

표면효과를 고려한 나노 사이즈 구조물의 local QC 열탄성 해석

Thermomechanical Local QC Analysis of Nanoscale Structure Considering Surface Effect

유수영* · 이승윤** · 조맹효***
Yoo, Su-Young · Rhee, Seung-Yun · Cho, Maenghyo

ABSTRACT

In analyzing the nano-scale behavior of nano devices or materials, QC method is efficient because it does not treat all the atoms. But for more accurate analysis in QC method, it is important to consider temperature and surface effects. In finite temperature, free energy is considered instead of potential energy. Because the surface area to volume ratio increases as the length scale of a body decreases, the surface effects are more dominant. In this paper, temperature related Cauchy-Born rule and surface Cauchy-Born rule are proposed to configurate the strain energy density. This method is applied to small and homogeneous deformation in two dimensional problem using finite element simulation.

Keywords: *quasicontinuum, multiscale analysis, Cauchy-Born rule, finite temperature, surface effect.*

1. 서론

나노 스케일에서의 현상 및 나노 소재를 연구할 때 분자동역학 모델링을 이용한 해석 방법이 많이 사용된다. 분자동역학 모델링의 경우 급격한 변형이 이루어지는 경우에도 정확한 해석이 가능하다. 하지만 현재 컴퓨터의 계산 능력으로는 해석 가능한 영역이 수백 나노미터 사이즈로 한정적이며 수십 나노미터 사이즈의 해석을 할 경우도 많은 시간이 소요된다. 따라서 변형이 급격히 일어나는 국부적 영역에서만 원자 스케일의 분자동역학 모델링을 사용하고, 나노 스케일의 현상이 거의 사라지는 주변 영역에 대해서는 기존의 연속체 모델을 적용하는 준-연속체 기법을 사용하는 멀티스케일 모델링이 효율적이다.

Abraham에 의해 FE/MD/TB를 연결한 멀티스케일 해석 방법이 제시된 후, 동시적 멀티스케일 해석 기법이 연구되어 왔다(Abraham 등, 1996). Tadmor 등에 의해 제시된 준연속체 방법(Tadmor 등, 1996; Knap과 Ortiz, 2001; Miller와 Tadmor, 1998) 등이 대표적 방법론이다. Tadmor 등에 의해 발달된 준연속체 방법은 온도효과를 고려하지 않은 0K에서의 적용되는 방법론이다. 최근에 Xiao 등에 의해 기존의 방법에 온도효과를 적용한 준연속체 방법론이 개발되었다(Xiao와 Yang, 2006). 또한 Park 등이 표면효과를 고려한 준연속체 방법론을 제시하였다(Park 등, 2006).

* 학생회원 · 서울대학교 기계항공공학부 석사과정 Email: sinvi428@snu.ac.kr

** 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 박사과정 Email: syrhee8@snu.ac.kr

*** 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 교수 Email: mhcho@snu.ac.kr

본 연구에서는 원자스케일 포텐셜과 등가인 준연속체 에너지 밀도 함수를 구성하기 위해서 온도효과를 고려한 코시-본 법칙을 적용하였다. 기존의 0K에서 정의된 코시-본 법칙의 경우 온도에 의한 진동 에너지를 고려하고 있지 않다. 하지만 실온에서 존재하는 모든 원자는 온도에 의한 진동이 있으며 이를 고려할 때 더 정확한 에너지 밀도 함수를 구성할 수 있다. 또한 나노스케일로 작아지게 되면 전체 체적에서 차지하는 표면의 비율이 커지게 된다. 이것은 사이즈가 작아질수록 표면의 영향을 많이 받게 되는 것을 의미한다. 따라서 나노 스케일 현상과 나노 소재에서 사이즈에 의한 효과를 살펴보기 위해서는 표면효과를 고려한 코시-본 법칙을 적용할 필요가 있다. 본 연구에서는 앞에서 언급한 표면효과와 온도효과를 모두 고려한 준연속체 에너지 밀도 함수를 구성하였다. 본 연구에서 원자 포텐셜은 Harmonic 포텐셜로 제한하였다. 또한 전체에 균일한 변형이 일어나는 모델에 대하여 국부 준연속체(local QC)를 선형화한 문제를 다루었다.

2. 기본이론

원자 포텐셜과 등가의 준연속체 에너지 밀도 함수를 구성하기 위해 harmonic 포텐셜을 사용하였다.

$$U(r) = \frac{1}{2}k(r_{ij}-r_0)^2, r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \quad (1)$$

여기서, r_0 는 두 원자 간 평형 상태의 거리, k 는 원자간 상호 작용력을 나타내는 스프링 상수이다.

2.1. 코시-본 법칙

일반적으로 코시-본 법칙은 원자의 bond의 길이 변화와 각도 변화에 의해 결정되는 것으로 무한히 반복되는 결정 구조의 균일 변형이 국부적인 1차 변형 구배 F 에 의해 사상된다. 변형 전의 격자 벡터 \vec{R}_{ij} 와 변형 후의 격자 벡터 \vec{r}_{ij} 의 관계가 다음과 같이 정의된다.

$$\vec{R}_{ij} = F \cdot \vec{r}_{ij} \quad (2)$$

이 때, 변형 구배 F 는 다음과 같이 정의된다.

$$F = \frac{\partial \vec{x}}{\partial X} = I + \frac{\partial \vec{u}}{\partial X} \quad (3)$$

전체의 포텐셜 에너지는 변형 전의 체적에 대하여 다음과 같이 정의된다.

$$W^e = \int_{\Omega_0} w^e(F) d\Omega_0 \quad (4)$$

위 식에서 w^e 는 단위 체적 당 스트레인 에너지이다.

2.2. 온도 효과를 고려한 코시-본 법칙

온도효과를 고려한 코시-본 법칙은 다음의 Helmholtz 자유 에너지로 정의된다. 이 때, 나노 스케일 연속체 모델에서 원자의 움직임을 harmonic으로 가정할 경우 더 정확한 에너지를 얻을 수 있다. 이 경우 서로 다른 두 원자 사이의 연계된(coupled) 진동은 무시할 수 있다(Xiao와 Yang, 2006). 온도 T 에서 N 개의 원자의 에너지는 다음과 같이 정의된다.

$$F_H = \phi(x) + k_B T \sum_j \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\hbar \omega_j}{2k_B T} \right) \right] \quad (5)$$

위 식에서 $\phi(x)$ 는 원자들이 평형상태에 있을 때의 포텐셜 에너지이고, k_B 는 볼츠만 상수, $\hbar = h/2\pi$ 로 h

는 프랑크 상수를 나타낸다. 진동수, ω_j 는 다음 식과 같이 정의된 다이내믹 행렬의 고유값(eigen value)으로 결정된다. 여기서 m 은 원자의 질량, $x_{I\alpha}$ 는 원자 I 의 진동방향 α 를 의미한다.

$$D_{I\alpha, J\beta} = \frac{1}{\sqrt{m_I m_J}} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_{I\alpha} \partial x_{J\beta}} \right) \quad (6)$$

2.3. 표면 효과를 고려한 코시-본 법칙

2.1절과 2.2절에서 정의된 에너지는 물체 체적에 관하여 정의되어졌다. 그리고 원자 수준에서의 포텐셜 에너지는 본드 수에 의하여 결정된다. 표면에서의 경우 다른 원자들과의 결합이 위에서 정의된 것과 다르다. 이러한 차이를 고려하여 에너지를 체적에서의 에너지와 표면에서의 에너지로 나눌 수 있다.

$$F_{tot} = \int_{\Omega} F_H^{bulk} d\Omega + \int_{\Gamma} F_H^{surface} d\Gamma \quad (7)$$

$$F_H^{surface} = \phi^{surface}(x) + k_B T \sum_j \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\hbar \omega_j^{surface}}{2k_B T} \right) \right], \quad D_{I\alpha, J\beta}^{surface} = \frac{1}{\sqrt{m_I m_J}} \left(\frac{\partial^2 \phi^{surface}}{\partial x_{I\alpha} \partial x_{J\beta}} \right) \quad (8)$$

3. 시뮬레이션 모델

3.1. Bulk 영역의 모델

구조물 내부의 경우 아래 그림 1과 같이 한 원자에 대한 단위 셀(cell)을 정한다. 원자 주위의 가장 가까운 6개의 원자와 상호작용을 한다고 가정하고, 변형이 발생할 경우 오른쪽과 같이 모든 원자에서 균일한 변형이 발생한다고 가정한다. 변형된 길이는 다음과 같이 표현된다.

$$l_k = l_0 \sqrt{r_{k1}^2 + F_{k2}^2} \quad (9)$$

$$r_{11} = F_{11}, \quad r_{21} = \frac{1}{2} F_{11} - \frac{\sqrt{3}}{2} F_{12}, \quad r_{31} = \frac{1}{2} F_{11} + \frac{\sqrt{3}}{2} F_{12}$$

$$r_{12} = F_{21}, \quad r_{22} = \frac{1}{2} F_{21} - \frac{\sqrt{3}}{2} F_{22}, \quad r_{32} = \frac{1}{2} F_{21} + \frac{\sqrt{3}}{2} F_{22}$$

이 식은 $E = \frac{1}{2}(F^T F - \hat{J}) = \frac{1}{2}(F^T + F) - J$ 의 관계에 의하여 선형화할 수 있다. 위의 단위 셀에 대한 식 4의 포텐셜 에너지와 식 6의 다이내믹 행렬은 다음과 같다.

$$\omega_c = \frac{2 \left(\frac{1}{2} \phi(l_1) + \frac{1}{2} \phi(l_1) + \phi \left(\frac{1}{2} l_1 \right) \right)}{A}, \quad A = \frac{\sqrt{3}}{2} l_0^2 \quad (10)$$

$$D_{ij} = \frac{l_0^2}{m} \sum_{k=1}^3 \left[\phi''(l_k) r_{ik} r_{kj} \left(\frac{l_0}{l_k} \right)^2 - \phi'(l_k) r_{ik} r_{kj} \frac{l_0^2}{l_k^3} + \frac{\phi'(l_k)}{l_k} \delta_{ij} \right] \quad (11)$$

이 값을 식 5에 적용하여 온도효과를 고려한 단위 셀에서의 에너지를 구할 수 있다.

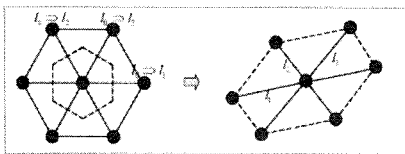


그림 1 단위 셀의 기본 모형과 변형된 모형

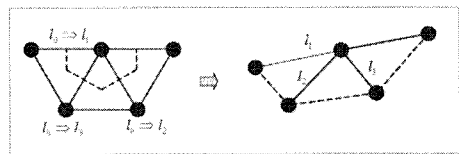


그림 2 표면 단위 셀의 기본 모형과 변형된 모형

3.2. 표면 영역의 모델

표면의 원자의 경우 단위 셀의 구조가 그림 2와 같이 변한다. 표면의 단위 셀에 대한 포텐셜 에너지는 다음과 같다.

$$\omega_c = \frac{2 \times \frac{1}{2} \phi(l_1) + \frac{1}{2} \phi(l_1) + \phi \frac{1}{2}(l_1)}{A_s}, \quad A_s = \frac{\sqrt{3}}{4} l_0^2 \quad (12)$$

l_2 와 l_3 에 대한 포텐셜 에너지는 식 10의 절반만 고려하면 된다. 이 변화된 포텐셜을 이용하여 표면 단위 셀에 대한 에너지를 구하고, 이를 식 8에 대입하여 표면을 고려한 전체 시스템에 대한 에너지를 구한다.

3.3. FEM formulation

각 노드에 대한 변위는 형상함수를 적용하여 4절점 유한요소소에 대하여 다음과 같이 표현된다.

$$(u, v) = \sum_{k=1}^4 N_k(\xi, \eta) (u_k, v_k) \quad (13)(a)$$

$$\begin{Bmatrix} u \\ v \end{Bmatrix} = [N] \{d\} \quad (13)(b)$$

식 7에서 구한 전체 에너지에 대한 식에 위의 변위 표현을 고려하여 유한요소법을 적용하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \Pi_{tot} = & \frac{1}{2} \int_{\Omega} \{d\}^T [B]^T [C^b] [B] \{d\} t d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \{d\}^T [B]^T [C^s] [B] \{d\} d\Gamma \\ & - \int_{\Omega} \{d\}^T [B]^T [C^b] \{\epsilon_T^b\} t d\Omega - \int_{\Gamma} \{d\}^T [B]^T [C^s] \{\alpha_T^s\} d\Gamma - \{d\}^T \{P\} \end{aligned} \quad (14)$$

여기서 처음 두 항은 변위에 의한 에너지, 세 번째와 네 번째 항은 온도 증가에 의해 발생한 에너지, 마지막 항은 집중하중을 나타낸다. 식에서 $[B]$, $[C]$ 는 다음과 같다. $\{\epsilon_T^b\}$ 와 $\{\alpha_T^s\}$ 는 온도에 의해 생성되는 열하중 항으로 식 17의 2nd P-K stress에 의하여 생성되는 항이다.

$$[C^b] = \frac{\partial^2 F_H^{bulk}}{\partial E \partial E}, \quad [C^s] = \frac{\partial^2 F_H^{surface}}{\partial E \partial E} \quad (15)$$

$$[B] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial X} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial X} & 0 & \frac{\partial N_3}{\partial X} & 0 & \frac{\partial N_4}{\partial X} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial Y} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial Y} & 0 & \frac{\partial N_3}{\partial Y} & 0 & \frac{\partial N_4}{\partial Y} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial Y} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_1}{\partial X} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_2}{\partial Y} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_2}{\partial X} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_3}{\partial Y} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_3}{\partial X} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_4}{\partial Y} & \frac{1}{2} \frac{\partial N_4}{\partial X} \end{bmatrix} \quad (16)$$

$$S^b = \frac{\partial F_H^b}{\partial E}, \quad S^s = \frac{\partial F_H^s}{\partial E} \quad (17)$$

4. 온도효과

인장 시뮬레이션을 수행하여 0K에서 1500K까지의 온도에 따른 물성의 변화를 살펴보았다. 그림 3과 그림 4를 통해 탄성계수(E), poisson 비(ν)를 확인할 수 있다. 표 1의 수치는 0K~1500K 사이의 물성값들의 평균값이다. 탄성계수를 115GPa에 맞추어 시뮬레이션을 수행하였는데 결과는 약 113Gpa이 도출되었고, 그 값은 온도의 증가와 함께 미세하게 줄어드는 것을 확인할 수 있다. Poisson 비도 0.33~0.36의 범위를 만족하면서, 온도에 따라 감소함을 확인할 수 있다. 열탄성계수의 경우 기존의 실험값에 비해 훨씬 적은 값을 가지는데, 이는 시뮬레이션에 사용된 포텐셜 때문이다. 금속의 경우 분자들 사이에 EAM 포텐셜을 가지는데, 하모닉 포텐셜을 사용하여 금속 원자간의 embedding 에너지가 고려되지 않았기 때문에 실제에 비해 적은 값이 도

함 되었다.

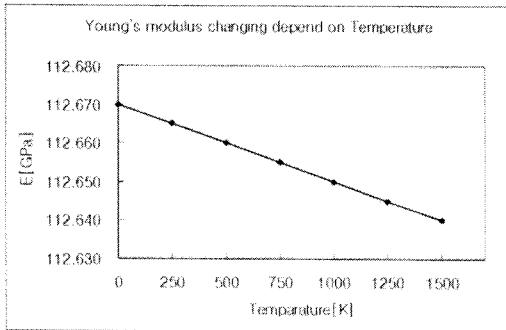


그림 3 온도에 따른 탄성계수의 변화

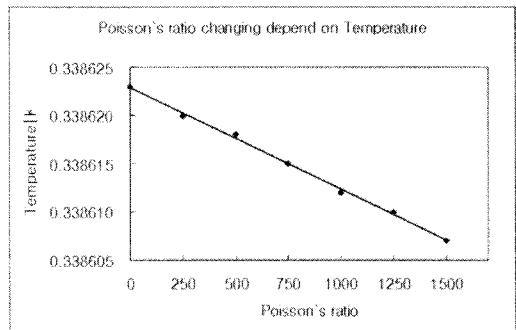


그림 4 온도에 따른 Poisson 비 변화

	Young's modulus [GPa]	Poisson's ratio	Coefficient of thermal expansion [$10^{-6}/^{\circ}\text{C}$]
Actual value*	110-120	0.33-0.36	16.6-17.6
Simulation value	112.655	0.338615	7.97102

표 1 온도효과를 고려한 시뮬레이션 결과

5. 표면효과

표면효과를 고려하여 0K에서 1500K까지 시뮬레이션을 수행하였다. 너비 방향(Y 방향)에만 표면을 추가하여, 기존의 결과와 비교하였다. 그림 5와 그림6을 통하여 전체 너비 (L_y)에서 표면(L_s)이 차지하는 비율에 따른 탄성계수와 열팽창계수의 변화를 살펴보면 표면 비율이 커짐에 따라 탄성계수와 열팽창계수가 커지는 것을 확인할 수 있다. 이것은 구조물이 얇아질수록 탄성계수와 열팽창계수가 커진다는 것을 의미한다. 그림 6의 경우 방향에 따라 열팽창계수의 변화율이 다르게 나타나는 것을 확인할 수 있는데, 이것은 양 방향의 표면 구조가 다른 2차원적인 특성 때문에 나타난 결과이다.

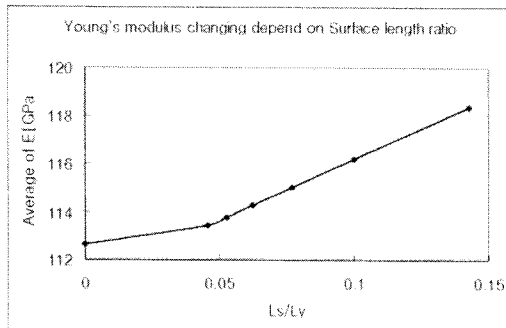


그림 5 표면비율에 따른 탄성계수 변화

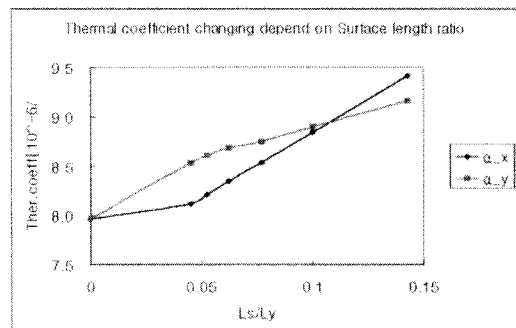


그림 6 표면비율에 따른 열팽창계수 변화

* Gere, Mechanics of Materials, 5rd, Books/Cole, pp.809-901

5. 결론

코시-본 법칙을 이용하여 OK에서 bulk에 관하여 적용되었던 준연속체 에너지 밀도함수를 온도가 주어진 모델로 확대하고, 여기에 표면효과까지 고려하여 준연속체 에너지 밀도 함수를 유도하였다. 표면의 비율이 작아짐에 따라 bulk일 때의 값에 가까워지는 것은 본 연구가 타당함을 의미한다. 하지만 harmonic 포텐셜을 이용한 관계로 열팽창계수 값이 실제값과는 차이를 보인다. 또한 표면 비율의 변화에 따른 열팽창계수가 두 방향에 따라 다른 변화 양상을 보인다. 이는 2차원 모델에 적용했기 때문에 생겨난 차이라고 볼 수 있다. 따라서 앞으로의 연구에 자유전자의 embedding 에너지를 고려한 EAM 포텐셜을 적용해야 하며, 현재의 2차원 모델을 3차원으로 확장해야 한다. 본 연구에서 선형 모델을 비선형 모델로 확장한다면 정확한 해를 얻을 수 있을 것으로 사료된다.

본 연구에서는 국부적(local) QC 모델에 표면 효과와 finite temperature 효과를 고려하여 정식화를 수행하였고 선형화 가정과 harmonic 포텐셜 가정의 기반 아래 모델링을 수행하여 2차원 고체 재료에 대한 정적 해석을 수행하였다. 본 연구의 방법은 효율적으로 온도 조건과 나노 구조물의 표면 효과를 고려할 수 있어서 나노 스케일에서 submicro 스케일까지의 구조물이 해석과 설계에 적합하다. 본 연구에서는 2차원 FCC 구리 구조물에 대해 그 적용가능성을 보였으며 실제적인 문제에 적용하기 위해 EAM 포텐셜과 3차원 문제로 확장을 연구 중에 있다.

후기

본 연구는 한국과학재단이 주관하는 서울대학교 마이크로 열시스템 연구센터의 지원을 받아 수행되었습니다.

참고문헌

- 이승윤, 조맹효 (2006) 절점 비활성화 기법을 적용한 나노-연속체 멀티스케일 해석 기법, **한국전산구조공학 회 정기 학술대회 논문집**, 19(1), pp.395~402.
- Knap, J. Ortiz, M. (2001) An analysis of the quasicontinuum method, *Journal of the mechanics and physics of solid*, 49(9), pp.1899~1923.
- Miller, R.E., Tadmor, E.B. (2002) The quasicontinuum method: Overview, applications and current directions, *Journal of computer-aided materials design*, 9, pp.203~239.
- Park, S.P., Klein, P.A., Wagner, G.J. (2006) A surface cauchy-born model for nanoscale materials, *International journal for numerical method in engineering*, 68, pp.1072~1095.
- Rickman, J.M., LeSar, R. (2002) Free-energy calculations in materials research, *Annu. Rev. Mater. Res.*, 32, 195~217
- Tadmor, E.B., Ortiz, M., Phillips, R. (1996) Quasicontinuum analysis of defects in solids, *Philosophical magazine A*, 73(6), pp.1529~1563
- Xiao, S.P., Yang, W. (2006) Temperature-related cauchy-born rule for multiscale modeling of crystalline solids, *Computational material science*, 37, pp.374-379.
- Xiao, S.P., Yang, W. (2007) A temperature-related homogenization technique and its implementation in the meshfree particle method for nanoscale simulation, *International journal for numerical method in engineering*, 69, pp.2099~2125.