

α -티타늄 평판표면에서 강체 구형팁의 스크래치로 인한 내부 결정구조 특성 변화에 대한 연구

정예리^{1*} · 김진호^{1*} · 이태일^{2†}

¹경남대학교 기계공학부 스마트기계융합공학전공 학부생

²경남대학교 기계공학부 부교수

A Study on Crystalline Structural Variations of the Rigid Spherical-Tip scratch on the Surface of α -Titanium substrates via Molecular Dynamics Simulations

Yeri Jung^{1*}, Jin Ho Kim^{1*} and Taeil Yi^{2†}

¹Undergraduate Student, Smart Mechanical Convergence Engineering, School of Mechanical Engineering, Kyungnam University

²Associate Professor, School of Mechanical Engineering, Kyungnam University

(Received September 22, 2023; Revised October 5, 2023; Accepted October 10, 2023)

Abstract – Titanium alloys are widely recognized among engineering materials owing to their impressive mechanical properties, including high strength-to-weight ratios, fracture toughness, resistance to fatigue, and corrosion resistance. Consequently, applications involving titanium alloys are more susceptible to damage from unforeseen events, such as scratches. Nevertheless, the impact of microscopic damage remains an area that requires further investigation. This study delves into the microscopic wear behavior of α -titanium crystal structures when subjected to linear scratch-induced damage conditions, utilizing molecular dynamics simulations as the primary methodology. The configuration of crystal lattice structures plays a crucial role in influencing material properties such as slip, which pertains to the movement of dislocations within the crystal structure. The molecular dynamics technique surpasses the constraints of observing microscopic phenomena over brief intervals, such as sub-nano- or pico-second intervals. First, we demonstrate the localized transformation of lattice structures at the end of initialization, indentation, and wear processes. In addition, we obtain the exerted force on a rigid sphere during scratching under linear movement. Furthermore, we investigate the effect of the relaxation period between indentation and scratch deformation. Finally, we conduct a comparison study of nanoindentation between crystal and amorphous Ti substrates. Thus, this study reveals the underlying physics of the microscopic transformation of the α -titanium crystal structure under wear-like accidental events.



© Korean Tribology Society 2023. This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License(CC BY, <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction of the work in any medium, provided the original authors and source are properly cited.

Keywords – Linear scratch wear(선형 스크래치 마모), Molecular dynamics(분자동역학), Nanoindentation(나노압입), Structural transformation(구조적 변환), Relaxation time effect(이완시간효과)

*Equally contributed authors: Yeri Jung, Jin Ho Kim

†Corresponding author: Taeil Yi

Tel: +82-55-249-2227, Fax.: +82-505-990-2160

E-mail: yti0811@kyungnam.ac.kr

<https://orcid.org/0000-0001-8743-0772>

Nomenclature

E : Total potential energy (총 퍼텐셜 에너지)

F : Embedding function (임베딩 함수)

- S : Screening function (가림막 함수)
 ϕ : Pair interaction between atoms (원자쌍 상호작용)
 r : Distance between atoms (원자간 거리)
 d : Indentation depth (압입깊이)
 f_{ind} : Force exerted by the indenter
 (압입기에 작용하는 힘)
 R : Radius of a spherical indenter
 (구형 압입기의 반지름)
 K : Specified force constant (지정 힘 상수)
 τ_R : Relaxation time (이완시간)
 H : Heaviside function (단위 계단 함수)

1. 서 론

티타늄 합금은 중량대비 높은 강도를 가지고 있으며 특히 피로 및 파괴에 대하여 높은 저항도를 가지고 있고 부식 등에 강하여 고성능 경량 부품이 요구되는 우주 항공 시스템 및 국방무기 체계 등에서 활발하게 사용되는 공업용 금속합금 소재 중 하나이다[1-2]. 다만 제품제작을 위한 가공공정의 난이도 및 소재자체의 가격이 다른 금속소재들에 비하여 높은 편으로 특수한 목적을 위한 제품군에 주로 사용되고 있다[3].

최근 티타늄합금 소재활용에 있어서 극복할 요소로 알려진 제작공정의 난이도와 가공 중 발생하는 소재의 낭비를 줄일 수 있는 공정으로 금속적층제조 공법이 각광을 받고 있다[4-5]. 적층제조를 위한 다양한 기법들 중에서 Powder Bed Fusion (PBF) 및 Selected Laser Melt (SLM) 기법은 Direct Energy Deposit (DED)기법과 더불어 잘 알려진 금속적층제조 공법 중 하나이다. 위에 기술된 기법을 기반으로 하는 3D프린터의 경우 CAD로 제작된 도면을 바탕으로 직경이 수십 마이크로미터에서 수백 마이크로미터에 달하는 크기의 금속 또는 폴리머 소재의 분말들이 담겨있는 통의 표면에 레이저 또는 전자빔을 조사하여 용융 및 소결된 입자층들을 쌓아 올려서 제품을 제작할 수 있으며 EOS, 3D systems 등의 기업들을 필두로 국내에서는 대건테크 등에서 장비를 제작하고 있다[6-9]. 금속적층제조 공법을 활용한 티타늄 소재 가공은 버려지는 티타늄 소재를 최소화하여 기존의 절삭공정 대비 비용을 절감할 수 있으며 공정 시간을 줄일 수 있으며 특히 제품의 성능최적화를 위한 형상에 대한 높은 자유도로 인하여 또한 절삭공정 대비 경량화 설계가 자유로우며 이로 인한 에너지절감도 가능 하여 최근 이슈가 되고있는 친환경 공법으로도 관심이 집중되고 있다[5].

Table 1. Dimensions of the titanium substrate and periodic simulation cell box

Dimensions	Substrate	Simulation Cell
Width (x) [Å]	150.7	150.7
Length (y) [Å]	261.2	261.2
Height (z) [Å]	102	240.9

적층제조를 통한 가공은 금속분말들에 고에너지 를 조사하여 제품을 제작하는 방식이므로 반드시 부분적인 상 변화가 발생이 되어 이로 인한 소재 의 금속결정조직이 변화하고 마모 등에 대한 특성 이 변화하게 된다. 그러나 실험적 접근법은 미세 금속조직 및 물성치에 대한 연구에 한계가 있다. 이를 극복하기 위하여 많은 연구 자들이 전산해석 기법을 개발하고 사용하고 있으며, 특히 미시적인 특성분석을 위해 다양한 분야에서 분자동역학 이 많은 영역에서 활용되고 있다[10,18].

본 연구에서는 분자동역학 기법을 활용하여 α -티타늄 합금에 대한 금속조직의 마모특성을 선형스크래치를 통하여 구현하고 마모가 발생하는 영역에서의 결정구조 변화를 분석하고자 한다. 첫 번째로 스크래치 발생을 위하여 일정 깊이까지 압입 (indentation)을 진행하며 변형표면 주변 에서의 결정구조변화의 추이를 관찰한다. 이후 동일한 깊이를 유지하며 일정속도로 평면위를 이동하는 동안 발생할 때의 결정구조 변화 및 받는 힘, 그리고 마모과정 중 발생하는 버 (bur) 내부에서의 결정 특성변화를 알아보고자 한다. 특히 압입 후 일정시간 유예시간을 줄 경우 스크래치를 진행할 때 주는 상관관계에 대한 결과도 기술하였다. 마지막으로 적층제조 시 발생할 수 있는 상변화로 인한 특성을 나타내기 위하여 결정샘플의 표면의 일부를 녹는점 이상으로 가열 후 냉각하여 결정 특성을 잃어버린 상태에서 원자 구조를 기반으로 하는 평판샘플에 대하여 스크래치 테스트를 진행할 때 동일한 스크래치 과정에서 필요한 힘의 변화 추이를 비교 분석하였다.

2. 연구방법 및 내용

2-1. α -티타늄 결정 구조 및 해석 시스템 규격

일반적으로 많이 사용되는 티타늄합금인 Ti6Al4V는 α -티타늄과 β -티타늄 결정구조로 이루어져 있으나, 본 연구에서는 두 결정구조 중 α -티타늄 결정구조를 모사하여 연구를 진행하였다. α -티타늄은 HCP결정구조를 가지며 β -티타늄 및 $\alpha+\beta$ -티타늄 합금보다 상온 강도가 낮으나 저온 안정상이므로 수백도의 고온환경에서도 기계적

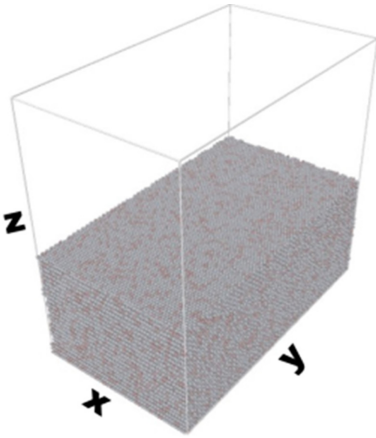


Fig. 1. Snapshot of α-titanium crystal substrates. x, y, and z represent width, length, and height.

으로 높은 성능을 유지하므로 내열합금으로 많이 사용되고 있다. 본 연구에서는 티타늄결정 내에 고온 안정화를 위한 첨가원소로 Al만을 6%정도 첨가하여 합금평판을 제작하였다[11].

Fig. 1은 시뮬레이션에서 사용된 시스템에 대한 3차원 α-티타늄 평판샘플과 전체경계주기조건이 적용된 시뮬레이션 셀을 보여주고 있다. 회색실선은 시뮬레이션 셀의 각 모서리들을 나타내고 있다. Ti와 Al은 각각 회색과 분홍색 구슬로 표현되어 있다. 결정구조는 HCP (Hexagonal Close-Packed)이며 첨가된 Al 원자들은 기존의 Ti원자들 중 wt%에 맞추어 random하게 치환하여 평판구조물을 제작하였다. 사용된 Ti와 Al원자 수는 각각 192296개와 51064개이다. 준비된 평판은 시뮬레이션 셀의 바닥부분에 위치하며 크기는 Table 1에 기술되어 있다. 시뮬레이션 셀은 모든 방향에 대하여 주기조건이 적용되어 있다.

여기에 내용을 입력한다.

연구의 계획, 자료수집, 실험, 분석, 해석, 출판, 결과 활용 등 연구 개발의 전 과정과 관련하여 연구자에게 이해갈등(Conflict of Interest)이 발생하거나 발생할 가능성이 있는 연구에는, 연구자는 스스로 이해갈등을 관리하여 연구의 공정성과 연구대상자의 안전 및 학문 연구에 대한 사회적 신뢰의 손상을 방지하여야 한다.

2-2. 분자동역학 시뮬레이션 방법

2-2-1. 포텐셜 모델

α-티타늄합금에 대한 분자동역학을 진행하기 위하여 The Second Nearest Neighbor Modified Embedded Atom Method (2NN MEAM)를 사용하였다[12]. 2NN

MEAM 포텐셜은 LAMMPS에서 제공하는 포텐셜 모델 중 하나로 금속소재에서 좋은 결과를 보여주고 있는 EAM 포텐셜에 결합에 있어서의 방향성과 이방성 특성을 모사할 수 있도록 기존의 EAM 모델에 각도에 대한 기여도가 포함되도록 확장한 모델인 MEAM 포텐셜 모델에서 구조적 안정성을 획득하고자 개선된 모델이다[13]. 2NN MEAM포텐셜의 수학적 표현식은 다음과 같다.

$$E = \sum_i [F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} S_{ij} \phi_{ij}(r_{ij})], \quad (1)$$

여기서 i 와 j 는 원자들의 id를 나타낸다. 그리고, α-티타늄내 티타늄과 알루미늄에 대한 포텐셜 파라미터들의 값은 Kim et.al. (2016)을 참조하였다[14].

2-2-2. 초기화 및 시나리오별 시뮬레이션 과정

분자동역학 시뮬레이션은 Sandia National Lab에서 개발 및 배포된 Large-scale Atomic /Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)를 사용하였으며, 시각화 및 후처리 계산의 일부는 OVITO를 사용하여 나타내었다[15,16]. LAMMPS 에서 원자들의 운동은 초기 평형 상태의 형상은 300K인 NVT ensemble과 다시 1기압 300K인 NPT ensemble 조건으로 각각 25 ps동안 시뮬레이션을 진행하였다. 이때 스텝당 시간 간격은 1 fs로 지정하였다. 이후 압입 및 스크래치에 의한 마모 시뮬레이션을 진행하기 위하여 추가적으로 NVE ensemble과 강체바닥의 위에서부터 3 nm영역에 Langevin thermostat을 적용하여 300K의 온도가 유지될 수 있도록 100 ps 동안 추가 시뮬레이션을 진행하였다. 압입 및 마모의 경우 3 nm의 반지름을 가지는 강체 구형팁을 이용하여 진행하였다. 이때, 압입 및 스크래치 작업을 위한 압입구의 속도는 보편적인 질삭가공에서의 팁의 속도보다 빠른 50 m/s로 고정하여 해석을 진행하였다.

3. 결과 및 고찰

3-1. 압입(Indentation) 시뮬레이션 결과

나노압입 (Nanoindentation) 시험은 재료의 기계적 특성을 나노규모의 압입시험을 통하여 측정하는 평가방법이다. 보편적으로 소재 대비 높은 경도의 팁을 사용하여 재료 표면에 수직으로 힘을 가하여 발생하는 압입형상의 깊이에 따라 변하는 힘을 측정하여 경도, 탄성계수 등의 특성을 확인할 수 있다[17].

첫 번째 과정은 구형 (spherical shape) 팁을 사용한 나노 압입시험의 일환으로 스크래치를 발생시키기 위하

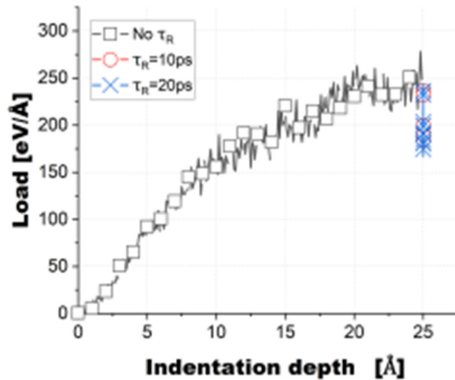


Fig. 2. Load vs indentation depth of the nano-indentation simulations for no relaxation time (black square symbol, $\tau_R = 0$), $\tau_R = 10$ ps (red circle symbol), and $\tau_R = 20$ ps (blue cross symbol).

여 α -티타늄 평판 표면으로부터 침투시켰다. 이때, 구형 팁과 임의의 원자 사이의 거리가 r 이라고 할 때 작용하는 힘은 다음의 수식에 따라 계산되었다.

$$f_{ind} = -K(r - R)\{1 - H(r - R)\}. \quad (2)$$

구형 강체 팁에 작용하는 하중은 Eqn. (2)로 계산된 중심점과 주변의 원자들 사이에 작용하는 힘을 합쳐 팁의 이동방향을 기준으로 계산하였다.

Fig. 2는 강체 팁이 구형 형상인 나노압입 시뮬레이션 중 압입과정에서의 압입기가 50 m/s의 일정한 속도로 α -티타늄 합금 평판의 표면으로부터 25 Å 깊이까지 침투하는 동안 압입깊에 따른 수직 하중의 변화를 나타내고 있다. 또한 이완시간(τ_R) 효과를 확인하기 위하여 10 ps 와 20 ps의 이완시간 동안 압입기를 멈춘 상태에서 받는 하중의 변화를 함께 나타내고 있다. 그림에서 보이는 바와 같이 깊이가 깊어짐에 따라 하중의 크기가 증가하나 약 10 nm 깊이 이상 깊어지면서 압입 깊이에 따른 하중의 변화가 작아지는 것을 확인할 수 있었다. 이는 초기 압입과정에서 일부 주변 이웃 원자들의 결정구조가 HCP에서 FCC로 변화하기 시작하며 slip과 압축에 대한 저항이 낮아졌기 때문으로 예측된다. 또한 τ_R 의 증가로 인한 수직하중 값의 변화에서 주변원자들의 결정구조변화는 가속화 및 고착화하는 효과를 보여주고 있음을 확인할 수 있었다.

Table 2는 압입이전과 비교하여 이완시간에 따른 결정구조의 변화에 대한 비율을 OVITO의 내부 기능을 활용하여 계산한 결과를 보여주고 있다. 압입이 진행되면서

Table 2. Fraction of types of crystal structures by the effect of relaxation time (τ_R) at maximum indentation depth

Crystal type	Reference (No indentation)	Relaxation time (τ_R)		
		0 ps	10 ps	20 ps
HCP	95.6%	94.2%	94.2%	94.3%
FCC	0%	0.8%	0.7%	0.7%
BCC	0%	0.5%	0.5%	0.4%
Others	4.4%	4.6%	4.6%	4.6%

기존의 HCP구조에서 일부 FCC와 BCC구조로 변환이 진행된 것을 확인할 수 있다. 특히 FCC로의 변환이 BCC에 비하여 상대적으로 더 많이 이루어 졌다. 이는 HCP와 FCC 모두 높은 원자충진율을 가지는 구조이며, 특히 높은 압력 하에서는 FCC구조가 에너지적 관점에서 보다 안정적으로 구조를 유지할 수 있기 때문에 추정된다. 이후 최대 깊이에 도달한 이후에 이완시간이 주어질 경우 내부적으로 원자들이 재배치를 이루며 일부 FCC나 BCC로 변환되었던 원자배치가 HCP구조로 회복되는 현상도 관측되었다.

3-2. 스크래치(Scratch) 시뮬레이션 결과

스크래치 시뮬레이션은 표면으로부터 25Å의 깊이로 압입이 진행된 구형 팁을 표면에서 수평방향 중 y 축 방향으로 50 m/s의 속도로 이동시키면서 이동거리와 팁에 작용하는 이동방향으로의 힘의 크기와의 관계에 대하여 진행하였다.

Fig. 3은 이완시간에 따라 팁의 이동변위에 대한 팁의 이동방향에 대한 힘의 변화를 나타내고 있다. 이완시간

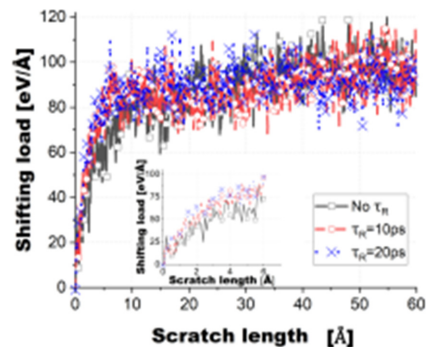


Fig. 3. Shifting load vs Scratch length of the scratch wear simulations for no relaxation time (black square symbol, $\tau_R = 0$ ps), $\tau_R = 10$ ps (red circle symbol), and $\tau_R = 20$ ps (blue cross symbol). A subplot reproduces the shifting load – scratch length profile of the early stage where scratch length is less than 6 Å.

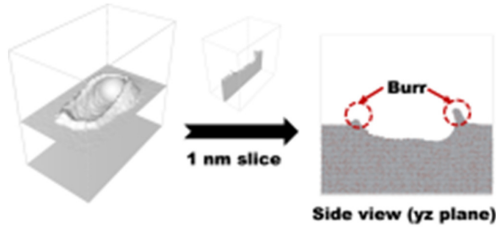


Fig. 4. Snapshot of the burr generation at the end of the scratch wear simulation time.

의 영향은 압입 후 스크래치를 시작하는 초기구간에서만 일부 유의미한 차이가 발견되며 일정거리 이상 이동한 이후에는 차이가 거의 없었다. 초기구간에서의 변화는 Fig. 3의 내부에 삽입된 그림을 통하여 이동거리를 60 Å까지만 진행한 결과로 나타내었다. 초기구간내에서의 변화율 비교를 위하여 평균 하중의 크기를 비교한 결과 τ_R 이 0 ps에서 10 ps, 20 ps로 증가함에 따라 각각 45.93 eV/Å, 7.82 eV/Å, 61.05 eV/Å가 나왔다. 이는 이완시간에 의한 결정구조의 변화가 유효한 영역에서는 스크래치에 필요한 하중에 직접적인 영향을 주는 것을 보여주고 있다.

Fig. 4는 스크래치 발생에 따른 버의 발생을 보여주고 있다. 특히 측면부는 변형이 가장 심하게 발생하는 중간부분을 10 Å로 나누어 단면을 보여주고 있다. 그림에서 보여주는 바와 같이 버는 진행방향에 대하여 더 크게 만들어 지는 것을 확인할 수 있었다. 또한 스크래치가 진행됨에 따라 일부 압입이 되었던 부분이 회복되어 압입구가 최종적으로 이동한 위치에서의 깊이와 시작점의 깊이의 차이가 발생함도 확인할 수 있었다.

3-3. 결정구조 특성에 따른 나노압입시험 비교

마지막으로 HCP결정구조인 α-티타늄 합금 평판과 녹는점에서 일정시간 이상 유지되며 비정질 티타늄 합금 표면을 가지게 된 평판에 압입 시뮬레이션을 진행하며 압입기에 가해지는 하중과 압입 깊이에 대한 결과를 비교하였다. 비정질 평판의 형상은 평판의 온도를 티타늄의 녹는점보다 약간 높은 상태에서 50 ps 유지한 뒤 온도를 300 K으로 낮추어 제작하였다. Fig. 5의 위쪽 그림은 결정 및 비정질 표면을 가지는 평판에 대한 나노압입 실험의 결과를 보여주고 있으며 아래의 두 그림은 사용된 평판표면에서의 원자들의 배치를 나타내고 있다. 그림에서 나타난 바와 같이 그림에서 보여준 바와 같이 열처리를 거친 비정질 표면을 가진 평판이 높은 깊이대비 하중비의 값을 가지고 있다. 이와 같은 차이가 발생하는 원

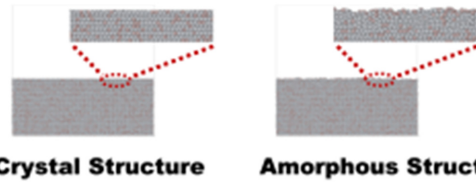
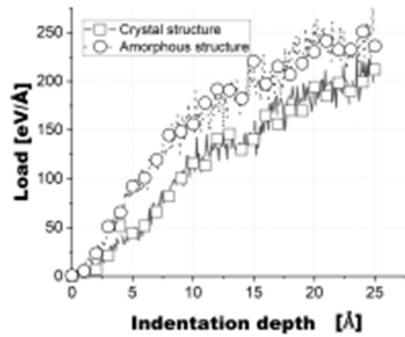


Fig. 5. Load-indentation profiles for the crystal structure and amorphous structure under indentation process.

인으로 표면 조도, 원자간 결합구조 및 밀도의 변화 등을 고려할 수 있으며 이와 관련된 연구는 후속연구로 진행하도록 할 예정이다. 본 결과를 바탕으로 열처리가 된 α-티타늄 합금의 경도가 기존 대비 강화가 되는 것을 유추할 수 있다.

4. 결 론

본 연구는 α-티타늄합금으로 제작된 평판 표면에 물리적으로 표면에 스크래치를 통한 마모를 받게 될 경우 발생하는 내부결정구조의 변화를 분자동역학을 사용하여 보여주고 있다. 다음은 본 연구를 통하여 얻은 결론들을 요약한 내용이다.

나노압입 및 스크래치 마모 시뮬레이션을 통하여 α-티타늄합금 평판 내부에서 손상구간 주변에서 결정구조가 일부 HPC구조에서 FCC 및 BCC구조로 변화한 것을 관측할 수 있었다.

압입 후 이완시간에 비례하여 평판 내부 응력이 낮아지며 일부 FCC 및 BCC로 변화가 발생했던 원자들이 HCP로 회복되는 것을 확인할 수 있었다. 이와 같은 구조의 변화는 외력의 변화에 따라 가장 안정적인 구조로의 변화가 발생하는 것으로 이해될 수 있다.

압입기에 의해 발생한 스크래치로 평판 표면에서 손실된 영역은 버(burr)로 변환되어 손상을 입은 영역둘레에 위치하게 된다.

높은 온도에 의하여 비정질 구조로 바뀐 α-티타늄 평

판의 경우 압입시 하중 값이 기존의 결정구조를 가진 평판에 비하여 높아짐을 확인할 수 있었다. 이는 에너지 조사로 인한 소재 강화 기법의 토대가 될 것으로 기대할 수 있다.

본 연구의 결과가 스크래치와 같은 티타늄 합금 표면 손상에 대하여 구조적 변화 및 물성의 변화를 이해할 수 있는 토대를 제공할 것으로 기대한다.

Acknowledgements

이 논문은 국방기술품질원의 방산혁신클러스터 지원사업(DCL2020L)의 지원을 받아 수행된 연구입니다.

References

- [1] Gurrappa, I. J. M. C. “Characterization of titanium alloy Ti-6Al-4V for chemical, marine and industrial applications.”, *Mater Charact.*, Vol.51. Issue.2-3 pp.131-139, 2003.
- [2] Balazic, M., Kopac, J., Jackson, M. J., Ahmed, W., “Titanium and titanium alloy applications in medicine”, *Int. J. Nano Biomater.*, Vol.1, No.1, pp.3-34, 2007.
- [3] Veiga, C., Davim, J. P., Loureiro, A. J. R., “Properties and applications of titanium alloys: a brief review”, *Rev. Adv. Mater. Sci.*, Vol.32, No.2, pp.133-148, 2012.
- [4] Lin, Z., Song, K., Yu, X., “A review on wire and arc additive manufacturing of titanium alloy”, *J. Manuf. Process.*, Vol.70, pp.24-45, 2021.
- [5] Dutta, B., & Froes, F. S., “The additive manufacturing (AM) of titanium alloys”, *Met. Powder Rep.*, Vol.72, No.2, pp.96-106, 2017.
- [6] Frazier, W. E., “Metal additive manufacturing: a review”, *J. Mater. Eng.*, Vol.23, pp.1917-1928, 2014.
- [7] Li, N., Huang, S., Zhang, G., Qin, R., Liu, W., Xiong, H., & Blackburn, J., “Progress in additive manufacturing on new materials: A review”, *J Mater Sci Technol.*, Vol.35, No.2, pp.242-269, 2019.
- [8] Yi, T., “A study of conformational variation of temperature-dependent PEEK molecular structures subject to stretching speeds by molecular dynamics simulations”, *J. Mech. Sci. Technol.*, Vol.36, No.8, pp.4143-4151, 2022.
- [9] Ngo, T. D., Kashani, A., Imbalzano, G., Nguyen, K. T., & Hui, D., “Additive manufacturing (3D printing): A review of materials, methods, applications and challenges”, *Compos. B. Eng.*, Vol.143, pp.172-196, 2018.
- [10] Singh, P., Singari, R. M., & Mishra, R. S., “A review of study on modeling and simulation of additive manufacturing processes”, *Mater. Today*, Vol.56, pp.3594-3603, 2022.
- [11] Beladi, H., Chao, Q., & Rohrer, G. S., “Variant selection and intervariant crystallographic planes distribution in martensite in a Ti-6Al-4V alloy”, *Acta Materialia*, Vol.80, pp.478-489, 2014.
- [12] Lee, B. J., & Baskes, M. I., “Second nearest-neighbor modified embedded-atom-method potential”, *Phys. Rev. B*, Vol.62, No.13, 8564, 2000.
- [13] Cherne, F. J., Baskes, M. I., & Deymier, P. A., “Properties of liquid nickel: A critical comparison of EAM and MEAM calculations”, *Phys. Rev. B*, Vol.65, No.2, 024209, 2001.
- [14] Kim, Y. K., Kim, H. K., Jung, W. S., & Lee, B. J., “Atomistic modeling of the Ti-Al binary system”, *Comput. Mater. Sci.*, Vol.119, pp.1-8., 2016.
- [15] Thompson, A. P., Aktulga, H. M., Berger, R., Bolintineanu, D. S., Brown, W. M., Crozier, P. S., ... & Plimpton, S. J. “LAMMPS-a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales”, *Comput Phys Commun.*, Vol.271, 108171, 2022.
- [16] Stukowski, A., “Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool”, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol.18, 015012, 2010.
- [17] Kim, C.-L., Kim, H. J. “Modification of Thin Film Friction and Wear Models with Effective Hardness”, *Tribol. Lubr.*, Vol.36, No.6, pp.320-323, 2020, <https://doi.org/10.9725/kts.2020.36.6.320>
- [18] Kang, W. B., & Kim, H. J., “Study on Influence of Spring Constant on Frictional Behavior at the Nanoscale through Molecular Dynamics Simulation”, *Tribol. Lubr.*, Vol.37, No.2, pp.77-80, 2021, <https://doi.org/10.9725/kts.2021.37.2.77>