# 분자수준 시뮬레이션을 이용한 응력확대계수 및 전위이동에 관한 연구

최 덕 기*· 김 지 운**

(1999년 1월 27일 접수)

# A Study on Stress Intensity Factors and Dislocation Emission via Molecular Dynamics

Deok-Kee Choi and Jih-Woon Kim

**Key Words:** Molecular Dynamics(분자 동역학), Stress Intensity Factor(응력확대계수), Plastic Region(소성영역), Crack Tip(균열 첨단), Crack Surface(균열면), Dislocation(전위), Energy Release Rate(에너지 방출률).

**Abstract**

The paper addresses an application of molecular dynamics technique for fracture mechanics. Molecular dynamics simulation is an atomistic approach, while typical numerical methods such as finite element methods are macroscopic. Using the potential functions, which express the energy of a molecular system, a virtual specimen with molecules is set up and the trajectory of every molecule can be calculated by Newton's equation of motion. Several three-dimensional models with various types of cracks are considered. The stress intensity factors, the sizes of plastic zone as well as the dislocation emission are sought to be compared with the anlaytical solutions, which result in good agreement.

## 1. 서 론

재료가 가지는 다양한 기계적 성질들은 재료의 구조를 이루는 내부 구성요소의 배치와 연관이 있다. 특히 금속과 같은 고체재료에서의 중요한 많은 성질은 원자의 기하학적 배열과, 원자 혹은 분자간의 결합에 영향을 받는다.[1] 따라서 원자단위(atomic level)에서의 구조에 대한 이해와 함께 전위(dislocation)같은 결함과의 관계를 생각하는 것도 중요하다. 이렇게 미시적인 관점에서 재료의 성질이 이해될 때, 그 재료의 성질을 보다 향상시키고 보완시킬 수 있다.[2]

상대적으로 단순한 균열문제에 대한 해석은 유한요소법과 경계요소법과 같은 전통적인 수치적 방법들이 널리 사용되었으며, 이를 사용한 많은 연구들이 보고되어왔다. 그러나 보다 복잡한 균열을 가진 재료의 파괴과정과 같은 현상을 유한요소법으로 계산하는 데에는 매 시간간격마다 균열 선단이 진행함에 따라서 균열면(crack surface)의 모양에 적합하도록 요소들(elements)을 재정렬해야 하는 것과 소성영역 계산에 필요한 복잡한 재료공식들을 사용해야는

* 회원, 단국대학교 기계공학과
E-mail : dkchoi@ns.dankook.ac.kr
TEL : (02)709-2830 FAX : (02)709-2830
** 단국대학교 대학원 기계공학과

어려운 문제점들이 있다. 이와 같은 문제점을 해결하기 위해 전통적인 수치해석방법 이외에 최근에는 분자 동역학을 사용한 재료의 시뮬레이션이 널리 사용되기 시작했다. 분자 동역학은 포텐셜 함수에 의해 설명되는 분자 상호간의 상호작용력에 의해 지배받는 수많은 분자들의 운동을 뉴우톤(Newton) 운동방정식으로 구하게 된다.

본 연구에서는 재료의 소성영역 형태와 소성변형 하에서의 분자들의 전위현상에 대해 분자동력학 기법을 사용하여 정성적인 측면에서 컴퓨터 시뮬레이션하려 한다. 일반적으로 균열과 같은 결함을 가지는 부재가 외력을 받을 때 균열첨단 근방에서는 소성변형을 수반하게 되며, 균열의 진전은 소성영역과 밀접한 관계가 있으므로 이러한 소성영역의 추정은 매우 중요하다. 한편 소성변형에는 많은 전위들의 움직임이 수반되므로 이러한 전위의 이동해석을 통해 슬립면과 슬립방향에 대한 해석을 할 수 있다.

우선적으로 분자 동역학을 사용한 가상 시험의 타당성을 검증하기 위해 일정변위 경계조건으로 균열을 가진 구리시편의 균열길이의 변화에 따른 응력확대계수를 계산하여 이론값과 비교하여 보았으며, EAM(Embedded-Atom Method) 포텐셜 에너지 함수를 이용하여 구한 소성영역과 전위의 이동을 컴퓨터 시뮬레이션하였다.

### 2.1 분자 동역학

분자 동역학은 미시적인 관점에서 화학반응, 유체유동, 상전이, 고체의 파괴과정 등과 같은 물리적인 현상을 연구하기 위해 분자의 운동을 시뮬레이션하는 방법이다. 분자간의 운동은 포텐셜 함수에 의해 설명되는 상호작용력으로 표현할 수 있는데 이러한 분자운동을 뉴우톤 운동방정식으로 표현하여 수치적으로 해석하여 풀이한다. 본 연구에서는 포텐셜장을 결정하는 포텐셜 에너지 함수로 EAM 포텐셜 에너지 함수를 사용하였다.[3]

$$\phi=\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{1}{2}\chi\sum_{j\neq i}\varphi(r_{ij})+(1-\chi)\Im(\rho_i)\right] \tag{1}$$

여기서 $\phi$는 포텐셜 에너지, N은 전체 분자수를 나타내며, $\chi$는 vacancy energy에 대한 cohesive energy의 비로서 통상 0에서 1사이의 범위를 나타낸다. $\varphi(r_{ij})$는 분자간의 거리인 $r_{ij}$에 의해 영향을 받는 LJ-spline 포텐셜을 나타내며 다음과 같다.

$$\varphi(r)=\begin{cases}4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right], & r<r_{spl}\\ -a_2(r_{\max}^2-r^2)^2+a_3(r_{\max}^2-r^2)^3, & r_{spl}<r<r_{\max}\end{cases} \tag{2}$$

여기서 $\varepsilon$은 최소 에너지를 나타내고, $a_2$=0.5424, $a_3$=0.0935로 실험적으로 구해지는 값이며, $r_{spl}$은 spline point, $r_{\max}$는 분자간의 최대거리이다.[4] $\Im(\rho_i)$는 임의의 분자 $i$에서의 밀도에 대한 함수로 모든 주변 분자들의 합으로 주어지는 many-body embedding function이며 다음과 같다.

$$\Im(\rho_i) = \frac{1}{2}d(d+1)\varepsilon e\rho_i\ln\rho_i \tag{3}$$

$$\rho_i = \sum_{j\neq i}\omega(r_{ij}) \tag{4}$$

$$\omega(r)=\frac{1}{d(d+1)e}\left[\frac{r_{\max}^2-r^2}{r_{\max}^2-r_0^2}\right],\quad 0<r<r_{\max} \tag{5}$$

여기서 $\rho_i$는 local density, $d$는 dimensionality, $r_0$는 포텐셜 에너지가 최소가 되는 거리이며, $e$는 자연로그의 기수이다.

포텐셜 에너지 $\phi$와 분자 사이에 작용하는 힘 $\vec{F}$사이에는 다음과 같은 관계가 성립한다.[5]

$$\vec{F}(\vec{r_{ij}})=-\nabla\phi(\vec{r_i},\vec{r_j}) \tag{6}$$

식 (6)의 관계를 통해 포텐셜 에너지 함수로부터 분자들 사이에 작용하는 힘을 유도할 수 있으며, 뉴우톤의 운동방정식을 통해 수치적으로 해석하여 풀이하게된다.

그리고, 각 분자들의 운동은 뉴우톤의 운동방정식을 통해 구할 수 있는데 분자 동역학에서는 모든 분자 단위의 요소를 분자 동역학적 단위로 무차원하게 된다.[3] 이렇게 무차원을 하는 이유로는 정상적인 원자척도와 관계가 있는 극도로 작은 값을 대신하여 단위 값과의 차가 그다지 크지 않은 값을 사용하기 때문에 컴퓨터의 하드웨어에

의하여 표현되는 범위를 벗어날 가능성을 방지할 수 있다는 것이다. 또한 무차원 단위가 되면 모델을 규정하는 매개변수의 상당부분이 무차원 과정에 흡수되어 운동방정식이 단순화되기 때문이다.

분자 동역학의 계산에서 중요한 변수인 거리와 시간을 무차원된 단위로 사용하는데 다음과 같이 $r \to \sigma r^*$, $t \to \sqrt{\frac{m\sigma^2}{\varepsilon}}\, t^*$로 치환하여 무차원된 단위를 만든다. 여기서 $r^*$ 과 $t^*$는 무차원 거리와 시간을 나타내며, $\sigma$는 포텐셜 에너지가 최소일때의 분자간 거리이며 $m$은 분자의 질량을, $\varepsilon$은 최소 포텐셜 에너지를 나타낸다. 따라서 뉴우톤의 운동방정식은 다음과 같이 무차원화된다.

$$\ddot{r}^* = -12\chi\left(-2\frac{1}{r^{*13}}+\frac{1}{r^{*7}}\right) + r^*(1-\chi)\frac{2(r_m^2-r^{*2})}{\left(r_m^2-2^{\frac{1}{3}}\right)^2}\left\{\ln\frac{1}{d(d+1)e} + 2\ln\left[\frac{r_m^2-r^{*2}}{r_m^2-2^{\frac{1}{3}}}\right]+1\right\}, \quad r^* < r^*_{\max} \qquad (7)$$

$$\ddot{r}^* = -2\chi a_2 r^*(r_m^2-r^{*2})+3\chi a_3 r^*(r_m^2-r^{*2})^2 + r^*(1-\chi)\frac{2(r_m^2-r^{*2})}{\left(r_m^2-2^{\frac{1}{3}}\right)^2}\left\{\ln\frac{1}{d(d+1)e} + 2\ln\left[\frac{r_m^2-r^{*2}}{r_m^2-2^{\frac{1}{3}}}\right]+1\right\}, \quad r^*_{spl} < r^* < r^*_{\max} \qquad (8)$$

임의의 분자 $P_i$, $i$=1,2,3...,N을 생각할 때, $P_i$의 질량을 $m_i$라고 하면, 임의의 분자 $P_i$의 상호작용력은 다음과 같은 뉴우톤의 운동방정식에 의해 표현되며 초기 위치와 속도를 가지고 시간의 경과에 따라 변화된 새로운 위치와 속도를 구하게 되는 것이다.

식 (9)의 2차 상미분 방정식을 풀기 위해 수치해석법을 사용하는데, 이러한 수치해석법을 보통 time stepping 알고리듬[6]이라 한다. 본 연구

$$\frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \sum_j(-\nabla\phi(\vec{r}_i,\vec{r}_j)) \qquad (9)$$

본 연구에서는 식 (9)을 해석하는데 분자 동역학 분야에서 널리 알려진 Leap-Frog 알고리듬을 사용하였다.[2]

$$\vec{v}_{i,1/2} = \vec{v}_{i,0} + \frac{(\triangle t)}{2}\vec{a}_{i,0}, \qquad (10)$$

$$\vec{v}_{i,k+1/2} = \vec{v}_{i,k-1/2} + (\triangle t)\,\vec{a}_{i,k}, \quad k=1,2,3,... \qquad (11)$$

$$\vec{r}_{i,k+1} = \vec{r}_{i,k} + (\triangle t)\,\vec{v}_{i,k+1/2}, \quad k=0,1,2,... \qquad (12)$$

여기서 $\triangle t$는 시간 간격을, $\vec{r}_{i,k}$, $\vec{v}_{i,k}$, $\vec{a}_{i,k}$는 각각 임의의 시간에서 임의의 분자 $P_i$의 위치, 속도, 가속도를 나타낸다. 주어진 시간에서 초기상태로 시작해서 시간이 조금 흐른 후의 상태를 식 (10)~(12)을 이용해서 계산하고, 또 그 다음 단계에서의 상태를 계산하는 방식으로 일정한 시간 간격을 두고 그 시간에서의 상태를 연속적으로 구하게 된다.

### 2.2 파괴역학 이론

#### 2.2.1 응력확대계수

응력확대계수를 계산하는 데에는 유한요소법과 같은 다양한 해석적 방법들을 사용하여 계산할 수 있다. 분자 동역학에서는 에너지 방출률과 포텐셜 에너지와의 관계를 통해 응력확대계수를 구할 수 있다.[7]

$$G_{MD} = \frac{\triangle\phi}{\triangle a} = \frac{\phi_2-\phi_1}{a_2-a_1} \qquad (13)$$

여기서 $\triangle\phi$와 $\triangle a$는 각각 포텐셜 에너지의 차와 균열길이의 차를 나타내며, $G_{MD}$는 분자 동역학을 이용하여 계산한 에너지 방출률로 단위는 무차원이다. 한편 균열 첨단주변의 탄성응력장의 강도를 나타내는 응력확대계수와 에너지 방출률과의 관계는 다음 식과 같다.

$$G = \frac{K_I^2}{E} \qquad (14)$$

여기서 $E$는 탄성계수를 나타내며, $K_I$은 Mode I 에서의 응력확대계수이다. 식 (13)에서 구해진 에너지 방출률을 다시 차원화시켜 식 (14)를 통해

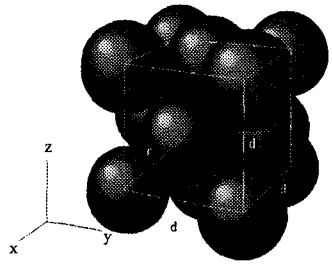


**Fig. 1** Face-centered cubic(FCC) crystal structure

다음과 같이 응력확대계수를 구할 수 있다.

$$K_I = \sqrt{EG} \tag{15}$$

2.2.2 소성영역의 분포

본 연구에서는 von Mises항복조건을 소성영역에 대한 판단 기준으로 사용하여 해석하였다.[7] 식 (16)에 Mode I 균열응력장을 대입하면 다음과 같다.

$$\sigma_1 = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos\frac{\theta}{2}\left(1+\sin\frac{\theta}{2}\right) \tag{16}$$

$$\sigma_2 = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} \cos\frac{\theta}{2}\left(1-\sin\frac{\theta}{2}\right)$$

$$\sigma_3 = \nu(\sigma_1+\sigma_2) = 2\nu\frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}}\cos\frac{\theta}{2},\ \text{또는}\ \sigma_3 = 0$$

평면응력 상태인 경우 $\sigma_3 = 0, \tau_{\max} = \sigma_1/2$ 이며, von Mises 기준에 위 식을 대입하여 Mode I 에서의 소성영역의 반지름 $r_p$을 구할 수 있다.

$$r_p = \frac{1}{4\pi}\left(\frac{K_I}{\sigma_Y}\right)^2\left(\frac{3}{2}\sin^2\theta + 1 + \cos\theta\right) \tag{17}$$

## 3. 시뮬레이션

시뮬레이션에 사용된 재료는 구리이며 구리의 결정구조는 면심입방(face-centered cubic) 구조이다. 구리로 이루어진 시편들은 분자수가 서로 다른 single-edge crack 시편, double-edge crack 시편, center crack 시편 그리고 inner crack 시편으로 구성되었다.

**Table 1** Comparison of the stress intensity factors obtained by analytical method($K_{th}$) and the present method($K_{md}$) for single-edge crack of different number of molecules

| SIF \ Number of Molecular | 6375개 | 13493개 |
|---|---|---|
| $K_{md}/K_{th}$ | 88% | 95% |

3.1 응력확대계수 해석

본 연구에서 실시한 시뮬레이션의 타당성을 검증하기 위해 분자수가 각각 6375개와 13493개인 single-edge crack의 두 시편에 대한 응력확대계수를 계산하였다.[8] 시뮬레이션을 통해 구한 값과 이론값과의 비교를 위해서 응력 확대계수의 이론식으로는 다음식을 사용하였다.[9]

$$K_I = \sigma\sqrt{\pi a}F(a/b), \qquad [Pa\sqrt{m}] \tag{18}$$

$$F(a/b) = \sqrt{\frac{2b}{\pi a}\tan\frac{\pi a}{2b}} \times \frac{0.752+2.02(a/b)+0.37\left(1-\sin\frac{\pi a}{2b}\right)^3}{\cos\frac{\pi a}{2b}}$$

여기서 a는 균열의 길이이며, b는 시편의 폭이다.

Table 1에서와 같이 분자수가 6375개인 경우 이론값의 88% 정도의 값을 나타내었으나, 분자수가 13493개인 경우에는 이론값의 95% 정도의 값을 나타내었다. 즉, 분자수가 많은 시뮬레이션의 결과가 이론값에 더 가깝다는 것을 알 수 있었다.

3.2 소성영역 분포계산

Single-edge crack 시편에 대한 가상 인장실험을 하여 얻어진 포텐셜 에너지의 변화를 통해 소성영역을 구하였고, von Mises 항복조건에 의한 소성영역과 비교하여 보았다. 시편에 인장력이 작용하게 되면 그에 따른 에너지가 균열 주위에서 소성변형을 일으키는데 사용되게 된다. 따라서 공급된 에너지는 균열 주위에서 소성영역을 생성시키

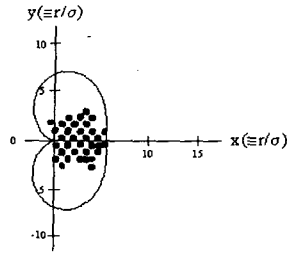


**Fig. 2** Comparison of the plastic zone obtained by von Mises yield criterion and the present method at $t^* = 40\triangle t^*$ where the solid line denotes the plastic zone by von Mises criterion and solid circles for molecular dynamics simulation

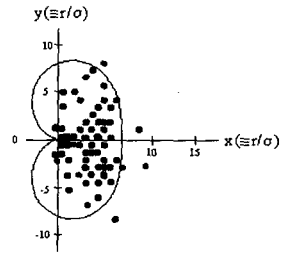


**Fig. 3** Comparison of the plastic zone obtained by von Mises yield criterion and the present method at $t^* = 80\triangle t^*$ where the solid line denotes the plastic zone by von Mises criterion and solid circles for molecular dynamics simulation

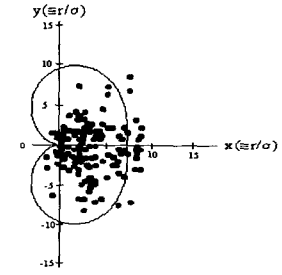


**Fig.4** Comparison of the plastic zone obtained by von Mises yield criterion and the present method at $t^* = 100\triangle t^*$ where the solid line denotes the plastic zone by von Mises criterion and solid circles for molecular dynamics simulation

는데 사용되므로 에너지의 변화를 고려하여 소성영역을 예측할 수 있게 된다.

본 연구에서는 전체 포텐셜 에너지 값의 80% 정도에 달하는 포텐셜 에너지 값을 가지는 분자들을 사용하여 소성영역을 구해 보았다. 여기서 80%라는 수치는 시뮬레이션에 사용되는 시편의 분자수에 따라 그 값이 달라질 수 있다.

최근 보고에 의하면 1억개의 분자를 사용한 시뮬레이션[10]에서는 97%에 달하는 포텐셜 에너지 값을 사용하기도 하였다. 본 연구에서는 80%정도에 달하는 포텐셜 에너지 값을 사용하였을 때 비교적 바람직한 결과를 얻을 수 있었다.

Fig. 2~4에 시뮬레이션을 통해 전체 포텐셜 에너지 값의 80% 정도에 달하는 포텐셜 에너지 값을 가지는 분자들을 time step별로 나타내었으며 이론값과 비교하였다. 그림에서 볼 수 있듯이 소성영역의 분포가 von Mises 항복조건에 의한 소성영역 크기와 유사하게 나타남을 알 수 있다.

### 3.3 전위이동 시뮬레이션

시뮬레이션에 사용된 시편은 균열의 모양이 single-edge crack과 double-edge crack, center crack 그리고 inner crack인 시편을 사용하였다.

Fig. 5~8에는 서로 다른 4가지 형태의 crack에 대한 전위의 움직임을 보여준다. 그림에서는 균열을 중심으로 윗부분에 해당하는 분자들의 움직임만을 표시하였는데 이는 균열을 중심으로 위 · 아래 서로 대칭인 경향을 보이기 때문이다.

전체적인 이동 경향을 살펴 볼 때 분자들이 그리는 궤적은 앞에서 해석한 소성영역과 유사한 모양을 나타내고 있다. Single과 double인 경우 균열면에서 대각선 방향인 B 방향으로의 전위이동이 가장 크며, A와 같이 균열 선상에 위치한 분자는 균열의 성장에 따라 같은 방향으로 이동 하지만 소성변형에 의하여 이동 거리는 그리 크지 않다. D와 E는 균열의 바로 윗면에 위치한 분자들로 균열의 개구량(COD)의 증가에 따라 그 값이 변하게 된다. Center와 inner의 경우에서도 C와

**Table 2** Comparison of distances of dislocation emission near crack tip for various crack types

| $r^*$ | A | B | C | D | E |
|---|---|---|---|---|---|
| single | 3.5267 | 7.3136 | 2,5403 | 3.7705 | 5.9621 |
| double | 4.1828 | 5.6692 | 2.3862 | 3.5731 | 4.187 |
| center | 3.8744 | 4.6551 | 5.6728 | 3.2186 | N/A |
| inner | 4.2649 | 4.8352 | 5.3357 | 3.1243 | N/A |

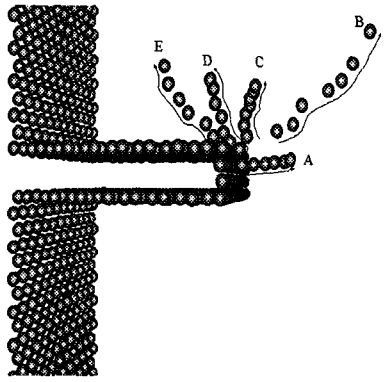


**Fig. 5** Dislocation emission of single-edge crack

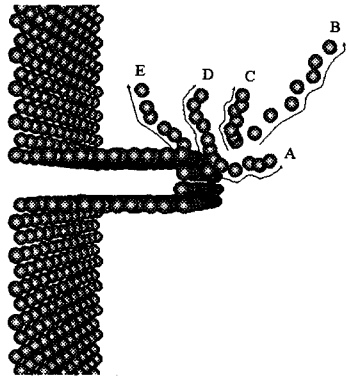


**Fig. 6** Dislocation emission of double-edge crack

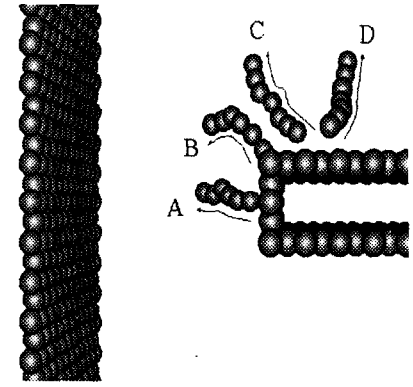


**Fig. 7** Dislocation emission of center crack

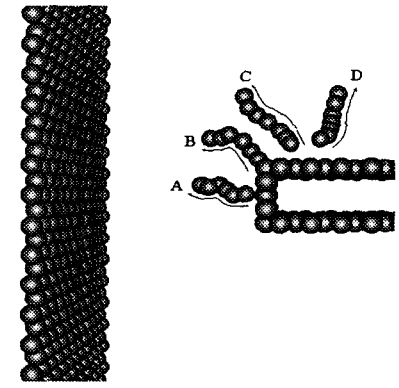


**Fig. 8** Dislocation emission of inner crack

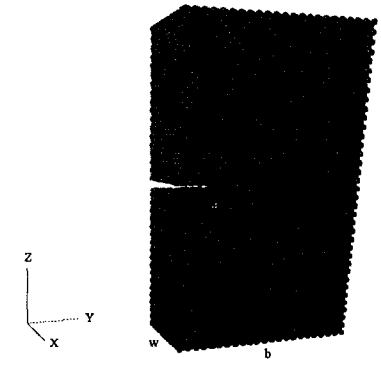


**Fig. 9** The 3D configuration of the model with a single-edge crack at the initial state

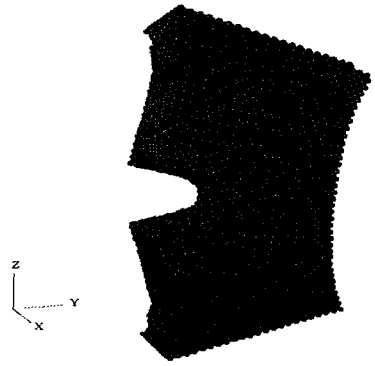


Fig. 10 Deformed configuration of the specimen at $t^* = 600 \triangle t^*$

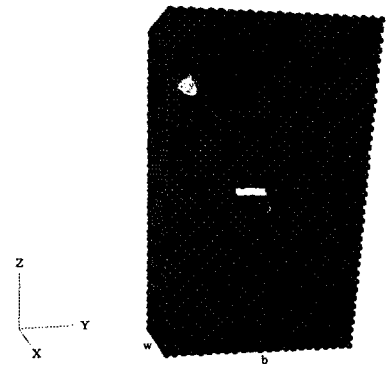


Fig. 13 The 3D configuration of the model with center crack

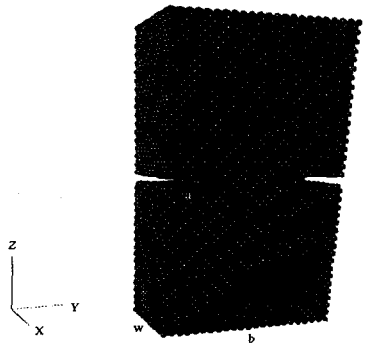


Fig. 11 The 3D configuration of the model with double-edge crack

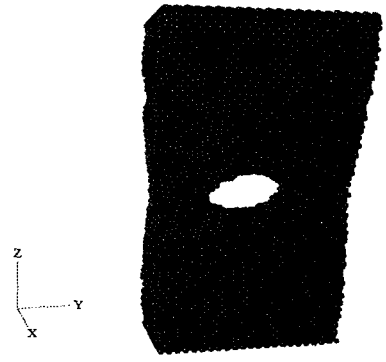


Fig. 14 Deformed configuration of the specimen at $t^* = 400 \triangle t^*$

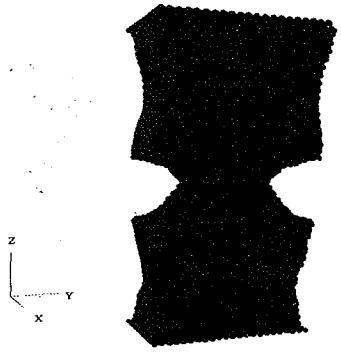


Fig. 12 Deformed configuration of the specimen at $t^* = 600 \triangle t^*$

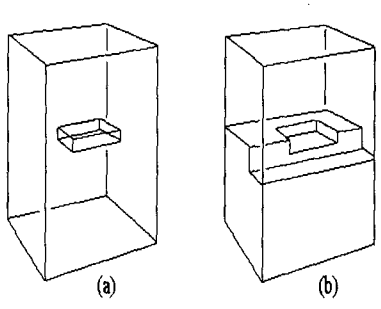


Fig. 15 A schematic of an inner crac

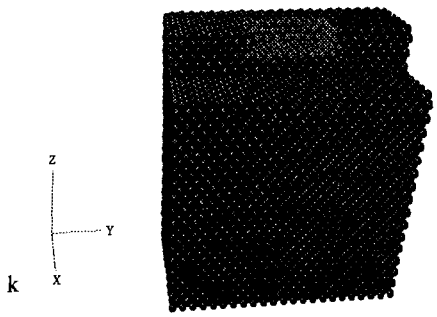


**Fig. 16** The 3D configuration of the model with inner crack

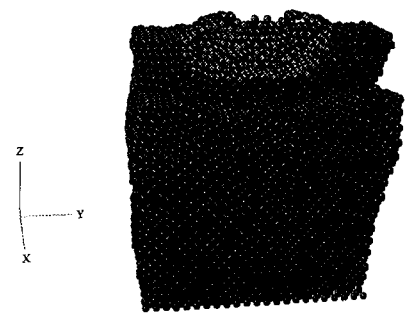


**Fig. 17** Deformed configuration of the specimen at. $t^* = 400 \triangle t^*$

같이 균열면에서 대각선 방향으로의 이동이 가장 큼을 알 수 있으나, D와 같이 균열의 윗면에 위치하는 분자는 이동거리가 그리 크지 않다.

한편 전위의 전체 이동거리는 Fig. 5~8에서와 같이 매 time step마다 전위의 위치를 추적하여 그 이동거리를 계산하였고, 이렇게 step별로 계산한 이동거리를 모두 합하여 전체 이동거리를 계산하였다.

$$r_i^* = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} \quad (19)$$

$$r^* = \sum_{i=1} r_i^* \quad (20)$$

여기서 $r^*$는 무차원된 거리를 나타낸다.

이렇게 계산한 각 방향에 대한 전위의 전체 이동거리를 Table 2에 나타내었다. Fig. 5~8에서와 같이 대각선 방향인 B와 C의 전위이동이 가장 큼을 볼 수 있다.

Fig. 9~17에는 서로 다른 균열의 형태를 가지는 4가지 시편에 대하여 가상 인장시험을 통한 시편의 변화되는 모습을 time step별로 나타내고 있다.

Inner crack을 가지는 시편은 Fig. 15(a)와 같다. 균열면을 중심으로 상·하 대칭인 구조이므로 한쪽 방향(아래쪽)에 대해서만 고려하였으며, 균열이 내부에 위치하고 있으므로 인장 시험에 따른 균열의 성장과정을 관찰하기 위하여 Fig. 15(b)와 같이 전방의 분자들을 제거하였다.

## 4. 결 론

거시적인 관점에서 재료의 파괴와 균열의 진행과 같은 재료 거동을 분자 동역학 모델링 기법을 사용하여 정성적인 측면에서 해석하였으며, 미시적인 관점에서 균열 첨단에서의 슬립면에 대한 해석을 소성변형에 의해 수반되는 전위들의 움직임을 중심으로 해석하였다. 또한, EAM 포텐셜 에너지 함수를 사용하여 single-edge crack의 시편에 대한 응력확대계수를 이론값과 시뮬레이션에 의한 값과 비교하여 타당성을 검토하였으며, 포텐셜 에너지의 변화를 통해 해석한 소성영역을 이론값과 비교하여 타당성을 검토하였다. 이에 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

(1) 시뮬레이션의 타당성을 검토하기 위해 분자수가 서로 다른 single-edge crack을 가지는 시편에 대한 응력확대계수를 시뮬레이션에 의하여 구한 값과 이론값과 비교하여 보았다. 분자수가 6375개와 13493개인 두 시편에 대해 각각 이론값의 88%와 95%인 값을 나타냈다.

(2) Single-edge crack을 가지는 시편을 가상 인장 실험하여 얻어진 포텐셜 에너지의 변화를 통해 소성영역을 구하였고, 이론식에 의한 소성영역과 비교해 보았다. 각 시간 간격에 대한 소성영역의 값은 시뮬레이션값과 이론값에서 서로 유사하게 나타났으며, 따라서 본 시뮬레이션이 정성적으로 타당함을 알 수 있었다.

(3) 미시적으로 재료가 소성변형을 일으킬 때 방출하는 전위를 균열 첨단주위에 대해 해석하였다. 전위가 움직이는 정도를 통해 전위가 더 잘

움직이는 면과 방향, 즉 슬립면과 슬립방향을 해석하였고, 균열의 성장과 파괴에 관하여 정성적인 측면에서 모사할 수 있었으며, 그 결과는 일반적인 파괴역학 측면에서 볼 때 타당함을 알 수 있었다.

## 후 기

본 연구는 학술진흥재단 '98 자유 공모 (1998--001-E00161) 연구비에 의하여 연구되었음.

## 참고 문헌

(1) William, D. C., 1994, *Materials Science and Engineering*, Wiley & Sons, Inc.

(2) Greenspan, D., 1991, *Quasi-Molecular Modelling*, World Scientific Lecture No- tes in Physics-Vol. 44, Singapore.

(3) Wagner, N. J., Holian, B. L. and Voter, A. F., 1992, "Molecular Dynamics Simulation of Two-Dimensional Materials at High Strain Rates," Phy. Rew. A, Vol. 45, No. 12, pp. 8457~8470.

(4) Holian, B. L., 1991, "Effects of pairwise versus many-body forces on high-stress plastic deformation", Phy. Rew A, Vol. 43, No. 6, pp. 2655~2661.

(5) Rapaport, D. C., 1995, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press.

(6) Lloyd Fosdick, 1995, *Molecular Dynamics: An Introduction*, HPSC Group of the University of Colorado.

(7) Gdoutos, E. E., 1993, *Fracture mechanics*, Kluwer Academic Publishers.

(8) Choi, D. K., Kim, J. W., 1998,"Calculation of Stress Intensity Factors Using Three-Dimensional Molecular Dynamics Simulation," METALS AND MATERIALS, Vol. 4, No. 4, pp. 920～924.

(9) Walter, D. P., 1994, *Formulas for stress, strain and structural matrices*, Wiley & Sons, Inc.

(10) Farid, F. A., 1997, "Portrait of a Crack: Rapid Fracture Mechanics Using Parallel Molecular Dynamics," IEEE Computational Science & Engineering, pp.150～154.