

$\Sigma = 5$ (2 1 0) 결정립계를 포함한 구리 bicrystal 모재상 스크래칭에 관한 분자역학모사

김기정, 조민형, 장호(고려대학교 신소재공학과)

Molecular dynamics simulation of scratching a Cu bicrystal across a $\Sigma = 5$ (210) grain boundary

Ki Jung Kim, Min Hyung Cho, Ho Jang
Dept. of Advanced Materials Eng., Korea Univ. hojang@korea.ac.kr.

ABSTRACT

Molecular Dynamics(MD) method was used to investigate the change of friction force due to interaction between dislocations and a grain boundary when a Ni tip was scratched on a Cu bicrystal. The substrate comprised a Cu bicrystal containing a vertical $\Sigma = 5$ (210) grain boundary. The moving tip for scratching simulation was consisted of fixed Ni atoms emulating a rigid tip. The indentation depth was 3.6Å and the scratching was performed along <110>direction in the first grain. As the scratching was continued, nucleation and propagation of dislocations were observed. In the early stage, the grain boundary played as a barrier to moving dislocations and interrupting further dislocation movement with no dislocation resulting in no propagation across the grain boundary. As the Ni tip approached the grain boundary, dislocations were nucleated at the grain boundary and propagated to the second grain. However, stick-slip phenomena that were observed on a single crystal scratching were not observed in the bicrystal. And, instead, irregular oscillation of friction force was observed during the scratching due to the presence of a grain boundary.

Keywords : molecular dynamics, stick-slip phenomena, $\Sigma = 5$ (210) grain boundary, scratching

1. 서론

트라이볼로지(tribology) 특성은 미끄러짐(sliding)시 접촉면의 변형에 의해 크게 영향을 받으므로 접촉면에서 재료의 거동은 이전부터 매우 중요한 분야로 인식되어 왔다 [1]. 거시적인 관점에서 미끄러짐 시 접촉면에서의 재료의 변형특성에 대한 연구는 점진적으로 진행되어 왔다. 최근에는 나노 단위의 소재에 대한 근본적인 마찰특성, 즉 마찰계수, 마찰열의 소실, 그리고 stick-slip 현상에 대한 근본적인 원인에 대한 연구가 진행되고 있으며, 그러한 연구는 체계적으로 원자 거동에 대한 정확한 고찰을 통해 이해될 수 있다[2]. 이러한 원자크기 수준의 마찰 및 마모 특성에 대한 실험은 그 과학적 중요성에도 불구하고 실험의 기술적 한계로 인해 연구에 많은 어려움이 있었으나, 지난 이십년간, 원자단위의 마찰특성을 측정하는 장비들의 발전에 의해 최근 많은 연

구들이 이루어지고 있다. 특히 AFM(atomic force microscope)은 나노크기의 탐침(tip)을 이용하여 원자단위의 마찰력을 측정할 수 있어 미끄러짐 시의 계면에서의 재료특성을 연구하는데 사용되고 있다[3]. 그러나 현미경 내의 분위기, 시편표면의 오염도, 탐침의 형상 및 강성(stiffness), 압입(indentation)깊이 등에 상당히 민감하여 재료의 거동을 원자단위에서 분석하는데 여러가지 기술적인 어려움이 수반되고 있다[4]. 따라서 원자현미경을 이용한 실험을 이해하는데 분자역학모사법(MD)이 이용되고 있으며 이를 통해 실험결과와 상호 비교하는 것이 매우 효과적인 방법으로 알려져 있다.

MD 모사를 이용한 나노트라이볼로지 특성에 관한 연구는 현재 다양한 방법으로 수행되고 있으며, 특히 나노 스크래칭(nano-scratching)시의 소재의 탄성 및 소성변형, 전위의 생성, 결합의 상호작용 등과 같은 재료적인 측면에서의 연구가 활발하게 이루어지고 있다. Sørensen[5]등과 Buldum[6]등은

분자역학모사(MD)를 이용하여 각각 Cu(111)/Cu(111)과 Ni(111)/Cu(110) 계면에서의 마찰력을 측정하는 과정에서 stick-slip 현상을 관찰하였으며 이러한 현상은 원자현미경을 이용한 Bennewitz[7] 등의 연구 결과를 통해 실험적으로 입증되었다. 이러한 결과는 분자역학모사법(MD)이 단지 모사에만 국한되지 않고 실질적인 나노트라이볼로지 특성을 예측하는데 신뢰성을 가지고 있음을 나타낸다.

본 연구에서는 나노 스크래칭시에 결정립계가 원자의 거동에 미치는 영향을 분석하기 위해 분자역학모사법(MD)를 이용하여 면심입방격자(fcc) 금속인 구리 단결정과 및 $\Sigma=5(210)$ 결정립계(grain boundary)를 포함하고 있는 구리 bicrystal에 대해 나노 스크래칭을 수행하였다. 단결정에서의 스크래칭과의 비교를 통해 bicrystal에서의 마찰력의 변화 및 결정립이 전위의 생성 및 전파에 미치는 영향등을 고찰하였다.

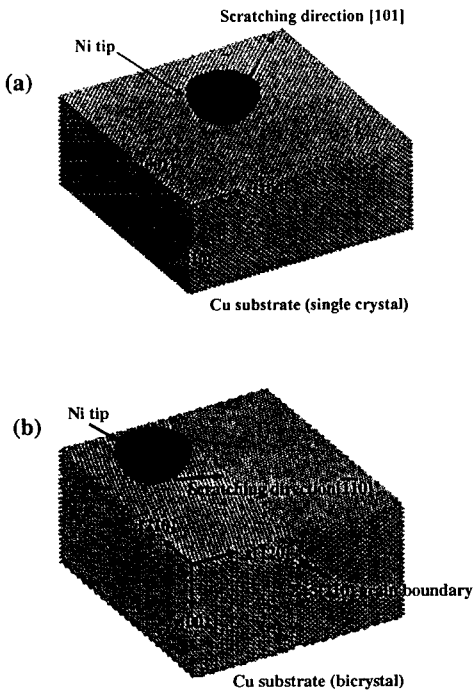


Fig. 1. Schematic diagrams of scratching simulation blocks of for Cu single crystal(a) and Cu bicrystal(b)

2. 모사방법

스크래칭시 결정립계가 나노트라이볼로지 특성에 미치는 영향을 고찰하기 위하여 단결정 및 bicrystal 모체에 대하여 각각 스크래칭 모사를 수행하였다.

Fig.1(a)는 구리 단결정 모체(substrate)의 나노 스크래칭시 사용한 구리 모체 및 압자(indenter)의 형상을 나타낸 것이다. 구리 모체는 200,000 개의 원자로 이루어져 있고 블록의 크기는 $181 \times 72 \times 181 \text{ \AA}$ 로 설정하였다. 압자는 3,178 개의 니켈 원자로 구성되어 있으며 반구($r = 25 \text{ \AA}$)의 형태로 설정하였다. 스크래칭시 압자는 변형을 방지하기 위해 고정시켰으며(rigid tip), 모체는 X, Z 축 방향으로 자유표면(free surface) 조건을 부여하였다. 스크래칭의 방향은 (001)면 위의 [101]로 설정하였으며, 스크래칭 방법은 4K의 온도에서 16.6m/s의 속도로 일정깊이(3.6 \AA)까지 압입(indentation) 후 11.8m/s의 속도로 스크래칭을 시행하였다.

Fig.1(b)는 구리 bicrystal의 스크래칭 실험에 사용된 $\Sigma=5(210)$ 결정립계(grain boundary)를 포함하고 있는 구리 bicrystal 모체와 압자의 형상을 나타낸 것이다. 구리 bicrystal 모체는 224,000 개의 원자, $164 \times 89 \times 181 \text{ \AA}$ 의 크기로 설정하였고 블록의 중앙에 $\Sigma=5(210)$ 결정립계를 형성시켰다. 압자는 단결정 모체의 스크래칭 실험과 동일한 니켈 압자를

사용하였다. 스크래칭의 방향은 $[\bar{1}10]$ 방향으로 시행하였고 스크래칭 방법은 단결정에서의 동일하게 하였으며 결정립계를 통과할 때의 상황을 고찰하기 위하여 스크래칭 거리를 단결정의 모사에 비해 2.5 배로 하였다.

본 연구의 분자역학모사에 사용된 퍼텐셜(potential)은 최근 FCC 금속에 가장 적합하다고 평가되고 있는 Voter와 Chen[8]에 의해 수정된 EAM(embedded atom method) 퍼텐셜을 사용하였다.

3. 모사 결과 및 고찰

Fig.2는 구리 단결정 및 bicrystal 모체에 대하여 스크래칭 초기(20 \AA)에 거리에 따른 마찰력(friction force)의 변화를 각각 나타낸 것이다. 본 모사에서 측정한 마찰력은 스크래칭시의 니켈 압자가 스크래칭 방향의 반대방향으로 받는 힘으로 계산하였다.

Fig.2.에서 볼 수 있듯이 단결정 모체의

스크래칭 시에는 마찰력의 크기가 거리에 따라 점진적으로 증가하다가 급격히 감소하는 전형적인 stick-slip 현상이 일정한 주기(약 3 Å)로 나타났다.

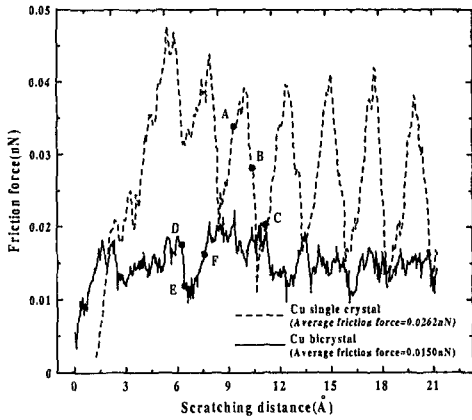


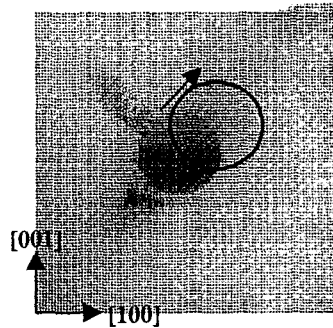
Fig. 2. The change of friction force during scratching. Stick-slip is not observed during the scratching on Cu a bicrystal.

이러한 구리 단결정에서의 stick-slip 현상은 압자와 모재간 원자들의 상호 작용에 의한 현상으로서, 원자들 간의 탄성 및 소성변형에 기인하는 것으로 알려져 있다[9,10]. 최근의 연구발표에서 전위의 발생 및 전파가 원자크기의 stick-slip 현상을 일으키는 것으로 보고된 바 있다[11]. 반면에, 구리 bicrystal의 경우는 마찰력이 불규칙적으로 낮게 나타남을 볼 수 있다.

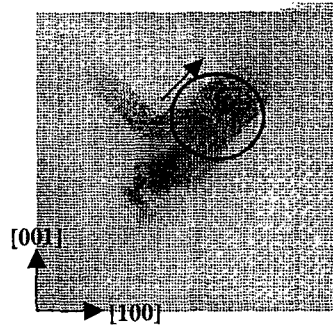
이러한 결정립계의 존재유무에 따른 마찰력의 변화 특성차이를 고찰하기 위하여 단결정 및 bicrystal에서의 마찰력 변화에 따른 원자의 위치를 각각 분석하여 Fig. 3, 4에 나타내었다. Fig.3은 Fig.2의 구리 단결정 모재에서 마찰력의 변화 지점에 대한 원자배열의 상태 변화를 나타낸 것으로, 단결정 모재의 X-Z 투영도(projection)를 나타내었다. 각 그림에서 진한 색상으로 나타나는 영역은 원자들이 완전 격자위치(perfect lattice)에서 벗어남에 따라 나타나는 현상으로, 주로 전위의 발생이나 소성변형에 의하여 생성된다. Fig. 3에서 A, B, C 지점은 Fig. 2에서 마찰력이 증가, 감소, 회복하는 경우의 원자배열 상태를 나타낸 것이다. Fig. 2에서 마찰력이 증가하는 A 지점의 경우에는 Cu 모재의 탄성변형에 기인하여 마찰력은 증가하지만, Fig. 3(a)에서와 같이 원자배열 상태의 변화는 나타나지 않았다. 반면에, B 지점에서는

탄성변형에서 소성변형으로 전환됨에 따라 Fig. 3(b)에서와 같이 전위가 생성되었으며 그에 따라 마찰력이 감소하는 것으로 판단되며, C 지점에서는 Fig.3(c)에서와 같이 전위가 전파되어 압자를 벗어남에 따라 압자 전방부의 원자들이 탄성영역으로 바뀌며 마찰력은 회복하는 것으로 사료된다. Fig. 3의 각 그림에서 압자의 진행방향과 반대방향에 관찰되는 전위는 압입시 발생한 것으로서 스크래칭 동안 계속 남아있으나 마찰력의 변화에는 큰 영향을 미치지 않았다.

(a) Point A



(b) Point B



(c) Point C

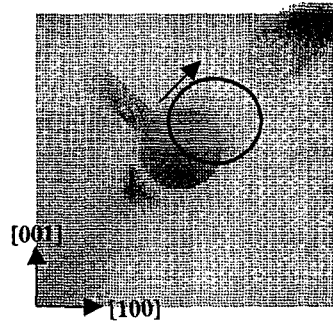
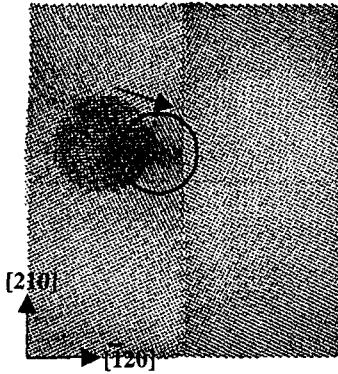
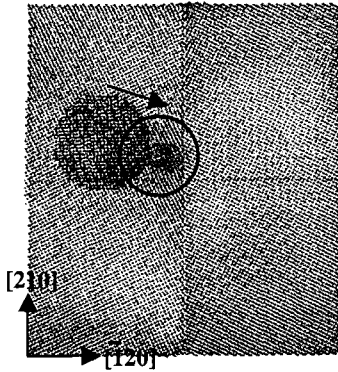


Fig. 3 Nucleation and propagation of dislocations during the scratching on a Cu single crystal at point A,B,C of Fig. 2.

(a) Point D



(b) Point E



(c) Point F

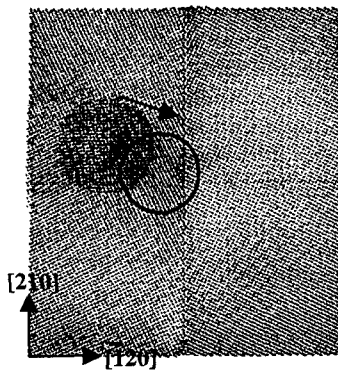


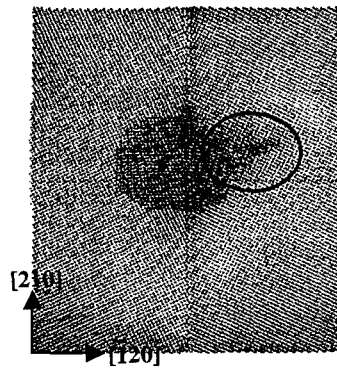
Fig. 4 The interruption of dislocation motions by $\Sigma = 5(210)$ grain boundary during the scratching on a Cu bicrystal at point D,E,F of Fig.2.

Fig. 4 는 Fig. 2 의 bicrystal 에서 마찰력이 변화할 때의 원자배열 상태를 나타낸 것으

로서, D, E, F 지점은 마찰력의 최고점, 최저점, 회복구간을 나타낸다. 단결정의 결과에서와 같이, 마찰력이 감소하는 D 지점에서 전위가 발생하였으며, 마찰력이 회복하는 F 구간에서 전위는 결정립계로 전파되었으나, 마찰력의 감소량이 단결정의 결과에 비해 대략 30%에 불과하였다. 그 뿐만 아니라 Fig. 2 에서 마찰력의 변화 또한 bicrystal 에서의 마찰력은 전반적으로 낮은 수준을 유지하며 불규칙적인 변화를 나타내고 있다. 이러한 양상은 초기에 진행방향 하부에 발생한 전위가 결정립계 때문에 전파되지 못하고 계속 하부에 존재하게 되어 새로운 전위의 발생 및 정상적인 탄성 및 소성변형에 상호 영향을 미치는 것으로 사료된다. bicrystal 에서 하부에 남아있는 전위는 스크래칭이 진행됨에 따라 소멸되거나, hillock 이 되어 압자주위로 표출되었다. 반면에 스크래칭이 진행됨에 따라 하나의 전위만이 표면을 통해 결정립계로 전파되어 결정립계에 의해 차단되었다. 이러한 장애물로서의 결정립계의 역할은 압자 하부에 생성되는 전위에도 영향을 미쳐서 불규칙한 마찰력의 변화를 나타내는 것으로 사료된다.

Fig. 5(a)에는 bicrystal 에서 스크래칭이 계속 진행되어 압자가 결정립계에 도달하게 될 때의 마찰력의 변화를 나타낸 것으로서, 압자가 결정립계에 도달할 때까지 마찰력은 불규칙적으로 변화하였다. 또한, Fig. 5(a)에서 표시한 G, H, I 지점에 대하여 전위가 결정립계를 통과할 때의 원자배열의 변화를 Fig. 5(b)에 나타내었다. 그림에 나타난 바와 같이 차단되었던 전위는 스크래칭이 진행됨에 따라 반대편 결정으로 넘어가 $\langle 110 \rangle$ 방향으로 전파됨을 관찰할 수 있다.

(a) Point G



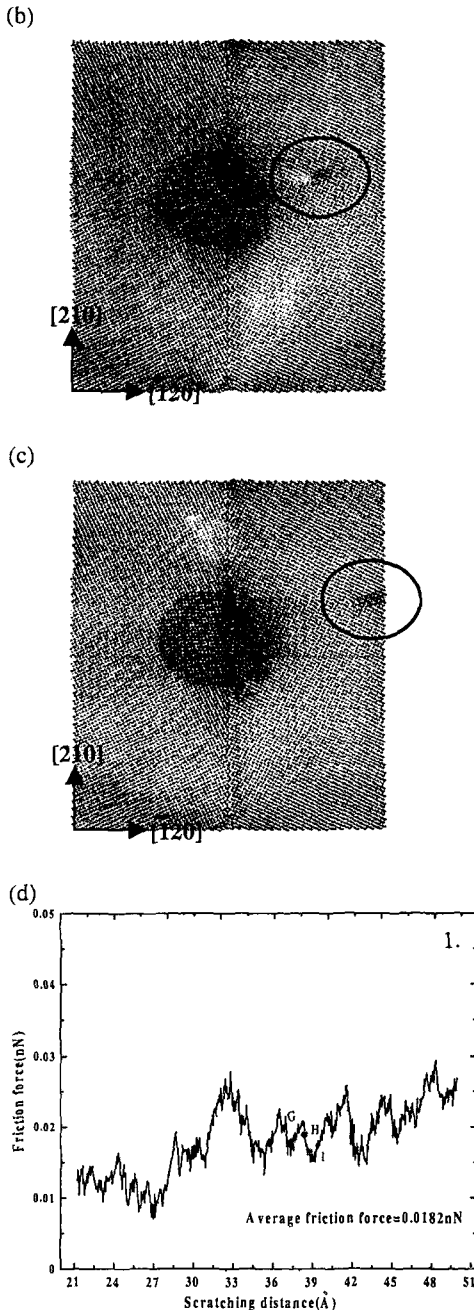


Fig. 5 Nucleation and propagation of dislocation during scratching on Cu bicrystal near the grain boundary.(a),(b),(c). The friction force variation between 21.2Å and 50Å of scratching distance(d).

그러나, 그러한 전위의 전파가 마찰력의 변화에 미치는 영향은 적었으며, 이는 결정립계의 장애물로서의 역할이 전위의 생성

및 전파와 관련된 상호 작용으로서 마찰력의 변화에 더 크게 작용하였기 때문인 것으로 판단된다.

4. 결론

분자역학모사를 이용한 구리 단결정 및 bicrystal 모재상 스크래칭 시 원자거동을 비교 분석한 결과 다음과 같은 결론을 얻을 수 있다.

1. 구리 단결정 모재상에서의 스크래칭시 마찰력의 크기가 점진적으로 증가한 후 급격히감소하는 주기적인 stick-slip 현상이 나타났으나, 구리 bicrystal 상에서는 나타나지 않았다.
2. 구리 단결정의 스크래칭시 발생하는 stick-slip 현상에서 마찰력의 감소는 전위의 생성과 전파와 밀접한 연관성을 나타냈다. 반면에 구리 bicrystal의 경우, $\Sigma=5(210)$ 결정립계의 영향에 의해 전위의 발생 및 전파가 원활하게 이루어지지 못해 불규칙한 마찰력의 변화를 나타내었다.
3. 구리 bicrystal에서 스크래칭이 진행됨에 따라 결정립계에 존재하던 전위는 반대편 결정으로 전파되어 나갔으나, 마찰력에는 거의 영향을 미치지 않았다.
4. 구리 bicrystal에서 결정립계는 전위의 생성 및 전파를 방해하는 주요요인으로 스크래칭시 불규칙한 마찰력을 유발하는 가장 큰 요인으로 판단된다.

참고문헌

1. K.L. Johnson, "Contact Mechanics," Cambridge University Press, 1985.
2. I.L. Singer and H.M. Pollock(ed.), "Fundamentals of Friction: Macroscopic and Microscopic Processes," NATO ASI Series E: Applied Science, Vol.220, 1992.
3. Mate, C. M., McClelland, G. M., Erlandsson, R. and Chiang, S., "Atomic-Scale Friction of a Tungsten Tip on a Graphite Surface," Physical Review B, Vol.59, No.17, pp.1942-1946, 1987.
4. Komanduri, R. and Chandrasekaran, N., "Molecular Dynamics Simulation of Atomic-Scale Friction," Physical Review B, Vol.61, No.20, pp.14007-14019, 2000.
5. Sørensen, M. R., Jacobsen, K. W. and Stolze, P., "Simulation of Atomic-Scale Sliding friction," Physical Review B, Vol.53, No.4, pp.2101-2113, 1996.

6. Buldum, A. and Ciraci, S., "Contact, Nano-indentation, and Sliding Friction," *Physical Review B*, Vol.57, No.4, pp.2468-2476, 1998.
7. Bennewitz, R., Gyalog, T., Guggisberg, M., Bammerlin, M., Meyer, E. and Güntherodt, H.-J., "Atomic-scale Stick-Slip Processes on Cu(111)," *Physical Review B*, Vol.60, No.16, pp.11301-11304, 1999.
8. Voter, A. F. and Chen, S. P. "Accurate Interatomic Potentials for Ni, Al and Ni₃Al," *Mat. Res. Soc. Symp.* Vol.82, pp.175, 1987.
9. Li, J., Vliet, K.J.V., Zhu, T., Yip, S. and Suresh, S., "Atomistic mechanisms governing elastic limit and incipient plasticity in crystals," *Nature*, Vol.418, pp.307-310, 2002.
10. Persson, B. N. J., "Theory of Friction: Friction Dynamics for Boundary Lubricated Surface," *Physical Review B*, Vol.55, No.12, pp.8004-8012, 1997.
11. 조민형, 김성진, 장호 "나노스크래칭시 나타나는 stick-slip 현상에 관한 분자역학 모사" *춘계윤활학회 초록집*, 2004.