

전위 및 공공을 고려한 고변형률 변형에 대한 재료 시뮬레이션

최 덕 기* · 유 한 규*

(2004년 3월 5일 접수, 2004년 7월 7일 심사완료)

A Material Simulation of High-Strain-Rate Deformation with Dislocations and Vacancies

Deok-Kee Choi and Han-Kyu Ryu

Key Words: Molecular Dynamics(분자동역학), Defects(결함), Dislocation(전위), Vacancy(공공), Stored Energy(저장에너지), High-Strain-Rate Deformation(고변형률 변형)

Abstract

This paper addresses a theoretical approach to calculate the amount of the stored energy during high strain-rate deformations using atomistic level simulation. The dynamic behavior of materials at high strain-rate deformation are of great interest. At high strain-rates deformations, materials generate heat due to plastic work and the temperature rise can be significant, affecting various properties of the material. It is well known that a small percent of the energy input is stored in the material, and most of input energy is converted into heat. However, microscopic analysis has not been completed without construction of a material model, which can simulate the movement of dislocations and vacancies. A major cause of the temperature rise within materials is traditionally credited to dislocations, vacancies and other defects. In this study, an atomistic material model for FCC such as copper is used to calculate the stored energy.

1. 서 론

고속으로 물체가 충돌하는 경우에는 고변형률 변형이 일어나게 되며 이는 실험실에서 볼 수 있는 저변형률 변형, 또는 정하중(static loads)때와는 전혀 다른 경향을 보이는 재료의 동적인 거동(dynamic behaviors)이 일어나게 된다. 고변형률 변형은 폭발 용접(explosive welding), 합판법(cladding), 판금, shock consolidation, shock synthesis 등과 같은 다양한 산업 분야에서 적용되고 있으며,^(1,2) 일반적인 충격 변형에서 변형률 속

도는 $10^5 \sim 10^8 \text{s}^{-1}$ 의 크기를 갖는다.⁽³⁾

재료는 변형 시에 열을 발생시킨다. 고변형률 변형 하에서는 소성일(plastic work)의 상당량이 열로 변환되고, 하중의 작용 시간이 매우 짧기 때문에 재료 내에서 열 확산 거리가 작게 되어 단열과정(adiabatic process)으로 간주될 수 있으므로⁽⁴⁾ 순간적으로 재료의 온도를 크게 상승시키는 결과를 가져오게 된다. 이와 같은 높은 온도 상승은 변형 중에 입력되는 에너지의 상당부분이 열로 변환되어 재료를 고온상태로 변화시킨다고 추론할 수 있다. 한편, 고변형률 변형 과정에서, Ta-2.5%, CP-Ti, AL-6XN 스테인리스 강과 같이 다양한 재료에서 발생하는 온도 상승은 수 백도에 이르며,^(1,4) 이러한 온도 상승은 재료의 물성에 큰 영향을 미치기 때문에 재료 내부의 온도 상승을 계산하는 것은 매우 중요한 문제가 된다. 온도 상승으로 인한 재료의 동적 물성의 변화는 미세 균열, 결정의 크기, 상 변화 등과 같은 재료의

* 책임저자, 회원, 단국대학교 기계공학과

E-mail : dkchoi@dankook.ac.kr

TEL : (02)709-2830 FAX : (02)709-2560

* 단국대학교 기계공학과 대학원

미세구조(microstructure)를 변화시켜 재료의 동적 거동에 중요한 영향을 미치는 열 연화(thermal softening)를 발생시키기 때문이다.

그러므로 고변형률 변형에서 재료의 동적 거동을 정확하게 이해하기 위해서는 먼저 재료 내부에서 일어나는 미세구조의 변화를 파악하는 것이 필수적이다. 고변형률 변형 시에는 빠른 전위의 움직임으로 인하여 공공이 생성되고 소멸되기를 반복하게 되며, 이러한 전위와 공공의 존재는 소성일이 열로 변환되는 과정에 직접적으로 영향을 미치게 된다. 즉, 변형시에 소성일에서 전위와 공공의 생성에 사용되는 에너지를 차감한 만큼이 실제로 재료 내부의 온도를 상승시키는데 사용된 에너지라고 볼 수 있다. 그러므로 재료 내부의 상승 온도를 예측하기 위해서는 전위와 공공으로 인한 저장 에너지가 정확하게 계산되어야 한다.

최근까지 다양한 미세구조를 가진 재료의 내부에서의 저장 에너지에 관한 연구가 활발히 진행되고 있으며,^(5~7) 많은 실험 결과로부터 고변형률 변형의 경우에는 소성일의 거의 전부가 열로 변환된다는 가설을 실험적으로 입증하였다.^(8~10)

전위와 공공에 의한 저장 에너지를 이론적으로 계산하기 위해서는 재료를 연속체로 간주한 연속체 모델이나 현상학적 모델보다는 전위와 공공 자체가 재료 내부 원자들의 움직임에 따른 미시적인 결합이므로 거시적 방법보다 원자 단계의 접근 방법으로 보다 잘 설명될 수 있다고 생각된다.

본 연구에서는 면심입방격자(FCC) 구조를 가지는 구리 재료가 고변형률 변형 과정을 거치면서 발생된 전위와 공공을 분자 모델로 구성하여 분자동역학(molecular dynamics, MD) 모사를 통하여 재료 내부의 결합(전위, 공공)이 저장 에너지에 미치는 영향을 조사하였으며, 소성일의 열로의 변환과 직접적인 관련이 있는 저장 에너지를 계산하고 변형 시에 소성일이 열로 변환되는 변환 비율이 다른 실험 결과들과 일치하는 90% 이상 된다는 것을 알 수 있었으며, 이를 통하여 본 연구에서 제안된 고변형률 변형에 대한 재료의 미시적 모델의 타당성을 확인 할 수 있었다.

2. 해 석

2.1 저장 에너지(stored energy)

변형시에 소성일은 열로 변환되거나 각종 결합

(전위, 공공)내의 저장 에너지 형태로 변환되고, 이 과정은 열역학 제1법칙에 의해서 다음과 같은 식으로 나타낼 수 있다.

$$\sigma_T d\epsilon_T = \rho c_v d\theta + dE_s \quad (1)$$

여기서, σ_T 는 진응력, ϵ_T 는 진변형률, ρ 는 재료 밀도, c_v 는 일정 부피에서의 비열, $d\theta$ 는 재료 내의 온도 상승, dE_s 는 결합으로 인한 저장 에너지를 의미한다. 식 (1)에서 좌변은 응력과 변형률의 곱으로 표현되는 소성일이며, 우변의 첫째 항은 재료의 온도 변화, 그리고 두 번째 항은 전위와 공공에 의한 저장 에너지를 의미한다. 재료 내에 저장되는 에너지는 재료의 내부 결합 즉, 전위와 공공에 저장되는 에너지를 계산함으로써 얻을 수 있다. 전위의 밀도를 고려한 단위 부피 당 임의로 분포된 전위의 에너지는 다음과 같이 주어진다.⁽⁴⁾

$$E_s = \frac{\rho_d \mu b^2}{4\pi} \ln \frac{2}{b\sqrt{\rho_d}} \quad (2)$$

여기서 ρ_d 는 전위 밀도, μ 는 전단 계수, b 는 Burgers 백터이다. 식 (2)에서 주어진 거시적 관점에서 도출된 저장 에너지에 대한 식은 곧바로 미시적 모델에 사용할 수 없으므로, 본 연구에서는 식 (2)와 동치가 되는 전위와 공공이 포함된 재료의 분자 모델을 구성하고 분자동역학을 사용하여 저장 에너지를 계산하였다.

2.2 변환인자(conversion factor)

변형시 일어나는 온도 상승 정도를 나타내기 위해서 입력된 에너지와 변형 중에 열로 방출된 에너지의 비를 계산하는 것이 편리하며 이를 변환 인자로 정의한다. 식 (1)로부터 재료 내의 온도 상승은 다음과 같이 표현 될 수 있다.

$$\begin{aligned} d\theta &= \frac{1}{\rho c_v} (\sigma_T d\epsilon_T - dE_s) \\ &= \frac{\sigma_T d\epsilon_T}{\rho c_v} \left(1 - \frac{1}{\sigma_T} \frac{dE_s}{d\epsilon_T} \right) \\ &= \frac{\sigma_T d\epsilon_T}{\rho c_v} \eta \end{aligned} \quad (3)$$

여기서, 변환인자 n 는 다음과 같이 정의된다.

$$\eta \equiv 1 - \frac{1}{\sigma_T} \frac{dE_s}{d\epsilon_T} \quad (4)$$

변형 과정에서의 온도 상승은 식 (3)에 적분을 취함으로써 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\Delta\theta = \int d\theta = \frac{\eta}{\rho c_v} \int_0^{\epsilon_T} \sigma_T d\epsilon_T \quad (5)$$

여기서 변환 인자 n 를 알 수 있다면 식 (5)로부터 재료 내의 온도 상승을 예측할 수 있다.

본 연구에서는 변환 인자를 분자동역학을 사용한 재료 모사로부터 구한 포텐셜 에너지를 사용하여 구하게 되며 자세한 과정은 뒤에서 설명된다. 한편, 대부분의 금속에 대해서 소성일이 전위와 공공과 같은 내부 결함에 축적되는 비율은 10% 미만으로 나타나며, 여러 가지 실험을 통해서 변환인자는 약 0.9 이상으로 보고되고 있다.^(1,4,5)

2.3 분자동역학

분자동역학의 기본 개념은 분자 사이의 거리가 충분히 가까워지면 두 분자사이에는 서로 미는 힘이 작용하게 되고, 거리가 멀어지게 되면 서로 당기는 힘이 작용하는 것을 이용하여 재료를 구성하고 있는 전체 분자들에 대해서 상미분방정식 형태로 표현되는 뉴턴의 운동방정식을 계산하는 것이다.⁽¹²⁾

분자 이론에 의하면 분자간에 작용하는 힘이나 에너지는 포텐셜 함수로 표현된다. 연속체에 기초를 둔 해석 방법과 달리 분자 모델에서는 분자 상호간 포텐셜 함수만을 사용하여 저장 에너지를 계산하게 된다. 본 논문에서는 식 (6)과 같이 분자사이의 거리로 표현되는 Lennard-Jones 포텐셜 함수를 사용하였다.⁽¹³⁾

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

여기서, ϕ 는 포텐셜 에너지, ϵ 은 실험적으로 얻어지는 최소에너지, σ 는 포텐셜 에너지가 최소가 되는 분자간의 거리, r_{ij} 는 분자 i 와 j 사이의 거리를 의미한다. 면심입방격자 구조인 구리에 대해

서 $\epsilon = 0.4093eV$, $\sigma = 2.3377A$ 이다.⁽¹³⁾

식 (6)에서 주어진 포텐셜 에너지 함수는 매우 작은 수치로 표현되기 때문에 큰 계산 오차가 발생한다. 따라서 본 연구에서는 식 (7)에서와 같이 거리와 시간에 대해서 무차원화된 매개변수를 사용하였다.

$$R_{ij} \equiv \frac{r_{ij}}{\sigma}, \quad T \equiv \frac{t}{\sqrt{m\sigma^2/\epsilon}} \quad (7)$$

한편 분자동역학 재료 모사에서는 사용되는 분자 수에 따라 크기 효과(size effect)가 발생한다. 이와 같은 크기 의존성을 최소화하기 위하여 주기경계조건을 사용하였다. Fig. 1은 2차원에서 주기경계조건을 나타낸다. Fig. 1과 같이 모사 하고자 하는 분자 모델 주위에 동일한 분자 배치를 이루며 분자의 속도와 가속도가 같도록 가상셀(cell)을 설정한다. 따라서 임의의 분자에 대해서 영향 반경 r_{cut} 에 포함되는 분자는 모사 하고자 하는 분자 모델 내에 존재 할뿐만 아니라 주위 셀에도 존재하게 되며, 분자가 주기경계를 벗어나게 되면 반대편 주기경계 안으로 같은 속도와 가속도를 가지고 들어오게 됨으로써 크기 효과를

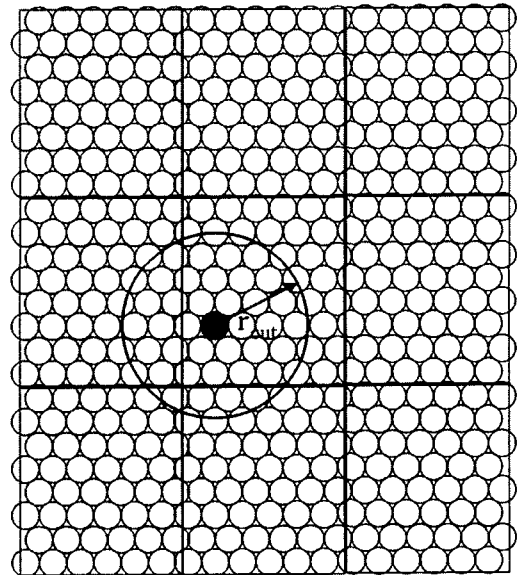


Fig. 1 Schematic of the periodic boundary and cut-off radius

최소화시킬 수 있다.

2.4 저장 에너지 계산

식 (4)에서 주어진 변환 인자에 관한 식을 분자동역학에 의한 재료의 포텐셜 에너지와 연관시키기 위해서 식 (4)를 다음과 같이 다시 표기하기로 한다.

$$\eta = 1 - \frac{1}{\sigma_T} \frac{dE_s}{d\varepsilon_T} = \frac{\sigma_T d\varepsilon_T - dE_s}{\sigma_T d\varepsilon_T} \quad (8)$$

또한 식 (1)을 사용하여 식 (8)은 다음과 같이 최종적으로 나타낼 수 있다.

$$\eta = \frac{\rho C_v d\theta}{\sigma_T d\varepsilon_T} \quad (9)$$

여기서 분모는 소성일, 분자는 재료의 온도 상승을 의미하게 된다. 따라서 식 (9)로부터 변환 인자 η 는 변형시 재료의 총 변형 에너지와 그 에너지가 열로 변환된 비율로 이해될 수 있다.

전위와 공공으로 인한 저장 에너지를 계산하기 위해서 본 연구에서는 두 가지 모델에 대해서 수치 모사를 수행하였다. 첫 번째 모델은 결함이 전혀 없는 완전한 시편이고, 다른 하나는 시편 내부에 전위와 공공이 임의로 분포되어 있는 모델이다. 전위와 공공으로 인한 저장 에너지는

Fig. 2에서 나타낸 것과 같이 두 시편의 총 포텐셜 에너지의 차이로써 다음과 같이 계산될 수 있다.

$$\Delta E_s = \Delta\phi = \phi_{ref} - \phi \quad (10)$$

여기서, ϕ_{ref} 는 결함이 없는 완전한 시편의 총 포텐셜 에너지, ϕ 는 전위와 공공이 존재하는 시편의 총 포텐셜 에너지이다.

식 (9)에서 정의된 변환 인자는 본 연구에서 수행한 두 시편의 포텐셜 에너지 차이를 이용하여 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\eta = \frac{\phi_{ref} - \Delta\phi}{\phi_{ref}} = 1 - \frac{\Delta\phi}{\phi_{ref}} \quad (11)$$

한편, 저장 에너지를 이용하여 전위와 공공이 존재하는 시편의 전위 밀도를 다음과 같이 계산할 수 있다.⁽¹¹⁾

$$\rho_d = \frac{\Delta\phi}{V_{mol} E_{ud}} \quad (12)$$

여기서, 본 연구에서 사용한 구리에 대한 몰부피는 $V_{mol} = 7.1120 \times 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$ 이고, 단위 길이에 대한 전위에 대한 에너지는 $E_{ud} = 5 \times 10^{-9} \text{ Jm}^{-1}$ 이다.

3. 재료 모사

3.1 재료의 분자동역학적 모델링

본 연구에서는 면심입방격자 구조를 가지는 구리를 Fig. 3과 같이 10080(42×12×20)개의 분자를 이용하여 3차원으로 구성하였다. 모델의 형상은 높이, 너비, 두께의 비율이 1 : 0.56 : 0.46으로 구성되었다. Fig. 3은 전위와 공공이 전혀 없는 모델이며, 주기경계는 실선으로 표시하였다. 초기 상태에서 모든 분자들은 이웃한 분자들과 평행 거리에 위치한다.

3.2 공공 모델링

고변형률 하에서 재료 내부에 발생하는 결함중의 하나인 공공이 저장 에너지에 미치는 영향을 계산하기 위하여 Fig. 3과 같은 초기 분자모델에

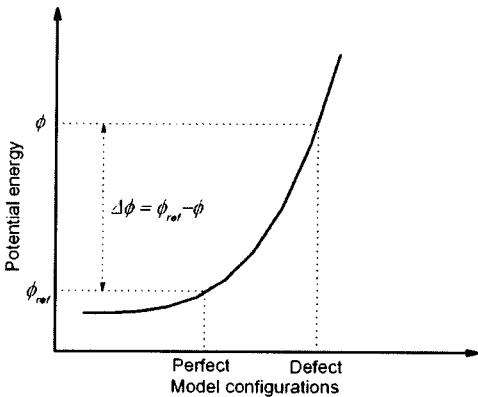


Fig. 2 The calculated stored energy is defined as a difference in the potential energy between two different configurations

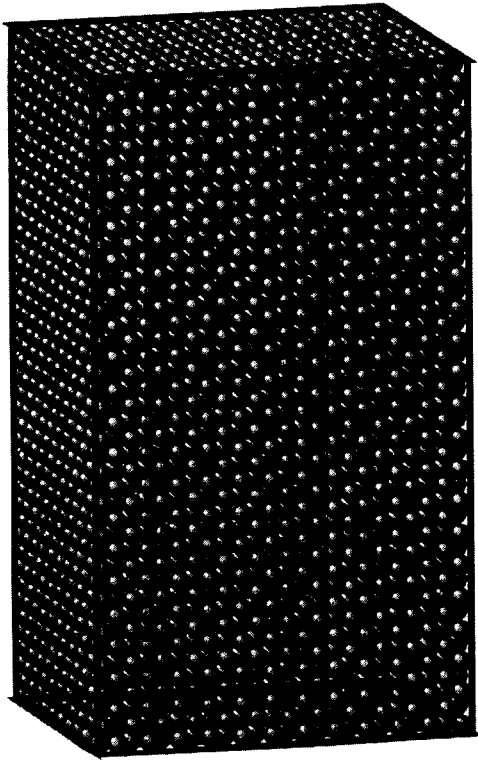


Fig. 3 Initial configuration of a 3D material model consisting of 10080(42×12×20) molecules with periodic boundaries

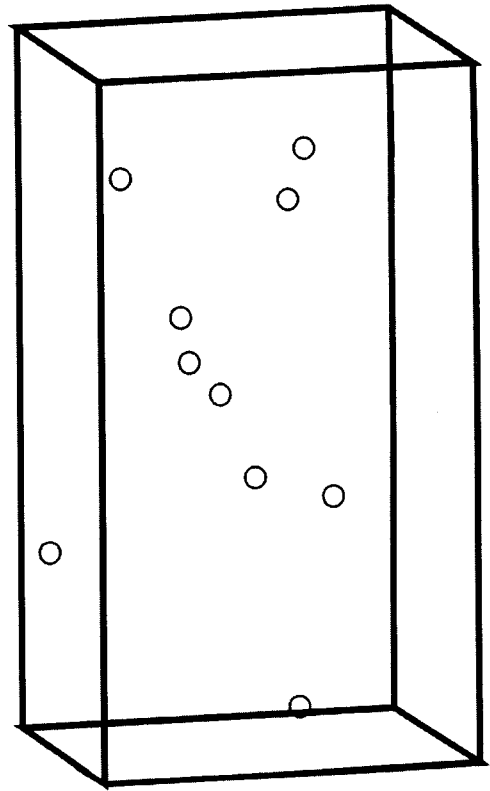


Fig. 4 The vacancies in the molecular model at $q=0.001$

서 임의의 위치에 존재하고 있는 분자를 제거함으로써 공간을 생성하였다. 본 연구에서 공간의 비율 q 는 모델을 구성하고 있는 전체 분자 수에 대한 제거된 분자 수의 비율로 정의하였다.

$$q = \frac{\text{The number of removed molecules}}{\text{The number of molecules of a model}} \quad (13)$$

고변형률 변형 과정에서 발생하는 공간의 비율은 약 0.1% 이하로 보고되고 있다.⁽³⁾ 따라서 본 연구에서는 공간의 비율을 $q=0.001$ 로 설정하였으며, 모델에서 제거된 분자들의 위치는 Fig. 4와 같다.

3.3 전위 모델링

고변형률하에서 재료 내부에 발생하는 결함중

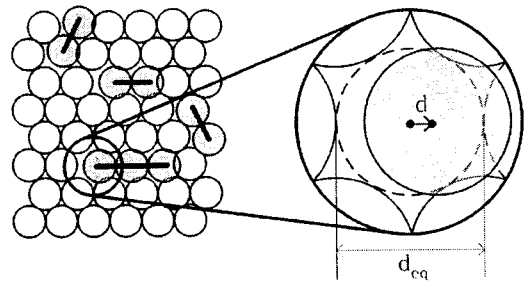


Fig. 5 Implementation of dislocations to molecular models

의 하나인 전위로 인한 저장 에너지를 계산하기 위하여 Fig. 3과 같은 초기의 완전한 분자모델에서 임의의 위치에 존재하고 있는 분자를 평형 위치에서 3차원 방향으로 일정한 거리 d 만큼 이동시켜서 전위를 생성하였다.

Fig. 5는 전위 생성 과정을 2차원으로 보여주고

있다. Fig. 5에서 d_{eq} 는 분자들의 평형 거리를 의미하고, d 는 전위를 이루고 있는 분자가 평형 위치에서 떨어진 거리를 뜻한다. 본 연구에서는 전위 거리를 평형 거리 d_{eq} 에 대해 평형 위치에서 떨어진 거리 d 의 비로 설정하였으며, 전위 거리 $d/d_{eq}=0.2$ 에 대해서 전위에 의한 저장 에너지를 계산하였다. 또한 최대 10개의 연속된 분자들이 전위를 형성할 수 있도록 설정하였으며, 그 전위 길이는 3차원에서 최대 10까지 임의의 길이로 설

정되었다.

전위의 비율 p 는 모델을 구성하고 있는 전체 분자 수에 대해서 전위를 형성하고 있는 분자 수의 비율로 정의하였다.

$$p = \frac{\text{The number of dislocation molecules}}{\text{The number of molecules of a model}} \quad (14)$$

본 연구에서는 $p=0.005, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2$ 에 대해서 모사를 수행하였다. 이와 같이 설정

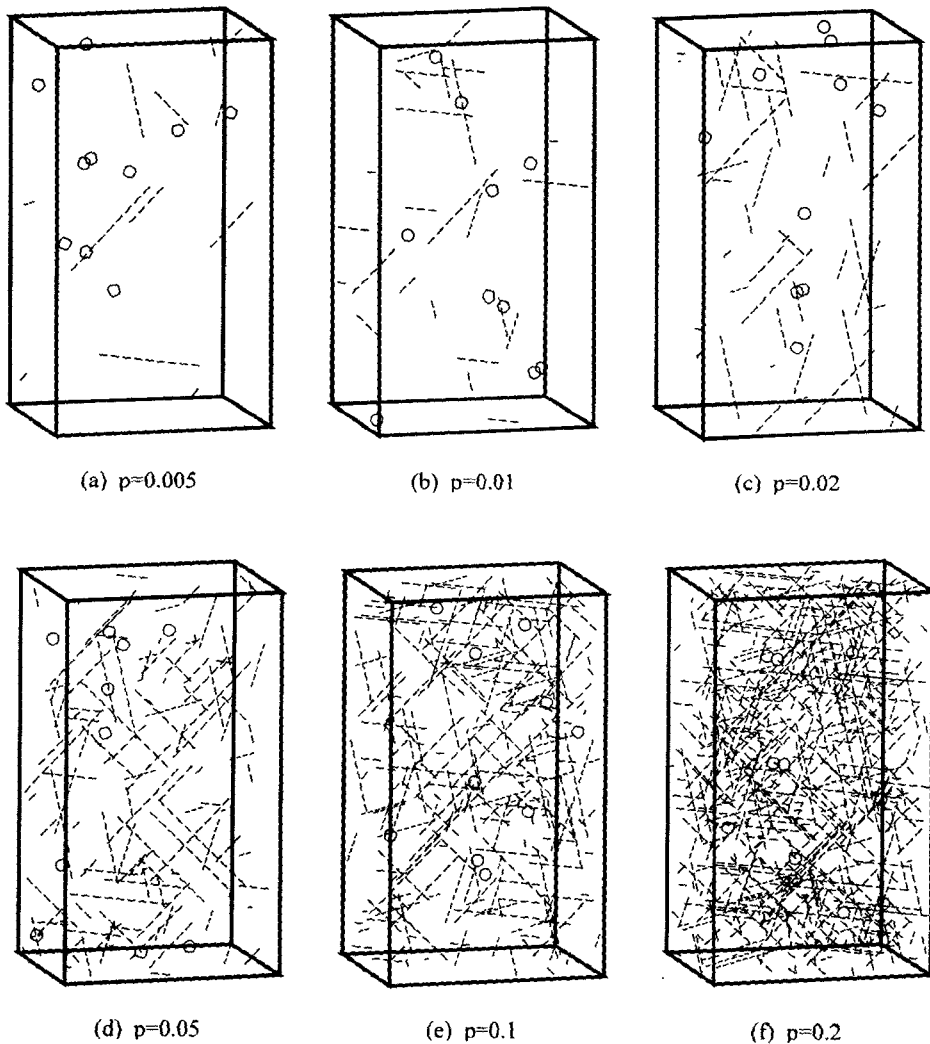


Fig. 6 The dislocation and vacancies in the molecular model at $p=0.005, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2, d/d_{eq}=0.2$ and $q=0.001$

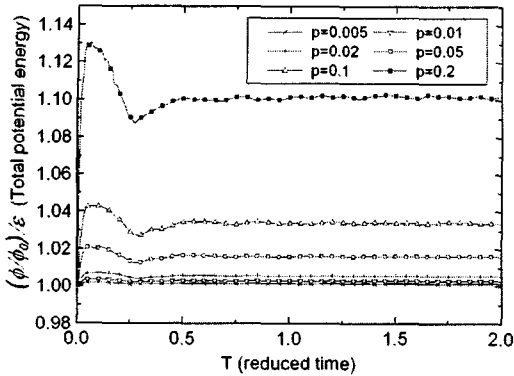


Fig. 7 Convergence of the total potential energy at $p=0.005, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2$, and $q=0.001$

된 전위와 공공은 Fig. 6과 같다.

3.4 포텐셜 에너지 수렴

본 연구에서는 각각의 모델에 대해서 $\Delta T=0.001$ 로 설정하여 $T=2$ 까지 모사를 수행하였으며, 일정한 공공의 비율 $q=0.001$ 과 다양한 전위 비율 p 를 포함하고 있는 모델에 대해서 전체 포텐셜 에너지를 계산하였다.

결합이 전혀 없는 초기 모델에서 각각의 분자들은 이웃한 분자들과 평형을 이루고 있지만, Fig. 6과 같이 전위와 공공을 포함하고 있는 모델에서는 결합으로 인해 발생된 불균형을 해소키는 방향으로 각각의 분자들에 힘이 작용하게 된다. 이와 같이 결합으로 인해 발생된 불안정한 시스템을 분자동역학 모사를 통하여 각각의 모델에서 전체 포텐셜 에너지 변화가 0.05% 이내로 수렴하는 안정된 모델을 얻었다. Fig. 7은 주어진 공공의 비율과 각각의 전위 비율에 대해서 전체 포텐셜 에너지의 수렴 과정을 나타낸다. 이와 같이 전체 포텐셜 에너지를 수렴시키는 과정은 정확한 저장 에너지를 계산하는데 중요한 요소가 된다.

3.5 전위와 공공에 의한 저장에너지 계산

본 연구에서는 공공의 비율 $q=0.001$ 과 각각의 전위 비율 p 에 대하여 저장 에너지를 계산하였으며, 계산 결과는 Table 1과 같다. 본 연구에서 설정한 전위 비율 p 에 대한 전위 밀도를 식 (12)에 의해 계산한 결과 Table 1에서 보는 바와 같이

Table 1 The calculated store energy $\Delta\phi$, the dislocation density ρ_d and conversion factor η at various dislocation ratios

p	$\Delta\phi(eV)$	$\rho_d(10^{12} \times m^{-2})$	η
0.005	-227.21	0.1921	0.9967
0.01	-324.63	0.3950	0.9952
0.02	-510.61	0.7822	0.9925
0.05	-1204.78	2.2274	0.9823
0.1	-2262.37	4.4293	0.9668
0.2	-5547.67	11.2693	0.9185

약 $10^{12} \sim 10^{13} m^{-2}$ 의 범위 내에 존재하는 것을 알 수 있다. 이와 같은 전위 밀도는 변형 과정에서 생성되는 전위 밀도를 실험적으로 구한 결과와 일치한다.⁽³⁾ 또한 입력된 에너지가 열로 변환되는 비율을 뜻하는 변환 인자 η 를 계산하였으며 약 92%~99%의 결과를 얻을 수 있었다. 이와 같은 변환 인자 η 는 다양한 실험 조건의 응력-변형률 선도를 통하여 실험적으로 얻어지기 때문에 그 정확한 수치를 비교하기란 매우 어렵다. 다만 고변형률 변형 과정에서 전체적인 변환 인자 η 값이 약 90% 이상이라는 실험 결과들이 보고되고 있으며,⁽⁸⁻¹⁰⁾ 본 연구에서 분자동역학 재료 모사를 통해서 확인할 수 있었다.

4. 결론

고변형률 변형에서는 소성일이 열로 변환되는 정도가 높아져서 재료 내부의 온도가 큰 폭으로 상승하게 되며 금속에서는 소성일의 열로의 변환 비율이 90% 이상에 이른다는 사실이 실험적으로 확인되어 있다. 본 연구에서는 실험적으로 알려진 변환에 대한 재료 내부에서의 물리적 기구를 미시적인 모델을 사용하여 모사하였다.

Lennard-Jones 포텐셜을 사용한 분자 수준의 모델을 구성하고 분자동역학 기법을 이용하여 면심입방격자(FCC) 구조를 가지는 구리의 내부 결합 형태로 존재하는 전위와 공공이 저장 에너지에 미치는 영향을 조사하였으며, 결과적으로 입력 에너지가 열로 변환되는 비율을 계산하여 다음과 같은 결론을 얻을 수 있었다.

(1) 주기경계조건을 적용함으로써 비교적 적은 수의 분자로 이루어진 분자 모델을 이용하여 변형에 과정에서 발생하는 전위와 공공에 의한 저

장 에너지 계산을 수행할 수 있었다.

(2) 변형 과정에서 발생하는 전위와 공공을 분자동역학적으로 모델링하였으며, 실제 재료에 존재하는 0.1% 이하의 공공과 $10^{12} \sim 10^{13} m^{-2}$ 의 전위 밀도를 분자동역학 재료 모사를 통하여 계산할 수 있었다.

(3) 입력된 에너지가 열로 변환되는 비율을 의미하는 변환 인자가 약 92%~99%에 이르는 계산 결과를 얻을 수 있었다. 그 결과 소성일의 90% 이상이 열로 변환되는 사실을 확인하였고, 본 연구에서 제안된 고변형을 변형에 대한 미시적 재료 모델 구성이 타당함을 알 수 있었다.

후 기

본 연구는 2002년 단국대학교 교내 연구비로 지원되었습니다.

참고문헌

- (1) Meyers M. A., 1994, *Dynamic Behavior of Materials*, Wiley-interscience, New York.
- (2) Meyers, M. A., Xu, Y. B., Xue, Q., Perez-prado, M. T. and McNelley, T. R., 2003, "Microstructural Evolution in Adiabatic Shear Localization in Stainless Steel," *Acta Mater.*, Vol. 53, pp. 1307~1325.
- (3) Rohatgi, A. and Vecchio, K. S., 2002, "The Variation of Dislocation Density as a Function of the Stacking Fault Energy in Shock-Deformed FCC Materials," *Mater. Sci. Eng.*, A328, pp. 256~266.
- (4) Kapoor, R. and Nemat-Nasser, S., 1998, "Determination of Temperature Rise Using High Strain Rate Deformation," *Mech. Mater.*, Vol. 27, pp. 1~12.
- (5) Clarebrough, L. M., Hargreaves, M. E., Michell, D. and West, G. W., 1952, "The Determination of the Energy Stored in a Metal During Plastic Deformation," *Proc. R. Soc. Lond. A*, Vol. 215, pp. 507~524.
- (6) Stroh, A. N., 1954, "The Formation of Cracks as a Result of Plastic Flow," *Proc. R. Soc. Lond. A*, Vol. 223, pp. 404~414.
- (7) Oliferuk, W., Swiatnicki, W. A. and Grabski, M. W., 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) Nemat-Nasser, S., Guo, W. G. and Cheng, J. Y., 1999, "Mechanical Properties and Deformation Mechanisms of a Commercially Pure Titanium," *Acta Met.*, Vol. 47, pp. 3705~3720.
- (9) Nemat-Nasser, S., Guo, W. G. and Kihl, D. P., 2001, "Thermomechanical Response of AL-6XN Stainless Steel over a Wide Range of Strain Rates and Temperatures," *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 49, pp. 1823~1846.
- (10) Nemat-Nasser, S. and Issacs, J. B., 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) Clarebrough, L. M. et al., 1960, "Order-disorder Phenomena in α -Brass III. Influence of Plastic Deformation," *Proc. R. Soc.*, Vol. 257, pp. 363~385.
- (12) Deok-Kee Choi and Jih-Woon Kim, 2000, "A Study on Stress Intensity Factors and Dislocation Emission via Molecular Dynamics," *Transactions of the KSME A*, Vol. 24, No. 4, pp. 830~838.
- (13) Rapaport, D. C., 1995, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press, Cambridge.