

# 분자동역학을 이용한 고변형률하에서 결함으로 인한 저장에너지 계산에 관한 연구

유 한규\* · 최 덕기\*

## Study on The Calculation of The Stored Energy due to Defects at High-Strain-Rate Deformation Using Molecular Dynamics

Han-Kyu Ryu, Deok-Kee Choi

**Key Words:** Stored Energy(저장 에너지), Molecular Dynamics(분자동역학)

### Abstract

This paper addresses a theoretical study to calculate the amount of the stored energy due to vacancies during high-strain-rate deformation. The study concerns the role of excess vacancies, which can play an important role to increase the amount of stored energy. Molecular dynamics simulation using a 3D model is carried out and the result clearly shows that the excess vacancies are credited to generation of the stored energy.

### 1. 서론

고변형률 변형하에서 재료는 소성일 때문에 열을 발생시키고, 재료의 온도는 매우 짧은 시간 동안에 상승하기 때문에 단열된 상태에서 변형이 일어난다고 생각할 수 있다. 고변형률 변형은 explosive 용접, cladding, 판금, shock consolidation, shock synthesis 등과 같은 다양한 산업 분야에서 적용되고 있다<sup>(1,2)</sup>. 한 예로, 충격 변형에서 변형률은  $10^5 \sim 10^8 s^{-1}$ 이 된다<sup>(3)</sup>. 고변형률 변형에서는 하중이 작용하는 시간이 매우 짧기 때문에, 재료 내에서 열 확산 거리가 작게 되어 단열된 발열로 간주될 수 있다<sup>(4)</sup>.

변형이 이루어지는 동안에 재료 내에 발생하는 열은 공공, 전위, 균열, 결정 크기, 상 변화와 같

은 내부 결함을 생성시킨다. 그래서 저장 에너지에 관한 연구가 지난 수년동안 활발히 진행되고 있다<sup>(5-7)</sup>. 변형 중에 발생하는 온도 상승으로 인하여 재료의 전체적인 동적 물성치가 변화하는데, 이것은 온도 상승이 미세구조를 변화시키는 것과 같은 재료의 구조적인 거동에 중요한 영향을 미치는 열 연화를 발생시키기 때문이다.

변형 중에 재료에 따라서 온도가 수 백도에 이른다<sup>(1,4,8-10)</sup>. 따라서, 변형 중에 입력되는 에너지의 상당부분이 열로 변환되어 재료를 고온상태로 변화시킨다고 추론할 수 있다.

재료 내의 온도상승에 따른 효과를 고려할 때, 변형 중에 입력된 에너지가 열로 변환된 비율을 측정하거나 예상하는 것이 상당히 중요하다. 대부분의 금속에 대해서 거의 모든 외부 일이 열로 변환된다. 재료 내의 공공이나 전위 같은 결함들이 저장 에너지를 발생시킨다. 고온에서 전위는 매우 빠르게 움직이고, 많은 과공공(excess vacancies)을 발생시킨다.

본 연구에서는 Lennard-Jones 포텐셜 에너지 함수를 적용한 분자동역학(molecular dynamics, MD) 모사를 이용하여 공공이 저장 에너지에 미치는

† 단국대학교 기계공학과 대학원

E-mail : rhkme@hanmail.net

TEL : (02)709-2560 FAX : (02)709-2560

\* 단국대학교 기계공학과

영향을 조사하였다. 공공이 저장 에너지에 미치는 영향은 원자 단계의 접근방법에 의해서 보다 잘 설명될 수 있기 때문에, 원자 재료 모델을 이용한 분자동역학 모사가 적절한 해석방법일 수 있다. 연속체 모델과 같은 다른 이론적 모델에 비해 분자동역학을 이용한 원자 모델이 가지는 몇몇 장점에도 불구하고, 분자동역학 모사는 많은 양의 계산 자원을 요구하게 된다. 예를 들면, 분자의 수가 증가함에 따라 계산량은 분자 수의 제곱이 된다. 최근 컴퓨터 기술의 발전에 따라, 재료 모사에 이용되는 분자의 수가 매년 증가하고 있다. 실제 크기의 재료 모사를 위해서는 많은 수의 분자 수가 필요하고, 오늘날의 슈퍼컴퓨터조차도 수행할 수 없는 천문학적인 계산 능력이 요구된다. 그러나, 컴퓨터 기술의 발전과 더불어 보다 많은 수의 분자로 이루어진 재료 모사가 가능해질 것이다. 최근에는 10억개의 분자로 재료 모사를 수행한 결과가 보고되고 있다<sup>(11)</sup>. 하지만 아직 고성능 컴퓨터에서조차도 가능한 한 계산량을 줄이는 것이 필수적이다. 이와 같은 대규모 문제에서 발생하는 또 다른 문제중의 하나는 매 시간 단계에서 적분 알고리즘에 의해서 발생하는 수치 오차이다. 따라서 분자동역학 모사에서는 긴 시간에 걸쳐 재료 모사를 수행하지 않는다. 구리와 같은 면심입방격자 구조를 가지는 재료 모델이 분자동역학 모사에 사용되었다.

## 2. 저장 에너지

열역학 제1법칙은 다음과 같다.

$$W = Q + E_s \quad (1)$$

여기서,  $W$ 는 일 또는 입력된 에너지,  $Q$ 는 열,  $E_s$ 는 재료 내의 저장 에너지이다. 외부 일이나 입력된 에너지는 열을 발생시키거나 결합 내의 에너지 형태로 저장되는 내부 에너지의 변화로 전환된다. 입력된 에너지는 변형이 발생하는 동안에 응력과 변형률의 곱에 대한 적분형태로 정의될 수 있고, 이것은 응력-변형률 곡선 아래 부분의 넓이를 나타낸다. 식 (1)의 적분 형태는 다음과 같다.

$$\int \sigma_T d\epsilon_T = \int \rho c_v d\theta + \int dE_s \quad (2)$$

여기서,  $\sigma_T$ 는 진응력,  $\epsilon_T$ 는 진변형률,  $\rho$ 는 재료 밀도,  $c_v$ 는 일정 부피에서의 비열,  $d\theta$ 는 재료 내의 온도 상승,  $E_s$ 는 결합으로 인한 저장 에너지를 의미한다. 만약 열 발생률이 열 손실률보다 크다면 재료의 온도는 증가한다. 고변형률 변형에 대한 전형적인 실험에서는 식 (2)에서 추론할 수 있듯이 저장 에너지는 열량 측정 장치를 이용하여 열을 측정하여 입력된 에너지에서 빼는 방법으로 얻을 수 있다. 고변형률 변형에서는 변형이 단열이 유지되면서 발생한다고 가정할 수 있으므로 대부분의 입력된 에너지가 많은 수의 공공을 발생시키는 열로 전환된다고 할 수 있다. 그러므로, 고변형률 변형에서 생성되는 공공의 효과를 파악하는 것은 중요하다. 공공이 저장 에너지와 관련이 있다는 것은 알려져 있지만, 이미 존재하는 공공과 과공공이 각각 얼마만큼씩 저장 에너지에 영향을 주는지를 산출하기란 매우 어렵다.

본 연구에서는 단지 공공만이 저장 에너지에 주된 역할을 한다고 가정하고 다른 결합들은 고려하지 않았다. 고변형률 변형중에는 많은 수의 공공들이 생성되며, 전체 공공의 수는 실내 온도에서 시편이 포함할 수 있는 공공의 수를 초과하게 된다. 과공공의 효과를 고려하지 않는다면 과소 평가된 온도 상승을 가져올 수 있다. 따라서, 공공으로 인한 저장 에너지  $E_s$ 는 공공과 과공공과 관련된 두 부분으로 나누어 생각할 수 있다.

$$E_s = E_s^v + \Delta E_s \quad (3)$$

여기서,  $E_s^v$ 와  $\Delta E_s$ 는 각각 이미 존재하는 공공과 과공공으로 인한 저장 에너지를 의미한다. 만약 시편 내부에  $n$ 개의 공공이 존재한다면, 공공으로 인한 저장 에너지는 다음과 같이 계산된다.

$$E_s^v = n E_f^v \quad (4)$$

여기서,  $E_f^v$ 는 공공의 생성 에너지를 의미한다. 본 연구에서는 초기 상태에서 공공이 전혀 없는 원자 모델이 설정된다. 따라서, 공공의 효과를 조사하기 위해서는 모델에 공공이 존재하도록 해야 한다. 이론적으로 공공의 수  $n$ 은 모사가 시작

되기 전에 결정되어야 한다. 일단 모사에 설정된 공공의 수가 정해지면 공공으로 인한 저장 에너지는 식 (4)에 의해서 계산될 수 있다. 만약 모사에서 계산된 저장 에너지  $E_s$ 가 식 (4)의 이미 존재하는 공공으로 인한 저장 에너지  $E_s^v$ 보다 크고, 앞에서도 언급했듯이 전위와 같은 다른 결함의 영향을 무시한다면, 계산된 저장 에너지의 과잉 부분을 생성하는데 과공공이 관련되었다고 추론할 수 있다. 식 (3), (4)를 이용하여 과공공으로 인한 저장 에너지  $\Delta E_s$ 를 정의하면 다음과 같다.

$$\Delta E_s = E_s - E_s^v = E_s - n E_j^v \quad (5)$$

과공공의 효과가 고려되지 않고, 식 (3)을 이용하면 공공으로 인한 에너지는 다음과 같다.

$$E_s^v = E_s - \Delta E_s \quad (6)$$

### 3. 분자동역학을 이용한 모사

#### 3.1 분자동역학 모사

두 분자 사이의 LJ 포텐셜 에너지는 다음과 같다.

$$\phi(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (7)$$

여기서,  $\phi$ 는 포텐셜 에너지,  $\epsilon$ 은 실험적으로 얻어지는 최소에너지,  $\sigma$ 는 포텐셜 에너지가 최소가 되는 분자간의 거리,  $r_{ij}$ 는 분자  $i$ 와  $j$ 사이의 거리를 의미한다. 분자 사이에 작용하는 힘은 다음과 같이 표현된다.

$$f = -\nabla \phi \quad (8)$$

식 (7)을 식 (8)에 대입하면 다음과 같다.

$$f_{ij} = \left( \frac{48\epsilon}{\sigma^2} \right) \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right] r_{ij} \quad (9)$$

여기서,  $f_{ij}$ 는 상호 작용력이고,  $r_{ij}$ 는 분자  $i$ 와  $j$ 사이의 거리 벡터이다. 분자  $i$ 와 관련된 모든 작용력을 합해서 분자  $i$ 에 작용하는 전체 힘을 다

음과 같이 계산할 수 있다.

$$F_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N f_{ij} \quad (10)$$

여기서,  $N$ 은 계산에 사용된 분자 수이다. 뉴턴의 운동방정식을 도입하면 다음과 같다.

$$F_i = m a_i = m \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{d^2 r_{ij}}{dt^2} \quad (11)$$

여기서,  $m$ 은 분자 질량이고,  $a_i$ 는 분자  $i$ 의 가속도,  $t$ 는 시간을 의미한다. 분자동역학에서 매우 작은 수치로 표현되는 값에 의한 오차를 줄이기 위해서 시간과 거리에 대해서 무차원화된 매개변수가 필요하다. 무차원화된 거리  $R_{ij}$ 과 시간  $T$ 는 다음과 같이 정의하였다.

$$R_{ij} \equiv \frac{r_{ij}}{\sigma}, \quad T \equiv \frac{t}{\sqrt{m\sigma^2/\epsilon}} \quad (12)$$

식 (11)와 식 (12)로부터 뉴턴의 운동방정식은 다음과 같이 표현된다.

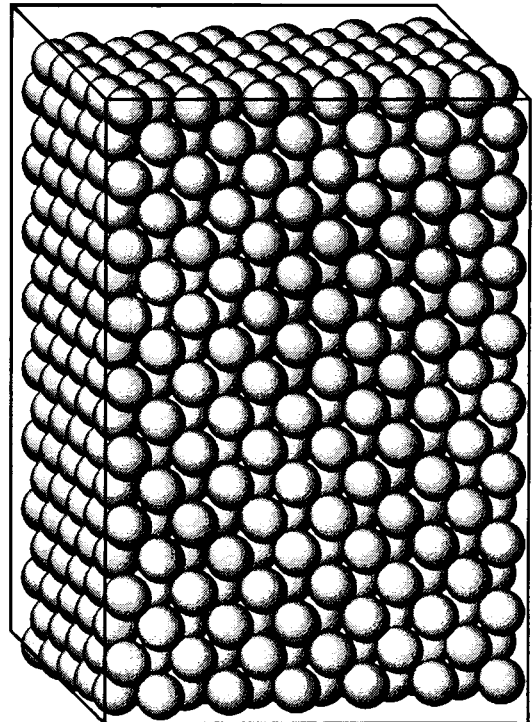
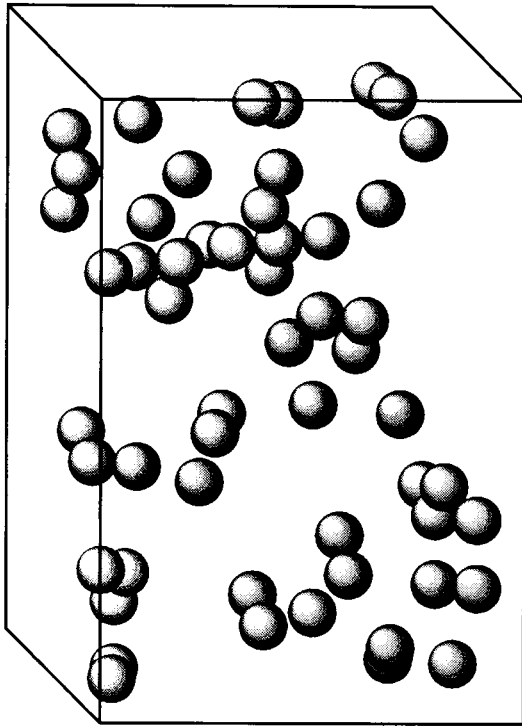


Fig. 1 Initial configuration of the specimen with no defects.

Fig. 2 Vacancies at  $q=0.05$ 

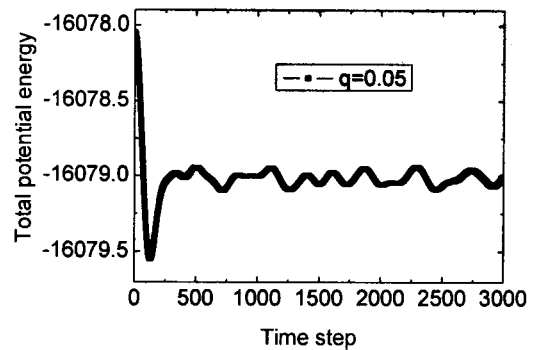
$$\frac{d^2 R_i}{dT^2} = 48 \sum_{j \neq i}^N \left( R_{ij}^{-14} - \frac{1}{2} R_{ij}^{-8} \right) R_{ij} \quad (13)$$

수치적인 방법으로 식 (13)을 풀어서 분자들의 새로운 위치를 얻을 수 있고, 새롭게 형성된 분자들의 위치로부터 포텐셜 에너지를 계산할 수 있다.

### 3.2 모델 구성

연속체 모델과 같은 다른 모델에 비해서 원자 모델이 가지는 장점 중의 하나는 원자 단위 정보와 관련된 방정식의 간결성이다. 일단 주어진 재료의 원자 상호간 포텐셜을 알게 되면 재료 모사를 수행하는데 있어서 재료와 관련된 다른 정보가 필요 없게 된다.

본 연구에서는 면심입방격자 구조를 가지는 재료를 Fig. 1과 같이  $1080(6 \times 18 \times 10)$ 개의 분자를 이용하여 3차원으로 구성하였다. 초기 상태에서 분자들은 이웃하는 분자들과 평형 거리를 유지하도록 위치하게 된다. Fig. 1은 공공이 전혀 없는 모델이다. 변형하는 동안 공공의 영향을 확인하기 위해서 공공을 포함하는 모델을 구성할 필요

Fig. 3 Convergence of the total potential energy at  $q=0.05$ 

가 있다. 분자 모델을 구성하고 있는 분자들 중에서 임의의 분자를 제거함으로써 공공을 포함하는 모델을 구성하였다.

앞에서 언급했듯이 모사를 수행하기 전에 공공이 모델에 존재하고 있어야 한다. 본 연구에서는 공공의 수를 전체 분자 수에 대한 공공의 비율로 결정하였다.

$$q = \frac{\text{number of removed molecules}}{\text{number of molecules of a model}} \quad (14)$$

공공의 비율을  $q=0.005, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1$ 로 하고,  $\Delta T=0.001$ 로 설정하여  $T=3$ 까지 모사를 수행하였다. Fig. 2는  $q=0.05$ 일 때 제거된 분자들의 위치를 보여준다.

초기 상태에서 모든 분자들은 포텐셜 에너지가 최소가 되는 위치에 놓이게 된다. 안정한 시스템이 공공으로 인해 교란되면 다시 안정한 상태로 되돌아가는데는 시간이 필요하기 때문에 분자동역학 모사에 있어서 수렴된 포텐셜 에너지를 얻는 것은 중요하다고 할 수 있다. Fig. 3은  $q=0.05$ 인 모델의 전체 포텐셜 에너지가 시간 단계에 따라 수렴하는 것을 보여주고 있다.

### 3.3 저장 에너지의 계산

저장 에너지는 완전한 시편과 공공이 존재하는 시편의 포텐셜 에너지 차이로 정의된다. 그러므로 계산된 저장 에너지  $E_s$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$E_s \equiv \phi_{ref} - \phi = \Delta\phi \quad (15)$$

여기서,  $\phi_{ref}$ 와  $\phi$ 는 각각 완전한 시편과 공공이 존재하는 시편의 포텐셜 에너지를 의미한다. Table 1은 다양한 공공의 비율에서 계산된 저장 에너지를 보여주고 있다. Table 1에서 첫 번째 열은 분자동역학 모사로부터 계산된 저장 에너지이다. 두 번째 열은 식 (4)로부터 구리에 대한  $E_f^v=1.3eV$ 로 계산된  $n$ 개의 공공에 대한 총 생성 에너지이다. 세 번째 열은 식 (5)에 의해서 계산된 과공공으로 인한 저장 에너지이다. 마지막 열은 변형 동안에 과공공으로 인한 저장 에너지가 얼마나 증가하는가를 보여주는, 시편의 저장 에너지와 과공공으로 인한 저장 에너지의 비율을 나타낸다. Table 1의 결과에서 볼 수 있듯이, 과공공이 전체 공공으로 인해 발생하는 총 저장 에너지의 75~76%를 발생시키는 것을 알 수 있다.

#### 4. 결론

재료는 고변형률 변형 과정에서 소성 일로 인하여 열이 발생한다. 고변형률로 인한 짧은 변형 시간이 단열된 변형을 발생시킨다. 온도 상승이 재료의 동적 물성치에 큰 영향을 미치기 때문에 입력된 일이 얼마나 많이 재료 내부에 축적되는지 측정하거나 예측하는 것이 중요하다. 대부분의 금속에서 거의 모든 외부 일이 열로 변환된다. 전위가 매우 빠르게 움직이는 곳에서 많은 공공이 발생하게 되고 이런 결함들은 재료내의 저장 에너지와 관련이 있다.

본 연구에서는 Lennard-Jones 포텐셜을 적용한 분자동역학을 이용하여 공공이 저장 에너지에 미치는 영향을 조사하였다. 분자동역학은 계산 집약적인 해석방법으로써 가능한 한 계산량을 줄이는 것이 필수적이다. 본 연구에서는 구리와 같은 면심입방격자 구조의 재료에 대해서 주기경계조건을 적용하여 분자동역학 모사를 수행하였다.

1. 비교적 적은 수의 분자로 이루어진 원자 모델이 고변형률 변형에 대한 재료 모사에 사용될 수 있었다.
2. 미리 정해진 공공 비율에 따라 분자를 제거함으로써 공공이 존재하는 원자 모델에 의해서 고변형률 변형이 일어나는 재료를 모사 할 수 있었다. 재료 내에 존재하는 공공의 효과는 완

Table. 1 The calculated store energy  $E_s$ , the stored energy due to existing vacancies  $E_s^v$  and the stored energy due to excess vacancies  $\Delta E_s$  at the various vacancy ratios.

q	$E_s$ (eV)	$E_s^v$ (eV)	$\Delta E_s$ (eV)	$\Delta E_s/E_s$
0.005	27.52	6.50	21.02	0.764
0.01	54.97	13.00	41.97	0.764
0.02	113.85	27.30	86.55	0.760
0.05	289.47	70.20	219.27	0.757
0.1	565.98	140.40	425.58	0.752

전한 모델과 결함을 가지고 있는 모델 사이의 계산된 포텐셜 에너지의 차이에 의해서 정의된다.

3. 고변형률 변형 중에 발생한 과공공은 재료 내부의 저장 에너지의 크기에 중요한 영향을 미친다. 과공공의 영향을 배제하는 것은 온도 상승을 저 평가하는 결과를 낳는다.

#### 참고문헌

- (1) M. A. Meyers, 1994, *Dynamic Behavior of Materials*, Wiley-interscience, New York.
- (2) M. A. Meyers, Y. B. Xu, Q. Xue, M. T. Perez-Prado and T. R. McNelley, 2003, "microstructural evolution in adiabatic shear localization in stainless steel", *Acta Mater.*, Vol. 53, pp. 1307-3125.
- (3) A. Rohatgi and K. S. Vecchio, 2002, "The variation of dislocation density as a function of the stacking fault energy in shock-deformed FCC materials", *Mater. Sci. Eng.*, Vol. 328, pp. 256-266.
- (4) R. Kapoor and S. Nemat-Nasser, 1998, "Determination of temperature rise using strain rate deformation", *Mech. Mater.*, Vol. 27, pp. 1-12.
- (5) L. M. Clarebrough et al., 1952, "The determination of the energy stored in a metal during plastic deformation", *Proc. R. Soc. Lond. A*, Vol. 215, pp. 507-524.
- (6) A. N. Stroh, 1954, "The formation of cracks as

- a result of plastic flow", Proc. R. Soc. Lond. A, Vol. 223, pp. 404-414.
- (7) W. Oliferuk, W. A. Swiatnicki and M. W. Grabski, 1995, "Effect of the grain size on the rate of energy storage during the tensile deformation of an austenitic steel", Mater. Sci. Eng. A, Vol. 197, pp. 49-58.
- (8) S. Nemat-Nasser, W. G. Guo and J. Y. Cheng, 1999, "Mechanical properties and deformation mechanisms of a commercially pure titanium", Acta Met., Vol. 47, pp. 3705-3720.
- (9) S. Nemat-Nasser, W. G. Guo and D. P. Kihl, 2001, "Thermomechanical response of AL-6XN stainless steel over a wide range of strain rates and temperatures", J. Mech. Phys. Solids, Vol. 49, pp. 1823-1849.
- (10) S. Nemat-Nasser and J. B. Issacs, 1997, "Direct measurement of isothermal flow stress of metals at elevated temperatures and high strain rates with application to Ta and Ta-W alloys", Acta Mater., Vol. 45, pp. 907-919.
- (11) F. Shimojo, T. J. Campbell, R. K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta, S. Ogata and K. Tsuruta, 2000, "A scalable molecular-dynamics algorithm suite for materials simulations: design-space diagram on 1024 Cray T3E processors", Future Generation Computer Systems, Vol. 17, pp. 279-291.