

나노 인덴테이션에 의한 나노재료의 경도예측 (1)

나노 인덴테이션에서 압자 및 재료의 나노거동

김 진* · 박준원* · 김영석** · 이승섭***

Nano-behavior of material beneath an indenter in nanoindentation

J. Kim, J.W. Park, Y.S. Kim and S.S. Lee

Abstract

Nanoindentation is simply an indentation test in which the length scale of the penetration is measured in nanometres rather than microns or millimetres, the latter being common in conventional hardness tests. Three-dimensional molecular dynamics simulations have been conducted to evaluate the nanoindentation test. Molecular dynamics simulations were carried out on single crystal copper by varying crystal orientations to investigate nano-behavior of material beneath an indenter in nanoindentation. Morse potential function was used as an interatomic force between indenter and thin film. The result of the simulation shows that crystal orientation significantly influenced the slip system, dislocation nucleation and dislocation behavior.

Key Words : Nanoindentation, Molecular Dynamics Simulation, Morse Potential, Crystal Orientation, Dislocation, Slip System

1. 서 론

산업 수준의 향상으로 의료, 반도체, 전자, 정보통신, 우주항공 등의 분야에서 마이크로 단위의 소형화, 다기능화된 초 미세 부품에 대한 요구가 증가되고 있다. 이러한 초 미세 부품들이 성공적으로 개발되고 상용화되기 위해서는 일정 기준 이상의 기계적 특성을 만족함으로써 신뢰성을 보장 받아야한다. 그러나 이러한 초 미세 부품들을 구성하는 재료의 기계적 특성은 이들 부품이 구조적으로 크기가 매우 미소하여 일반적인 일축 인장시험

등의 적용이 불가능하고, 국소 부위에 특성변화가 존재하는 경우가 많기 때문에 일반적인 벌크재료의 특성으로부터는 예측하기가 어렵다.

이러한 점을 개선하기 위하여 수 μm 혹은 그 이하 두께의 박막의 기계적 특성을 측정하기 위한 나노 인덴테이션 시험(nanoindentation test)⁽¹⁾이 개발되었다. 이 방법은 미세 압흔을 직접 관찰하던 기존의 압입경도 시험법(indentation hardness test)과 달리, 압입 시험 중에 압자에 인가되는 μN 수준의 압입하중과 nm 수준의 압자 침투변위를 연속적으로 측정하여 얻어진 압입곡선을

* 경북대학교 기계공학부 대학원
** 경북대학교 기계공학부
*** 포항공과대학교 기계·산업공학부

분석하여 경도와 탄성계수 등의 기계적 특성을 구하는 방법이다.

나노 인덴테이션 시험과정의 해석에는 원자간에 작용하는 상호 포텐셜과 힘에 의해 원자들의 운동을 기술하는 분자동력학(molecular dynamics)기법⁽²⁾⁻⁽³⁾이 널리 활용되고 있다. 이 분자동력학 해석은 원자단위의 가공 및 나노 마찰, 크랙 선단의 파괴거동 등의 해석에 널리 이용되고 있다⁽⁴⁾⁻⁽⁵⁾. 특히 강제 공구를 이용한 구리의 직교 절삭에 대한 해석⁽⁶⁾, 마찰 특성의 평가⁽⁷⁾⁻⁽⁸⁾, 나노 절삭에서 공구형상에 의한 영향⁽⁹⁾, 가공방향에 따른 가공 표면의 영향⁽¹⁰⁾⁻⁽¹¹⁾, 나노 리소그래피 공정의 해석⁽¹²⁾, 나노 인덴테이션 해석⁽¹³⁾, 전위 거동 파악⁽¹⁴⁾⁻⁽¹⁵⁾ 등 원자단위의 초 미세 가공 공정의 해석에 분자동력학을 이용한 연구가 활발히 진행되고 있다.

본 연구에서는 나노 인덴테이션 시험에 이용되는 압자를 단결정 다이아몬드 압자로써 모델링하고, 단결정 재료인 구리의 나노 인덴테이션 시험 과정에 대해서 3차원 분자동력학 해석을 수행하여 나노 경도 측정시의 압자 밑에 존재하는 원자들의 거동을 파악하고, 전위 거동, 슬립면의 형성방향 및 pile-up 변형을 파악하였다. 결정 방위에 의한 원자들의 거동을 파악하기 위하여 결정방위 면족((001), (110), (111))에 대하여 해석을 수행하였다.

2. 분자동력학법의 개요

분자동력학법은 다수의 입자로 구성되는 가상적인 계를 고려하여 입자간에 상호작용 하는 포텐셜을 이용하여 각 입자에 작용하는 힘을 구하고, 뉴턴 역학에 의한 각 입자의 운동방정식을 수치 적분하여 각 시간마다의 각 입자의 위치 $r_i(t)$ 와 속도 $v_i(t)$ 를 구하여 이것으로부터 각종 데이터 해석을 통하여 각 물리량을 구하는 해석적 방법이다.

본 연구에서는 각각의 구리 원자들에 작용하는 힘을 계산하고 원자들의 운동을 묘사하기 위하여 원자간의 포텐셜 함수로써 공유결합에 의해 결합된 2개의 원자간의 상호작용 에너지의 성질을 잘 나타내는 Morse 포텐셜을 사용하였다. 한편 나노 인덴테이션 시뮬레이션 과정 중에 온도가 일정한 상태로 유지되고 있다고 가정하여 계는 온도 제어 시스템으로 다루었다. 원자 i 와 j 사이의 포텐셜 $\Phi(r_{ij})$ 는 식 (1)과 같이 정의되며, 두 원자간에 작용하는 힘 $F(r_{ij})$ 는 포텐셜을 거리에 대하여 미분한 함수로써 식 (2)로 나타내진다.

$$\Phi(r_{ij}) = D[e^{-2a(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-a(r_{ij}-r_0)}] \quad (1)$$

$$F(r_{ij}) = \frac{\partial \Phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} = m \frac{d^2 r_{ij}(t)}{dt^2} \quad (2)$$

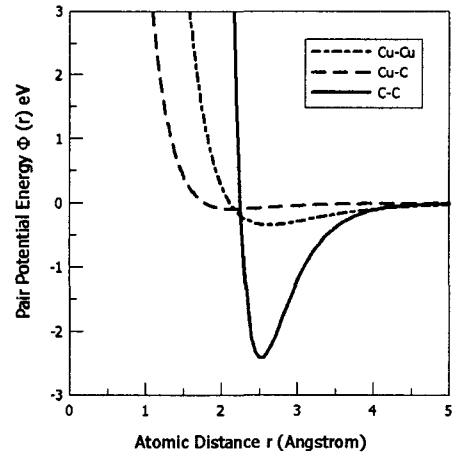


Fig. 1 Curves of various Morse potential

Table 1 Parameters used in the Morse potential

Pair	D [eV]	a [Å]	r_0 [Å]	Lattice constant [Å]
Cu - Cu	0.343	1.359	2.626	3.6153
Cu - C	0.100	1.700	2.200	
C - C	2.423	2.555	2.522	3.5680

식 (1)의 Morse 포텐셜 함수의 그래프와 포텐셜 파라미터들을 각각 Fig. 1과 Table 1에 나타내었다. 여기서 r_0 는 원자간 포텐셜이 가장 낮은 거리이다. 식 (2)의 수치적분에는 Verlet 법을 이용하였다. 원자의 운동방정식이 2계 상미분 방정식이므로 해를 구하기 위해서는 초기 조건으로써 초기의 기준시간 $t=0$ 에서 각 원자의 초기 위치 $r_i(0)$ 와 각 원자의 초기속도 $v_i(0)$ 를 시뮬레이션의 목적에 따라 적절히 설정할 필요가 있다. 본 연구에서와 같이 결정체를 대상으로 하는 경우는 격자구조를 고려하여 초기원자의 위치가 결정된다. 즉, 시뮬레이션하기 전에 먼저 상온(300K)에서 완화과정을 거치고, 포텐셜과 운동 에너지가 평형상태(equilibrium state)에 이르렀을 때의 원자위치를 초기 상태로 한다. 또한 초기속도의 방향을 균일난수의 발생에 의해 랜덤하게 설정하고, 초기속도의 크기는 각 원자의 운동에너지의 평균이

$3k_B T/2$ (k_B 는 볼츠만 상수)가 되도록 한다. 3차원 분자동역학 해석 시에 막대한 계산시간을 줄이기 위해 일정한 거리 내에 있는 원자만을 대상으로 상호간의 포텐셜과 힘을 계산하는 Verlet 목록법(Verlet list method)과 두 원자간의 거리가 한계거리 r_c 보다 먼 경우에 상호포텐셜 작용을 고려하지 않도록 하였으며, 이때 각각에 사용된 값은 $r_{BK}=3.5r_0$ 와 $r_c=3.5r_0$ 이다. 또한 본 해석은 NTV 앙상블에서 행해지는 것으로 하여, 계의 온도는 속도스케일링 기법을 도입하여 해석 중에 항상 일정한 값을 유지하도록 하였다.

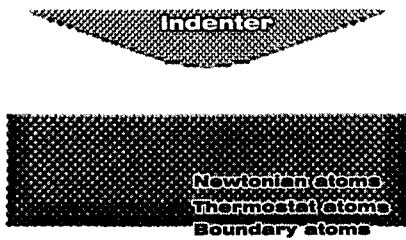


Fig. 2 MD simulation model

Table 2 Computational parameters used in MD simulation

Configuration	3-D MD simulation	
Workpiece material dimension	46a × 46a × 13a (a=Lattice constant, 3.6 Å=0.36 nm)	
No. of atoms in workpiece	Crystal setup	No. of atoms
	(001)	103514
	(110)	102717
	(111)	100681
Indenter dimension (a=2.6 Å)	Cone semi-angle (α) = 70.3°	
	Radius of indenter = 4.00 nm	
	Indenter height = 8.6a	
Indentation depth	1.00 nm	
Indentation speed	200 m/sec	
Bulk temperature	300 K	

3. 시뮬레이션 모델과 시험조건

나노 인덴테이션 시험의 분자동역학 해석에 사용된 모델을 Fig. 2에 나타내었다. 이때 압자와 시편은 각각 강체 다이아몬드와 FCC 구조를 갖는 단결정 금속인 구리로 모델링 하였다. 압자의 형상은 Berkovich 압자에 근사할 수 있는 유효 원추각 $\alpha=70.3^\circ$ 를 갖는 원추형태의

압자로 하였다. 시편은 각각 boundary, thermostat, newtonian의 세 부분으로 구성하였다. Boundary는 원자들의 변위를 영으로 고정한 최외각 두 층의 원자들로 구성하였다. 그에 인접하여 세 층으로 구성된 thermostat 원자들은, 계산 중 특정한 시간 간격으로 원자들의 속도가 제어되어 계의 온도를 300K 로 일정하게 유지하는 역할을 한다. 나노 인덴테이션 시험에서 시편의 결정방위에 따른 전위의 거동을 관찰하기 위해 시편은 결정방위 면족(001), (110), (111)을 갖도록 모델링 하였고, 압입 방향은 각각의 결정방위에 수직인 방향을 갖도록 모델링하여 각각 3가지 경우에 대해서 시뮬레이션을 수행하였다. 압입 조건과 계산에 사용된 파라미터들을 Table 2에 나타내었다.

4. 시뮬레이션 결과 및 고찰

나노 인덴테이션 시험 과정에 대한 분자동역학 해석을 수행하여 압자 밑에 존재하는 원자들의 거동, 소성영역에서의 전위거동, pile-up 변형, 슬립면의 형성방향에 대하여 고찰하였다.

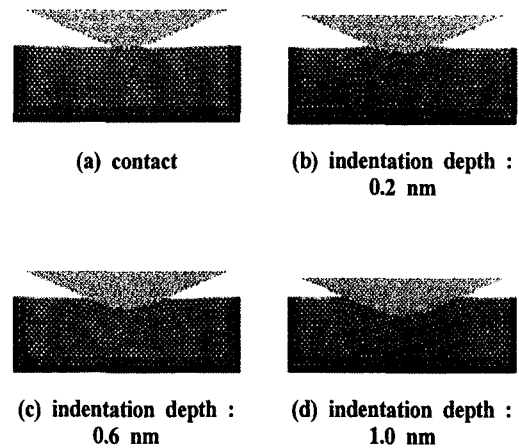


Fig. 3 (001) simulation with different indentation depth

나노 인덴테이션 시험 과정 중에 압자 밑의 원자들의 거동을 파악하기 위하여 대표적인 경우로 결정방위 (001)에 대한 해석에서 압입 깊이에 따른 압자 밑의 원자 거동을 Fig. 3에 나타내었다. 또한 Fig. 4에 결정방위에 따른 특성을 비교하기 위하여 결정방위 (110), (111)에 대하여 최대 압입 깊이에서의 원자거동을 나타내었다. Fig. 3~4로부터 압입 초기에는 원자들이 탄성적인 변형을 하고, 압입 깊이가 증가함에 따라 압자 밑에서

전위가 발생하여 소성변형이 일어나고 압자 주위로 원자들이 pile-up 되고 있음을 알 수 있다. 또, 결정방위(111)에 대한 압입이 (001), (110)의 경우보다 소성영역의 범위가 넓고, pile-up되는 원자들도 많은 것을 알 수 있다.

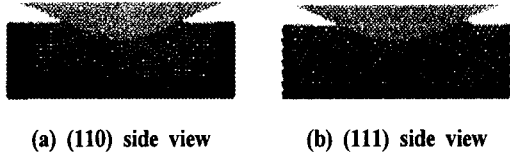


Fig. 4 Nanoindentation simulation with different crystal orientation ($h = 1.0 \text{ nm}$)

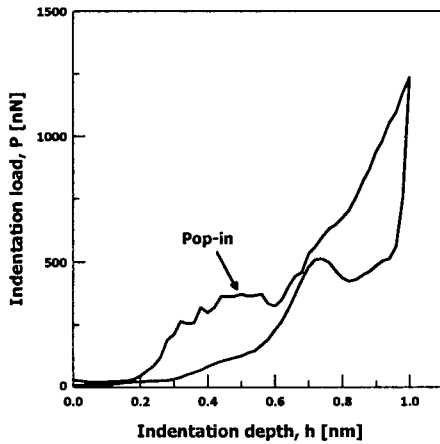


Fig. 5 Nanoindentation load-depth curve

Fig. 5에서는 압입 깊이가 1.0 nm 일 때 결정방위 (001)에 대한 압입 하중-깊이 선도를 나타내었다. 압입의 시작과 동시에 하중이 증가하다가 압입 깊이가 약 0.5 nm에 이르면 하중이 거의 일정하게 유지되는 pop-in이 나타남을 알 수 있다. pop-in은 압자의 압입에 의하여 발생한 전위가 이동하면서 나타나는 현상으로, 이 부분에서부터 소성변형이 시작된다. pop-in 이전의 초기 하중인가 부분은 가역적인 탄성변형을 나타내는 부분으로, pop-in에 도달하기 전에 부하 중이던 압자를 제거 하면 박판은 탄성적으로 복원을 하게된다.

Fig. 6~8에서는 3차원 나노 인덴테이션 시뮬레이션 과정에서 결정방위에 따라 발생하는 전위의 거동과 슬립계에 대한 해석결과를 나타내었다. 본 연구에서는 전위의 거동과 슬립방향을 파악하기 위하여 두 가지 방법을 이용했다. 첫째는 나노 인덴테이션 시뮬레이션 과정에서 각각의 원자에 대한 포텐셜을 계산하여 포텐셜 에너지가 주위의 원자들 보다 높은 원자들만을 나타내는 방법을

이용하였고, 둘째로는 기본적인 결정구조를 벗어나서 일정범위의 변위를 갖는 원자들만을 선별하는 방법을 이용했으며, 두 방법의 결과가 유사한 형태를 띠는 것을 확인했다. 그리고 이 결과는 이론적으로 FCC 재료인 단결정 구리 슬립계(111)<110>와 일치한다(Fig. 9).

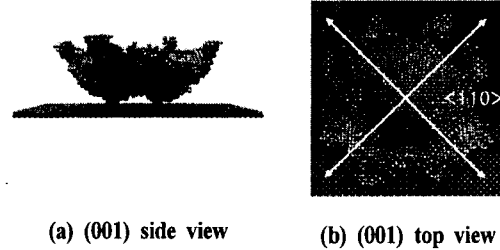


Fig. 6 MD simulation plots showing the slip direction along crystal orientation (001) ($h = 1.0 \text{ nm}$)

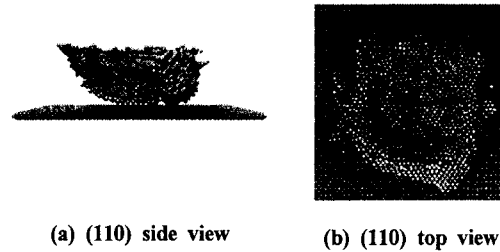


Fig. 7 MD simulation plots showing the slip direction along crystal orientation (110) ($h = 1.0 \text{ nm}$)

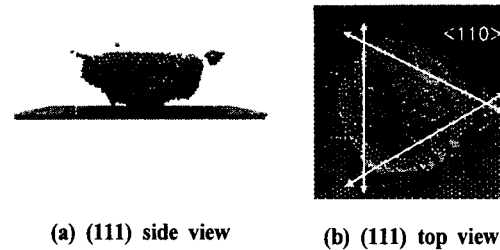


Fig. 8 MD simulation plots showing the slip direction along crystal orientation (111) ($h = 1.0 \text{ nm}$)

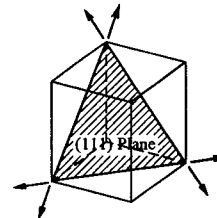


Fig. 9 Diagram of the $\{111\}\langle 110\rangle$ slip systems available for FCC crystal structure

Fig. 6은 결정방위 (001)에 대한 해석 결과로서 압자의 압입에 따라 압자 밑에서 전위가 45° 방향으로 전파하며 슬립면이 형성되는 것을 보여준다. 또한 3차원 공간상에서의 슬립면의 형성은 슬립면들의 복합적인 영향으로 나타나게 되며 결정방위에 따라 일정한 형태로 형성된다고 해석 할 수 있다. 결정방위 (001), (110)에 대한 나노 인덴테이션 시뮬레이션 해석결과에서도 결정방위에 따른 슬립방향과 슬립면이 FCC 결정구조의 슬립계 (111)<110>와 일치함을 알 수 있다(Fig. 7~8). 또한, 이 결과는 참고문헌(15)에 언급된 결정구조의 초기 소성변형시의 슬립방향과도 일치한다.

이상과 같이 나노 인덴테이션 시험과정의 3차원 분자동역학 해석은 나노 재료의 기계적 특성 평가에 유용하게 활용될 수 있다.

본 연구에서 대상으로 한 나노 인덴테이션에서의 결정방위에 따른 경도 및 탄성계수의 평가는 차후의 연구과제로 남겨둔다.

4. 결 론

분자동역학을 이용하여 나노 인덴테이션 시험과정을 시뮬레이션 하여 다음과 같이 결정방위에 따른 압자 밑의 원자거동과 전위 발생, 슬립방향 등의 특성을 파악하였다.

(1) 나노 인덴테이션 시험 시뮬레이션에서 압자 밑 재료의 슬립방향과 전위 이동 방향은 결정방위에 따라 변화한다.

(2) 나노 인덴테이션 시험 시뮬레이션에서 결정방위 면족((001), (110), (111))의 슬립방향은 이론적으로 FCC 재료인 단결정 구리 슬립계의 슬립방향과 일치한다.

후 기

이 논문은 과학기술부 2002 나노핵심기반기술개발사업(M10214000237-02B1500-03810)의 연구비 지원과 2002년도 경북대학교 특성화사업팀(KNURT)의 연구비 지원에 의해 수행되었으며, 이에 관계자 여러분께 감사 드립니다.

참 고 문 헌

(1) A. C. Fischer-Cripps., 2002, "Nanoindentation" Springer.
 (2) Allen, M., 1987, "Computer simulation of liquids",

Oxford University Press.

(3) 김영석, 1998, "분자동역학의 개요와 재료공학에의 응용(I)", 대한금속학회, Vol.11, No.6, pp.671~678, 2000, (II), Vol.13, No.7, pp.58~70.
 (4) Kim, Y., 1999, "Molecular dynamics studies for the generation and the movement of dislocation", Metals and Materials, Vol.5, No.4, pp.329~337.
 (5) Kim, Y., 2000, "Microscopic study for the behavior of grain boundary using molecular dynamics", Metals and Materials, Vol.6, No.2, pp.81~87.
 (6) Belak, J., 1990, "A molecular dynamics model of the orthogonal cutting process", Proc. Am. Soc. Precis. Eng., pp.76~82.
 (7) Maekawa, K., 1995, "Friction and tool wear in nano-scale machining-molecular dynamics approach", Wear., Vol.188, pp.115~122.
 (8) Zhang, L., 1997, "Towards a deeper understanding of wear and friction on the atomic scale-a molecular dynamics analysis", Wear, Vol.211, pp.44~52.
 (9) Kim, J., 1996, "A study on micro cutting for the configuration of tools using molecular dynamics", J. Mat. Pro. Tech., Vol.59, pp.309~314.
 (10) Isono, Y., 1997, "Three-dimensional molecular dynamics simulation of the atomic-scale cutting process using a pin tool", J. Japan Soc. Mech. Eng., Vol.63, No.612, pp.1814~1821.
 (11) Komanduri, R., 2000, "M.D. simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum-effect of crystal orientation and direction of cutting", Wear, Vol.242, pp.60~88.
 (12) Y.S. Kim, 2003, "Molecular dynamics simulation of AFM-Based Nanolithography process for Fabrication of MEMS Components", THERMEC 2003.
 (13) Belak, J., and Stowers, I.F. 1992, "The Indentation and Scraping of a Metal Surface: A Molecular Dynamics Study", Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, pp.511~520.
 (14) Vivek B. Shenoy, 2000, "Nucleation of dislocations beneath a plane strain indenter", J. Mechanics and Physics of Solids, Vol.48, pp.649~673.
 (15) Ju Li, 2002, "Atomistic mechanism governing elastic limit and incipient plasticity in crystals", Nature, Vol.418, pp.307~310.