding function)는 원자들이 배열된 상태에서 한 개의 원자가 다른 원자들 사이에 끼워 들어가는 에너지를 나타낸다. 침입함수들은 다음과 같은 다항식으로 나타낸다.

$$F(\bar{\rho}) = F^{(0)} + \frac{1}{2} F^{(2)} (\bar{\rho} - 1)^2 + \sum_{n=1}^4 q_n (\bar{\rho} - 1)^{n+2} \quad (4)$$

$$F(\bar{\rho}) = \frac{F^{(0)} + \frac{1}{2} F^{(2)} (\bar{\rho} - 1)^2 + q_1 (\bar{\rho} - 1)^3 + Q_1 (\bar{\rho} - 1)^4}{1 + Q_2 (\bar{\rho} - 1)^3} \quad (5)$$

위에서 정의된 두 개의 함수 모두 침입함수(embedding function)를 나타내며 $\bar{\rho} < 1$ 의 경우에서는 식 (4)의 함수를 이용해서 침입함수를 계산하게 되고 반대로 $\bar{\rho} > 1$ 인 경우에는 식 (5)를 사용하게 된다.

2.2 주기경계조건

주기 경계조건은 작은 시스템에서 필연적으로 발생하는 표면 효과를 완화할 수 있다. 부피 V 에 갇힌 N 개입자의 해석에서 주기 경계조건을 사용하는 경우, 부피 V 을 기본방(basic cell)으로 간주하고 그와 똑같은 복사본이 기본방을 둘러싸고 있어서 기본방이 모든 방향으로 주기적으로 반복되어 거시학적인 모델의 효과를 볼 수 있게 된다.

2.3 시간적분 알고리즘

분자동역학 프로그램에서 가장 중요한 것은 원자들 사이의 상호작용과 그에 따른 공간 경로의 운동방정식을 적분하는 시간적분 알고리즘이 가장 중요하다고 할 수 있다. 본 연구에서는 분자

동역학에서 가장 보편적으로 사용되는 시간적분 알고리즘인 버렛 알고리즘(Verlet algorithm)⁽¹¹⁾을 사용 하였다.

2.4 평균응력

응력을 평가하기위한 원자 각각의 힘은 운동방정식의 시간적분을 통해 얻어진 에너지가 사용된다. 일단 에너지에 의해 힘이 결정되면, 쌍극자 힘 텐서 $\beta^{(5)}$ 을 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\beta^{ikm} = \frac{1}{\Omega^i} \sum_{j(i \neq j)}^N f_k^{ij} r_m^{ij} \quad (6)$$

여기서 f_k 는 원자 i, j 의 힘 vector이고, r_m 은 변위 vector이다. N은 최근접원자들의 수이고 Ω^i 는 이때의 i 원자의 체적이다. 이 방법으로 β 를 원자의 관점에서의 stress tensor로 근사할 수 있다. 그리고 전체 시스템의 응력을 연속체 관점으로 표현하기 위해서 전체 블록의 체적으로 평균한 stress tensor⁽⁵⁾로 다음과 같이 표현된다.

$$\sigma_{mk} = \frac{1}{N^*} \sum_i^N \beta_{mk}^i \quad (7)$$

여기서 N^* 을 시스템내의 전체 원자수로하고 β 를 local stress, σ 를 global stress로 정의 한다. 이렇게 얻어진 응력은 시스템 안에 전체 원자의 수에 대해 평균적으로 응력을 산출하기 때문에 원자수가 많을수록 보다 안정적인 응력상태를 나타낼 수 있다.

3. 분자동역학 전산해석

3.1 결정방향효과 해석모델

결정방향 효과⁽⁶⁾를 알아보기 위해서 단결정 구리에 대해서 단순인장과 단순전단을 적용하여 응력과 변형률의 관계를 모델의 결정방향(crystal orientation)에 따라서 비교를 하였다. 연구에 사용된 모델은 발생할 수 있는 슬립의 수에 따라서 단일슬립방향(single slip direction), 이중슬립방향(double slip direction), 사중슬립방향(quadruple slip direction), 팔중슬립방향(octal slip direction) 총

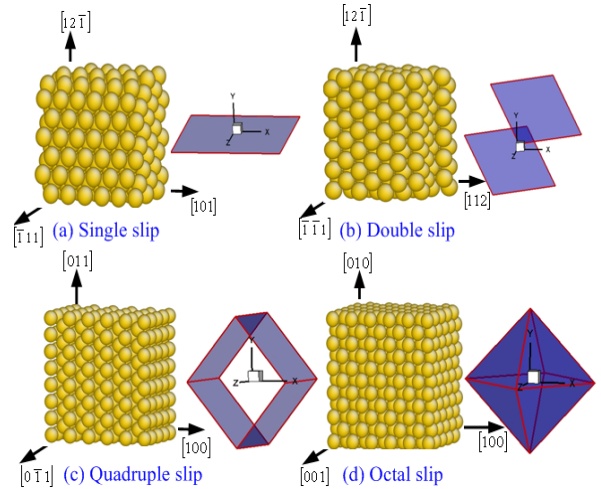


Fig. 1 Configuration of various slip directions model and slip planes

네 개의 모델을 만들었다. 각각의 모델에서 방향성이 결정되면 원자들의 배열모양과 슬립면이 고유하게 나타난다. Fig. 1의 (a), (b), (c), (d)는 각 모델 별로 방향성과 원자의 고유한 적층모양을 도식화 하였다.

3.2 크기효과 해석모델

본 연구에서는 단결정 구리에 대해서 단순인장과 단순전단을 적용하여 이때의 응력과 변형률의 관계를 시험편의 크기와 모델의 결정방향에 따라서 비교를 하였다. 크기효과를 보기위해서 모델은 동일한 결정방향 하에서 크기가 다른 세 가지의 모델을 만들었다. 모델의 결정방향은 슬립면과 슬립방향이 가장 잘 나타나는 4중슬립 방향의 모델로 결정하고 이 모델 하에서 Fig. 2와 같이 크기가 다른 세 가지의 모델을 만들었다. 분자동역학 전산해석에서 실제의 모델은 작기 때문에 외부에서 가해지는 외력보다 표면력이 더 지배적으로 될 수 있다. 따라서 표면효과를 완화시키기 위해서 모델에 주기 경계조건을 부여하게 된다. 본 연구에서 사용한 모델들에서는 x 와 y 방향으로 자유단의 경계조건을 부여하고 z 방향으로 주기 경계조건을 부여 하였는데 이것은 y 방향은 변위 경계조건이 부여되고 x방향의 원자들에 주기경계조건을 부여하면 슬립이 발생하지 않으므로 주기경계조건은 z 방향으로만 적용한다. 모델은 기본적으로 평형(equilibrium)상태는 모델을 한다. 모델에서 격자상수값 a_0 는 3.615 nm이다.

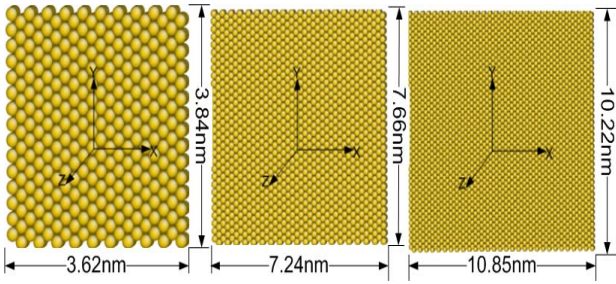


Fig. 2 Configuration of size effect models



Fig. 3 Boundary condition of simple tension

3.3 단순인장의 경계조건

단순인장의 경우 Fig. 3처럼 양쪽 끝단 경계층 원자들의 모든 자유도를 구속하고 원하는 방향으로만 변위를 부여한다. 해석은 모델의 맨위와 아래의 한 층의 원자들을 경계층(boundary zone)으로 하고 원자들을 고정된 상태에서 원하는 방향으로 크기는 같고 방향은 반대인 위쪽 경계층과 아래쪽 경계층에 변위를 주어서 활동영역(active zone) 안에 속한 원자들이 경계층원자들의 운동의 영향으로 변형을 하게 하는 해석 방법이다. 이때 경계층의 원자들은 각 해석 스텝마다 동일한 속도로 변위를 부과한다. 해석의 모델은 x 방향과 y 방향으로는 자유단의 경계를 처리 하고 z 방향은 주기 경계조건을 부여한다.

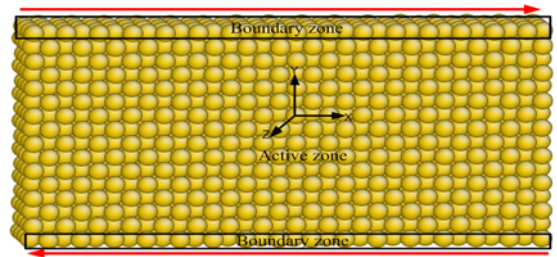


Fig. 4 Boundary condition of simple shear

3.3 단순전단의 경계조건

단순전단의 경우도 단순인장과 유사한 경계조건으로 문제가 이루어져 있다. 끝단고정 해석으로 모델의 위쪽과 아래쪽의 한 층의 원자들의 경계층에 각 해석 스텝마다 크기는 같고 방향은 반대인 변위를 부여하였다. 이때 x 방향의 면은 자유단으로 두고 y 면 또한 자유면으로 주지만 경계영향으로 구속이 된다. z 방향의 경우는 주기 경계조건을 준다. 이로 인해서 해석 모델에서 전위(dislocation)는 x 방향의 자유표면에서 시작되거나 방출된다. Fig. 4는 단순전단의 경계조건에 대해 도식화 한 것이다.

3.4 전산해석방법

전산해석은 시간전진(time marching)기법을 사용하여 경계층의 원자들에 매 스텝마다 위치를 갱신하여 최종으로 원하는 변위까지 진행 시킨다. 이때 해석의 스텝의 크기는 1.0 fs 로 하였다. 해석모델들에 총 원자 수는 모델별로 다르지만 5,000 ~ 12,000개의 원자들을 사용하였다. 해석된 결과는 분자동역학에서 널리 사용되는 Atomeye 3.0을 이용해서 후처리 하였다.

4. 해석결과 및 고찰

4.1 크기효과의 해석결과

본 장에서는 크기효과를 알아보기 위해서 사중슬립모델의 방향성을 가진 모델에서 크기가 서로 다른 세 가지의 모델(Fig. 2)에 단순전단을 주고 재료가 외력에 의해 변형할 때의 응력과 변형률을 모델의 크기에 따라서 평가하였다. Fig. 5에서는 세 모델들의 변형모습을 설명하기 위해서 중앙대칭 변수(Central symmetry parameter)를 사용하였다. 이 변수는 임의의 원자에서 주위를 둘러싸고 있는 최 근접원자수를 기준으로 최 근접원자수가 달라

지는 원자를 다른 색으로 표시해서 슬립의 진행을 보여주었다. 중앙대칭변수의 값에 의한 슬립면의 가시화를 통해서 사중 슬립시스템은 슬립이 외부 응력의 부과 방향과 45° 각을 이루는 것을 알 수 있었다. 또한 슬립은 응력이 집중되는 모서리 부에서 시작해서 슬립면을 따라서 이동한다. 이렇게 진행된 슬립은 자유표면에서 방출된다. Fig. 6에서는 응력과 변형률 관계를 보여주고 있다. 응력이 급격히 올라갔다가 일정한 변형 후 다시 급격히 떨어지는 것을 관찰할 수 있다. 작은 시스템일수록 표면 효과가 지배적이기 때문에 외력에 의해서 작용하는 응력보다 표면력에 의한 영향이 커져서 높은 항복응력을 나타내는 것을 관찰할 수 있었다. 또한 응력과 변형률 선도에서 볼 수 있는 것처럼 작은 모델보다 큰 모델에서 응력이 좀 더 안정적인 것을 알 수 있었다. 이것은 분자동역학 전산해석에서는 응력의 산출을 원자수의 평균으로 계산하므로 원자의 수가 많을수록 안정적으로 평균이 되기 때문이다. 항복응력은 크기가 커질수록 낮아지는 것을 알 수가 있었는데 이것은 큰 모델일수록 결함이나 변형이 발생할 수 있는 가능성이 높기 때문이기도 하다.

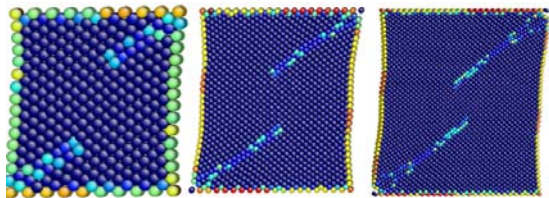


Fig. 5 Deformed shapes and central symmetry parameter at 10% strain

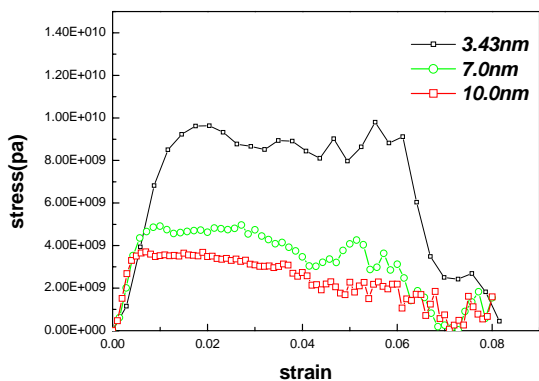


Fig. 6 Comparison of stress-strain relationship for size effect

4.2 결정방향효과의 해석결과 (단순전단)

결정구조를 가지고 있는 금속들은 원자들의 규칙적인 배열에 따라 기계적인 특성이 다르게 나타난다. 본 연구에서는 슬립시스템이 달라짐에 따라 응력 변형률 특성과 항복응력을 평가하였다. Fig. 7은 10%의 변형률에서의 변형모습을 중앙대칭변수를 사용하여 나타낸 것으로 왼쪽그림은 모든 원자들을 표시하였고 오른쪽그림은 슬립이 발생한 부분만 나타낸 것이다.

단일슬립의 경우 전단응력을 가하는 면과 슬립면의 평행하게 나타나는 것을 알 수 있었다. 이중슬립모델의 경우는 네 가지 슬립모델들 중 슬립면과 방향이 명확히 표현되지 않는 모델 중 하나이다. 슬립이 응력이 집중되는 모서리 부에서 시작하고 슬립면은 전단응력을 가하는 면과 일정한 각도로 틀어져 있는 상태로 슬립의 진행은 전단방향과 일정한 각도를 이루고 진행한다. 사중 슬립은 비교적 슬립면과 방향이 잘 관찰되는 슬립모델이다. 슬립면과 방향이 모두 45° 을 이루고 진행하게 되며 슬립의 시작은 응력이 집중되는 양쪽 모서리 부분부터 시작하는 것을 볼 수 있었다. 팔중슬립은 모델의 8군데의 모서리에서 슬립이 동시에 발생한다. 이렇게 진행된 슬립은 모델의 중앙에서 슬립시스템끼리의 충돌로 인해 모델 내부에서 높은 응력을 발생시킨다. Fig. 8에서 볼 수 있듯이 항복응력은 시스템 안에 슬립시스템이 많을수록 높아지는 것을 알 수 있었다. 응력과 변형률 선도에서 응력의 최대값은 슬립시스템이 많은 모델일수록 높은 것을 알 수 있었다.

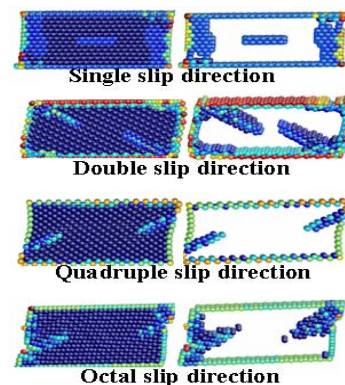


Fig. 7 Contour plots of central symmetry parameter on slip models (shear)

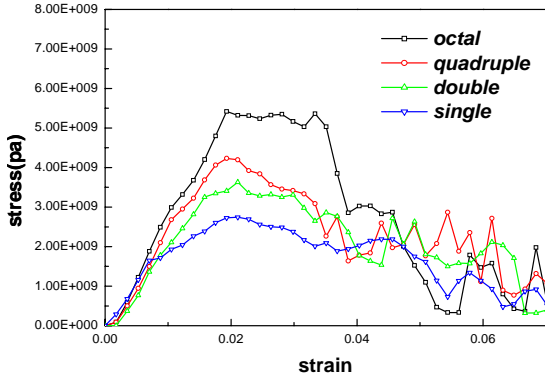


Fig. 8 Stress-strain curve for slip models (shear)

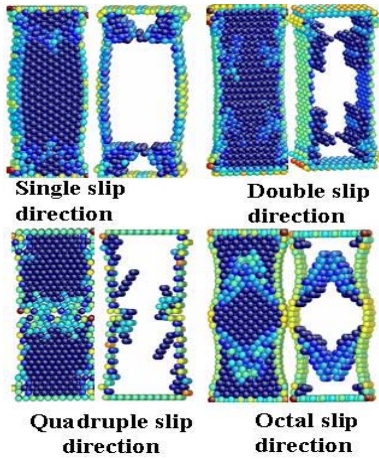


Fig. 9 Contour plots of central symmetry parameter on slip models

4.3 결정방향효과의 해석결과 (단순인장)

Fig. 9에서 알 수 있듯이 단순인장의 경우 단순 전단의 경우와 동일한 경향을 보이고 있다. 항복 응력과 응력 변형률의 특성이 결정방향 의존적인 것을 알 수 있었다. 단일슬립의 경우 경계층 원자들의 구속조건의 영향으로 경계층 원자 직하에서 잘록한(necking)변형을 발생하였다. 단일슬립 모델의 응력은 네 가지 모델 중에서 가장 낮았다. 이중슬립 모델의 경우에는 시험편의 우측과 좌측으로 변갈아 가면서 슬립이 방출 되면서 지그재그(zig-zag)의 형태를 이루고 있다. 팔중슬립은 네 가지 모델에서 가장 높은 항복응력을 나타내었다. 또한 변형을 할 때 시험편의 중앙에서부터 전위가 발생하여서 시험편의 중앙이 잘록해지는 현상이 발생한다. 중앙에서 시작된 전위는 그 모양이 파단 시에 컵과 콘(cup and cone)의 형태

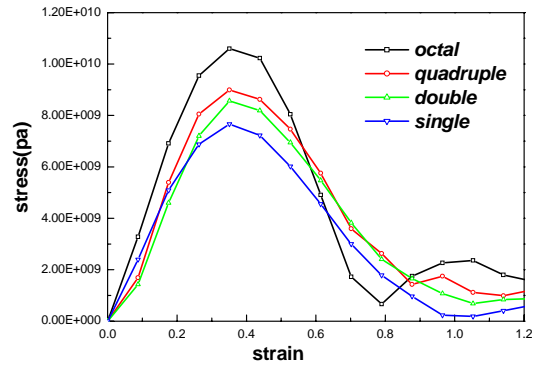


Fig. 10 Stress-strain curve for slip models

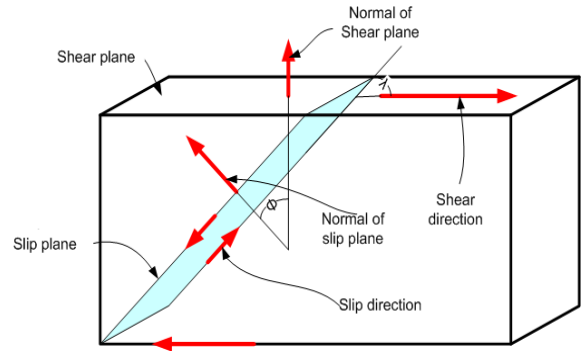


Fig. 11 The relationship between slip system and external stress

를 만들 수 있게 진행된다. 반면 사중슬립의 경우에는 동일한 45° 각도를 이루면서 슬립면이 형성되고 진행되기를 반복하면서 시험편의 두께가 점점 줄어들게 된다. 따라서 사중슬립의 모델이 같은 힘에 대해서 연신율이 가장 큰 모델일 것이다. 위의 내용들로부터 항복응력과 최대응력은 시스템 안에 슬립시스템이 많은 모델일수록 높은 것을 알 수 있었다.

4.4 임의의 결정방향에 따른 항복응력 평가

본 연구에서 사용된 모델은 네 가지로 국한 되어있지만 실제의 모델에서는 무수히 많은 임의의 슬립 시스템이 존재할 수 있다. 하지만 모든 모델을 만들어서 항복응력을 비교하는 것은 쉬운 일이 아니다. 따라서 본 연구에서는 결정학(crystallography)에서 많이 사용되는 극사영(stereographic projection)⁽¹⁰⁾ 방법을 사용해서 임의의 방향에서의 항복응력을 평가하였다. 표준삼각형(standard triangle)을 정의하고 모든 삼각형에서 표현되는 결정방향을 표준삼각형만으로 나타내어

모든 방향에 대한 항복 응력값을 예측하였다. 항복응력을 평가하기 위해서 표준삼각형에서 결정방향에 따른 Schmid factor(SF)를 정의한다. SF는 슬립시스템과 외부에서 부과 되는 응력의 관계를 정량적으로 정의 해준다.

$$SF = \cos \phi \cos \lambda \quad 0 \leq SF \leq 1 \quad (8)$$

위식에서 ϕ 는 Fig. 11처럼 슬립면의 수직방향과 작용응력 방향 사이의 각이고 λ 는 작용응력과 슬립방향 사이의 각을 말한다. 분해전단응력($\tau_R = \sigma \cos \phi \cos \lambda$)은 어느 특정한 응력의 크기를 넘어서면 슬립이 발생하는데 이때의 분해전단응력을 임계 분해 전단응력(critical resolved shear stress)라 한다. 그리고 시스템 안에서 다음과 같은 식으로 구해진다.

$$\tau_{crss} = \sigma (\cos \phi \cos \lambda)_{\max}, \tau_{crss} = \tau_R(\max) \quad (9)$$

여기서 임계 분해 전단응력은 슬립을 일으키는 최소 전단응력으로 항복이 일어날 때를 결정하는 재료의 성질이다. 임계 분해 전단응력과 항복응력(σ_y)의 관계는 다음과 같다.

$$\sigma_y = \frac{\tau_{crss}}{(\cos \phi \cos \lambda)_{\max}} \quad (10)$$

단일 슬립의 모델은 이론적인 SF가 1이 된다. 따라서 단일 슬립의 모델에서는 항복응력(σ_y)과 임계 분해 전단응력(τ_{crss})가 같아진다. 본 연구에서 단일 슬립의 모델에서 분자동역학 전산해석을 통해 얻어진 결과를 재료의 임계 분해 전단응력으로 정하고 네 가지의 슬립 모델의 이론적인 SF와 해석적인 SF를 극사영 표준삼각형에 Fig. 12와 Fig. 13같이 나타내었다. 단일 슬립 모델에서 얻은 항복응력을 임계 분해 전단응력으로 놓고 앞에서 언급한 식 (10)에 의해 계산하여 얻어진 항복응력을 Fig. 14와 Fig. 15와같이 나타내었다. 두 개의 결과는 절대적인 값에는 다소 차이가 있었지만 경향이 유사한 것을 알 수가 있다.

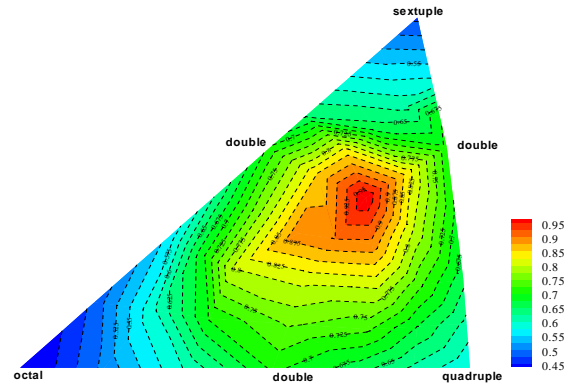


Fig. 12 Contour plots of theoretical Schmid factors

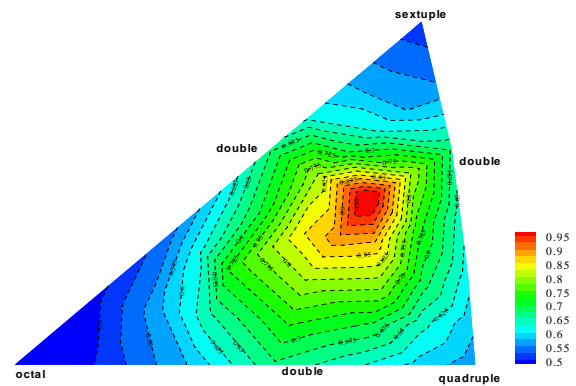


Fig. 13 Contour plots of numerical Schmid factors

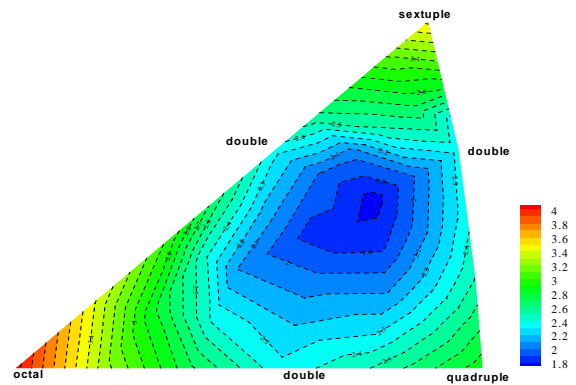


Fig. 14 Contour plots of theoretical yield stresses

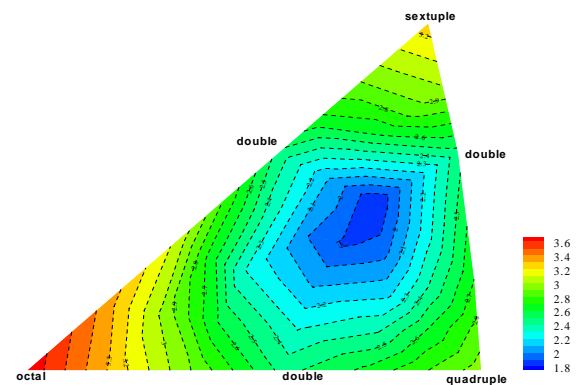


Fig. 15 Contour plots of numerical yield stresses

위와 같은 해석 결과에서 이론적으로 계산된 값에는 정해진 슬립면만을 고려해서 SF를 계산했지만 실제로 해석을 하게 되면 이론적인 슬립면 이외에도 다른 슬립이 동시에 발생해서 항복응력 값에 오차를 주기 때문이다.

5. 결 론

결정구조를 가지고 있는 구리(Cu)에 분자동역학 전산해석으로 단순전단과 단순인장을 해석하였다. 해석을 통해서 얻어진 응력과 변형률의 관계를 시험편의 사이즈와 모델의 결정방향에 따라 비교하였으며 임의의 방향에 따른 항복응력의 분포를 나타냄으로서 항복응력을 예측하였다.

표면의 원자 수가 내부의 원자 수에 비하여 상대적으로 많은 모델은 표면효과가 지배적이 되어 모델이 작을수록 항복응력과 최대응력이 높은 것을 알 수 있었다. 또한 슬립시스템이 많은 모델일수록 항복응력과 최대응력이 높게 평가되었다. 단결정 재료의 응력과 변형률 관계는 결정의 방향과 시험편의 사이즈에 의존적임을 알 수 있었다. 본 연구에서는 또한 임의의 결정방향에서의 항복응력을 예측하기 위해서 이론적인 Schmid factor(SF)를 모델에 따라 계산하였는데 슬립시스템이 많은 모델부터 octal, sextuple, quadruple, double 그리고 single의 순으로 항복응력이 크게 나타났다.

참고문헌

- (1) Fleck, N.A, Muller, G.M., Ashby, F.M. and Hutchinson, J.W., 1994, "Strain Gradient Plasticity: Theory and Experiment," *Acta Materialia*, Vol. 42, pp. 475~487.
- (2) Schmid, E. and Boas, W., 1935, "Crystalplasticity," Springer Verlag, Berlin.
- (3) Daw, M.S. and Baskes, M.I., 1984, "Embedded-atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals," *Physics Review B*, Vol. 29, pp. 6443~6453.
- (4) Mishin, Y., Mehl, M.J., Papaconstantopoulos, D.A., Voter, A.F. and Kress, J.D., 2001, "Structural Stability and Lattice Defects in Copper: ab Initio, Tight-Binding, and Embedded-Atom Calculations," *Physics Review B*, Vol. 63, pp. 1~16.
- (5) Guo, Y., Zhuang, Z., Li, X.Y. and Chen, Z., 2007, "An Investigation of the Combined Size and Rate Effects on the Mechanical Responses of FCC Metals," *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 44, pp. 1180~1195.
- (6) Horstemeyer, M.F. and Baskes, M.I., 2000, "A Large Deformation Atomistic Study Examining Crystal Orientation Effects on the Stress-Strain Relationship," *International Journal of Plasticity*, Vol. 18, pp. 203~229.
- (7) Horstemeyer, M.F. and Baskes, M.I., 1999, "Atomistic Finite Deformation Simulations: a Discussion on Length Scale Effects in Relation to Mechanical Stresses," *Journal of Applied Mechanics ASME*, Vol. 121, pp. 114~119.
- (8) Horstemeyer, M.F., Baskes, M.I. and Plimpton, S.J., 2001, "Length Scale and Time Scale Effects on the Plastic Flow of FCC Metals," *Acta Materialia*, Vol. 49, pp. 43~63.
- (9) Horstemeyer, M.F., Lim, J., Liu, W.Y., Mosher, D.A., Baskes, M.I., Prantil, V.C. and Plimpton, S.J., 2002, "Torsion/simple Shear of Single Crystal Copper," *Journal of Engineering Material Technology*, Vol. 124, pp. 322~328.
- (10) Borchardt-Ott, W., 1993, "Crystallography," Springer Verlag, New York.
- (11) Frenkel, D. and Smit B., 2002, "Molecular Simulation," Academic Press, San Diego.