

# 표면효과를 고려한 박막구조의 멀티스케일 해석

## Multi-scale Analysis of Thin Film considering Surface effects

최진복\* · 정광섭\*\* · 조명효\*\*\*

Jinbok Choi · Kwangsub Jung · Maenghyo Cho

---

### ABSTRACT

In general, the response of bulk material is independent of its size when it comes to considering classical elasticity theory. Because the surface to bulk ratio of the large solids is very small, the influence of surface can be negligible. But the surface effect plays important role as the surface to bulk ratio becomes larger, that is, the contribution of the surface effect must be considered in nano-size elements such as thin film or beam structure. Molecular dynamics computation has been a conventional way to analyze these ultra-thin structures but this method is limited to simulate on the order of  $10^6$ - $10^8$  atoms for a few nanoseconds, and besides, very time consuming. Analysis of structures in submicro to micro range(thin-film, wire etc.) is difficult with classical molecular dynamics due to the restriction of computing resources and time. Therefore, in this paper, the continuum-based method is considered to simulate the overall physical and mechanical properties of the structures in nano-scale, especially, for the thin-film.

**Keywords:** surface effect, thin film, multi-scale analysis, continuum, finite element method

---

### 1. 서론

MEMS/NEMS 분야에서 박막(thin-film) 또는 빔(beam)구조물들의 응용이 가능해 짐으로 인해서 이러한 구조를 가지는 장치의 설계와 성능의 예측을 위하여 박막구조물의 물리적 또는 기계적 성질들을 시뮬레이션을 통해 파악해야 할 필요성이 대두되고 있다. 특히 이러한 박막구조의 성질은 두께가 얇아짐에 따라서 거시적(macro)인 스케일에서의 물성과는 다른 양상을 보이게 되는데, 이러한 현상은 실험(Cuenot et al., 2004) 또는 분자동역학 시뮬레이션(Cammarate and Sieradzki, 1989) 통하여 확인 되었다. 일반적으로 거시적인 스케일에서는 구조 전체에서 표면이 차지하는 비율이 매우 작기 때문에 표면효과(surface effect)를 거의 무시할 수 있다. 그러나 박막구조에서와 같이 구조 전체의 부피에 대한 표면의 비가 커지게 되면 표면 효과가 중요하게 작용하게 된다(Miller and Shenoy, 2000). 따라서 이러한 박막구조를 정확하게 해석하기 위해서는 표면 효과의 고려가 반드시 필요하다. 최근 분자동역학 분야의 발달로 인해 나노스케일에서의 시뮬레이션이 가능해지게 되었고 이에 대한 연구들이 활발하게 진행되고 있다. 그러나 전산자원의 한계와 계산시간상의 제약으

---

\* 서울대학교 기계항공공학부 박사과정 Email: jbchoi95@snu.ac.kr

\*\* 서울대학교 기계항공공학부 석사과정 Email: suchdy0@snu.ac.kr

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

로 인해 아직까지 비교적 큰 스케일의 문제를 분자동역학으로 모사하기에는 많은 어려움이 따른다. 특히 작게는 수십 나노에서 크게는 마이크로 단위를 갖는 MEMS/NEMS 구조물(beam, plate, thin-film)에 대하여 분자동역학을 이용하여 최적설계를 수행하는 것은 거의 불가능에 가깝다고 할 수 있다. 따라서 이와 같은 구조물의 전체적인 물리적 특성이나 기계적 성질들을 시뮬레이션하거나 비교적 긴 시간 영역에 걸친 동적해석을 위해서는 연속체(continuum) 이론에 기반한 방법을 사용할 수밖에 없다. 그러나 고전적인 연속체 이론은 나노 스케일에서의 표면효과를 고려하지 않으므로 구조물의 스케일이 작아지면서 그 영향이 지배적으로 나타나게 되는 표면효과를 나타낼 수 있도록 변경될 필요가 있다(Sharma and Ganti,2004;Lim and He,2004). 따라서 본 연구에서는 고전적인 평판 이론을 표면효과를 고려할 수 있도록 수정하여 나노 스케일의 박막구조 해석에 적용할 수 있는 연속체 모델을 제시하고 표면효과를 고려하는 인자는 분자동역학으로부터 도출하며 연속체 모델을 유한요소법으로 해석하는 계층적 멀티스케일 방법을 제안한다.

## 2. 표면효과를 고려한 박막 이론 및 구성 방정식

### 2.1. 박막 이론

두께가 매우 얇은 박막구조의 경우 그림 1에서 보는 바와 같이 cartesian 좌표계에서  $(x_1, x_2)$ 평면상의 중립면과  $x_3 = \pm h/2$ 에서의 표면(surface)  $S^+$ 와  $S^-$ 를 생각할 수 있다. 앞서 언급한 바와 같이 나노 스케일의 박막 구조의 경우 표면의 영향력을 무시할 수 없기 때문에 고전적인 평판 이론을 수정하여 표면효과를 고려할 수 있도록 해야 한다.

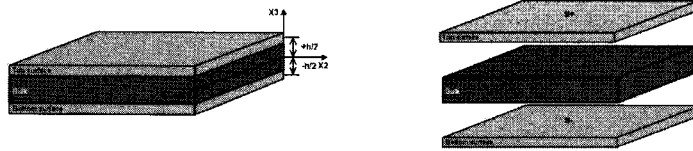


그림 1 박막구조(thin film structure)

일반적으로 3차원 물체의 평형 방정식은 다음과 같다.

$$\sigma_{ij,j} + f_i = 0 \quad (1)$$

여기서  $\sigma_{ij}$ 와  $f_i$ 는 각각 응력과 체적력을 나타낸다. 박막의  $S^+$ 와  $S^-$  표면상의 표면응력은  $\tau_{i\alpha}^+$ 와  $\tau_{i\alpha}^-$ 로 나타낼 수 있고 다음과 같은 평형방정식을 만족한다.(P.Lu, L.H.He etc.,2006; Gurtin and Murdoch, 1978)

$$\tau_{\alpha\beta,\beta}^+ - \sigma_{\alpha 3}^+ = 0 \quad (x_3 = h/2), \quad \tau_{\alpha\beta,\beta}^- - \sigma_{\alpha 3}^- = 0 \quad (x_3 = -h/2) \quad (2)$$

여기서  $\sigma_{\alpha 3}^+$ 와  $\sigma_{\alpha 3}^-$ 는 각각  $x_3 = \pm h/2$ 에서의 체적응력(bulk stress)들을 나타낸다. 박막의 두께( $h$ )가 면내방향의 다른 두 면의 길이에 비해 매우 작으므로 두께방향으로 식(1)을 적분함으로써 박막전체에 대한 다음과 같은 지배방정식을 얻을 수 있다.

$$N_{\beta\alpha,\alpha} + \sigma_{\beta 3}^+ - \sigma_{\beta 3}^- + \int_{-h/2}^{h/2} f_\beta dx_3 = 0 \quad (3.a)$$

$$M_{\alpha\beta,\beta} - N_{\alpha 3} + \frac{h}{2}(\sigma_{\alpha 3}^+ + \sigma_{\alpha 3}^-) + \int_{-h/2}^{h/2} f_\alpha x_3 dx_3 = 0 \quad (3.b)$$

여기서  $N_{\alpha\beta} = \int_{-h/2}^{h/2} \sigma_{\alpha\beta} dx_3$ ,  $M_{\alpha\beta} = \int_{-h/2}^{h/2} \sigma_{\alpha\beta} x_3 dx_3$  는 각각 resultant forces 와 resultant moment 이다. 식(2.a)와(2.b)의 표면에서의 평형 방정식을 식(3.a)와(3.b)에 대입하게 되면 다음과 같이 표면효과를 포함하게 되는 박막의 지배방정식을 얻을 수 있다.

$$N_{\alpha\beta,\beta} + \tau_{\beta\alpha,\beta}^+ + \tau_{\beta\alpha,\beta}^- + \int_{-h/2}^{h/2} f_\alpha dx_3 = 0 \quad (4.a)$$

$$M_{\alpha\beta,\beta} + \frac{h}{2}(\tau_{\beta\alpha,\beta}^+ - \tau_{\beta\alpha,\beta}^-) - N_{\alpha 3} + \int_{-h/2}^{h/2} f_\alpha dx_3 = 0 \quad (4.b)$$

## 2.1. 구성 방정식

박막의 bulk와 surface가 균질(homogeneous)하고 등방성(isotropic)이라면 bulk의 구성방정식은 다음과 같다.

$$\sigma_{ij} = \lambda \epsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \epsilon_{ij} \quad (5)$$

여기서  $\lambda$ 와  $\mu$ 는 Lamé 상수들이고  $\epsilon_{ij}$ 는 다음과 같이 주어지는 변형률이다.

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (6)$$

두께가 매우 얇은 박막구조이기 때문에 고전적인 판 이론에서는 면의 수직방향 응력 성분  $\sigma_{33}$ 는 면내 응력 성분  $\sigma_{\alpha\beta}$ 에 비하여 매우 작다고 보아 무시하였다. 그러나 이렇게 되면 식(2)의 평형방정식을 만족할 수 없게 되므로 여기서는 수직방향 응력성분  $\sigma_{33}$ 가 다음과 같이 두께방향으로 선형적으로 변한다고 가정한다.

$$\sigma_{33} = \frac{1}{2}(\sigma_{33}^+ + \sigma_{33}^-) + \frac{1}{h}(\sigma_{33}^+ - \sigma_{33}^-)x_3 \quad (7)$$

그러면 식(5)의 응력-변형률 관계는 다음과 같이 단순화 된다.

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{E}{1+\nu} \left( \epsilon_{\alpha\beta} + \frac{\nu}{1-\nu} \epsilon_{\gamma\gamma} \delta_{\alpha\beta} \right) + \frac{\nu}{1-\nu} \sigma_{33} \delta_{\alpha\beta} \quad (8)$$

여기서  $E$ 는 Young's modulus 이고  $\nu$ 는 Possion's ratio 이다. Gurtin과 Murdoch 에 의한 표면  $S^+$ 와  $S^-$ 의 구성방정식은 상, 하단 표면의 물성치가 같을 경우 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\tau_{\alpha\beta}^\pm = \tau_0 \delta_{\alpha\beta} + (\mu_0 - \tau_0)(u_{\alpha,\beta}^\pm + \tau_{\beta,\alpha}^\pm) + (\lambda_0 + \tau_0)u_{\gamma,\gamma}^\pm \delta_{\alpha\beta} + \tau_0 u_{\alpha,\beta}^\pm, \quad \tau_{\alpha 3}^\pm = \tau_0 u_{3,\alpha}^\pm \quad (9)$$

여기서  $\tau_0$  는 구속되지 않은 상태에서의 박막의 표면 잔류응력이며,  $\lambda_0$ 와  $\mu_0$ 는 각각 표면의 Lamé 상수이다. 또한 수직 응력 성분  $\sigma_{33}$  는 아래와 같다.

$$\sigma_{33} = \frac{1}{2}(\tau_{\beta 3,\beta}^+ - \tau_{\beta 3,\beta}^-) + \frac{1}{h}(\tau_{\beta 3,\beta}^+ + \tau_{\beta 3,\beta}^-)x_3 \quad (10)$$

## 3. 표면효과를 고려한 Kirchhoff Plate 이론 및 표면상수의 결정

### 3.1. 표면효과를 고려한 Kirchhoff Plate 이론

Kirchhoff plate 이론에서 변위장은 다음과 같이 가정된다.

$$u_\alpha = u_\alpha^0 - x_3 u_{3,\alpha}^0, \quad u_3 = u_\alpha^0 \quad (11)$$

여기서  $u_\alpha^0$  는 중립면에서의 변위성분이며 중립면에서의 변형률 성분은 식(10)을 식(6)에 대입하면 다음과 같다

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon_{\alpha\beta}^0 - x_3 u_{3,\alpha\beta}^0, \quad \epsilon_{3\alpha} = 0 \quad (12.a)$$

$$\epsilon_{\alpha\beta}^0 = \frac{1}{2}(u_{\alpha,\beta}^0 + u_{\alpha,\beta}^0) \quad (12.b)$$

식(11)과 (12) 를 식(8)-(10)에 대입하고 나서 다시 식(4)에 대입하게 되면 다음과 같이 표면효과를 포함하는 Kirchhoff plate 이론의 resultant force 와 resultant moment를 얻을 수 있다.

$$N_{\alpha\beta} = 2\tau_0(\delta_{\alpha\beta} + u_{\alpha,\beta}^0) + P\epsilon_{\alpha\beta}^0 + Q\epsilon_{\gamma\gamma}^0\delta_{\alpha\beta} \quad (13)$$

$$M_{\alpha\beta} = -Au_{3,\alpha\beta}^0 - Bu_{3,\gamma\gamma}^0\delta_{\alpha\beta}$$

$$\text{여기서, } P = \frac{Eh}{1-\nu^2} \left[ (1-\nu) \left( 1 + 2\frac{l_2 - l_1}{h} \right) \right], \quad Q = \frac{Eh}{1-\nu^2} \nu \left( 1 + \frac{l_3}{h} \right)$$

$$A = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)} (1-\nu) \left( 1 - 3\frac{l_3}{h} \right), \quad B = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)} \nu \left( 1 + \frac{3l_3 - l_1}{h} \right)$$

여기서  $l_1, l_2$  그리고  $l_3$ 는 각각 표면효과를 나타내는 상수값들로서 다음과 같이 주어진다.

$$l_1 = \frac{2(1+\nu)\tau_0}{E}, \quad l_2 = \frac{2(1+\nu)\mu_0}{E}, \quad l_3 = \frac{2(1-\nu^2)(\tau_0 + \lambda_0)}{E\nu} \quad (14)$$

### 3.2. 표면상수( $\tau_0, \lambda_0, \mu_0$ )의 결정

연속체 이론에 기초한 박막구조 해석결과의 정확도는 표면상수 값들이 얼마나 신뢰성 있는 값들인지에 따라 크게 영향을 받는다. 일반적으로 이러한 상수값들은 실험이나 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 얻어지며 정확하게 계산되어진 표면상수 값들을 사용할 경우 연속체 기반의 모델이 분자동역학 시뮬레이션의 결과와 잘 일치하게 됨을 확인 할 수 있다. (Miller an Shenoy,2000)

본 연구에서는 박막의 해석을 위해 분자동역학(molecular dynamics)를 통하여 박막을 모델링하고, 구속조건을 가하지 않은 상태, 인장 테스트, 전단 테스트를 통하여 각각의 경우에 대하여 변형률을 구하고 아래 식을 이용하여 표면상수( $\tau_0, \lambda_0, \mu_0$ ) 값들을 결정한다.

$$\begin{Bmatrix} N_{11} \\ N_{22} \\ N_{<12>} \end{Bmatrix} = \frac{Eh}{1-\nu^2} \begin{Bmatrix} (u_{1,1} + \nu u_{2,2}) \\ (\nu u_{1,1} + u_{2,2}) \\ \frac{1}{2}(1-\nu)(u_{1,1} + u_{2,2}) \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} 2(1+u_{2,2}) & 4u_{1,1} & 2(u_{1,1} + u_{2,2}) \\ 2(1+u_{1,1}) & 4u_{2,2} & 2(u_{1,1} + u_{2,2}) \\ -(u_{1,2} + u_{2,1}) & 2(u_{1,2} + u_{2,1}) & 0 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \tau_0 \\ \mu_0 \\ \lambda_0 \end{Bmatrix} \quad (15)$$

여기서  $N_{\alpha\beta}$ 는 resultant forces 그리고  $u_{\alpha,\beta}$ 는 변형률을 나타낸다.

본 연구에서는 구리 박막구조에 대하여  $N\sigma T$ 양상블과 Lennard-Jones 포텐셜을 사용하여 그림 2와 같이 구리박막을 모델링하고 이에 대한 분자동역학 시뮬레이션을 수행하였다.

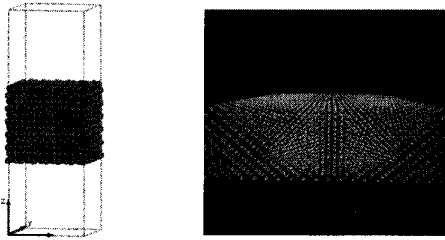


그림 2.  $N\sigma T$ 양상블 시스템의 초기 구리박막 구조와 원자 배치

## 4. 수치예제

### 4.1. 표면효과를 고려한 Kirchhoff plate 이론 검증

먼저 표면효과를 고려한 변경된 Kirchhoff plate 이론식의 확인을 위하여 이를 기반으로 유한요소 정식화를 거쳐 얇은 steel surface에 대한 해석을 수행하였다. steel surface에 대한 표면상수 값들은 표 1과 같다(Gurtin and Murdoch,1978). 두께가 두꺼워짐에 따라 박막의 탄성계수가 bulk의 값으로 수렴되는지 확인하기 위하여 가로, 세로  $1 \times 10^{-7}m$ , 두께 1나노미터의 초기 유한요소 모델에서 두께를 증가시켜 가면서 그림 3 과 같이 인장 테스트 수행하였다. 그림 4의 그래프에서 보는 바와 같이 박막구조의 두께가 매우 얇을 경우에는 Young's modulus의 값이 bulk값에 비하여 매우 작게 나타남을 알 수 있고, 두께가 약 20nano 이상에서는 Young's modulus의 값이 거의 bulk값에 수렴함을 확인 할 수 있다.

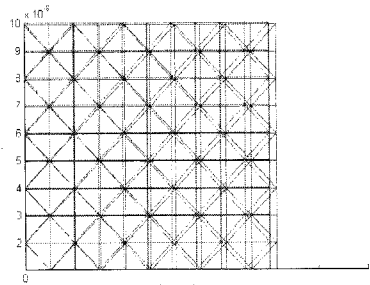


그림 3. 인장 테스트

표 1 Steel의 탄성계수, 포아송비, 표면상수 값

moduli	iron free surface
E	$17.73 \times 10^{10} N/m^2$
$\nu$	0.25
$\tau_0$	$1.7 N/m$
$\mu_0$	$2.5 N/m$
$\lambda_0$	$-8 N/m$

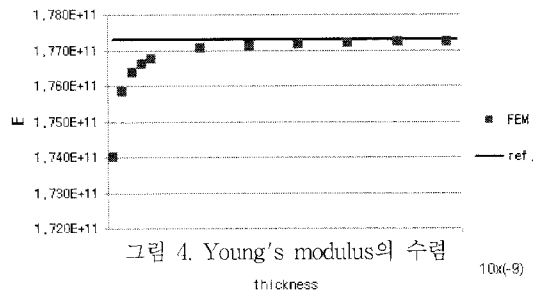


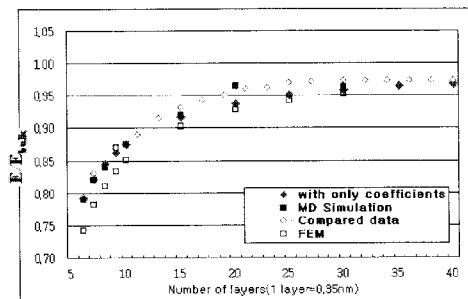
그림 4. Young's modulus의 수렴

### 4.2. 구리(Cu) 박막구조의 해석

구리 박막구조에 대하여 3.2절에서 설명한 바와 같이 분자동역학 시뮬레이션을 통해 표면상수값들을 계산하여 기존의 분자동역학 시뮬레이션 결과와 비교하여 보았다. 분자동역학 시뮬레이션을 위한 구리박막 모델은 면내 방향으로  $12 \times 12$ 층(layer), 두께방향으로 6층으로 원자를 배열하였다. 계산된 표면상수 값은 표 2와 같다. 그림 4에서 보는 바와 같이 현재 분자동역학 시뮬레이션으로 구한 modulus와 다소 차이를 보이고 있으나 약 5나노 이상의 두께에서는 그 차이가 크지 않음을 확인 할 수 있다.

표 2 구리의 탄성계수, 포아송비, 표면상수 값

moduli	Copper surface
E	$129.9 \times 10^9 N/m^2$
$\nu$	0.34
$\tau_0$	$0.036 N/m$
$\mu_0$	$-18.417 N/m$
$\lambda_0$	$6.707 N/m$



## 5. 결론

표면효과(surface effects)를 고려한 박막(thin film)해석을 위하여 고전적인 Kirchhoff plate 이론을 표면효과를 고려할 수 있도록 수정함으로써 나노 스케일의 구조물을 해석할 수 있는 연속체 모델을 제시하였다. Steel 박막과 구리 박막에 대한 시뮬레이션을 통해 박막의 두께가 얇아짐에 따라 표면효과와 영향으로 bulk의 물성과는 다른 성질을 나타냄을 확인 할 수 있었다. 박막구조의 정확한 해석을 위해서는 신뢰성 있는 표면상수 값들과 물성치 확보가 중요하므로 정확한 측정기법이나 효율적인 분자동역학 시뮬레이션 방법이 필요하다.

## 감사의 글

본 연구는 국방과학연구소와 서울대 비행체특화센터의 지원을 통해 수행되었습니다.

## 참고문헌

- Cuenot, S., Fretigny, C., Demoustier-Champagne, S., Nysten, B. (2004) Surface tension effect on the mechanical properties of nanomaterials measured by atomic force microscopy. *Phys. Rev. B*. 69.
- Cammarate, R.C., Sieradzki, K. (1989) Effects of surface stress on the elastic moduli of thin films and superlattices. *Phys. Rev. Lett.* 62, pp.2005-2008.
- Miller, R.E., Shenoy, V.B. (2000) Size dependent elastic properties of nanosized structural elements. *Nanotechnology* 11, pp.139-147.
- Sharma, P., Ganti, S., Bhate, N. (2003) Effects of surfaces on the size-dependent elastic state of nano-inhomogeneities. *Appl. Phys. Lett.* 82, 535-537.
- Lim, C.W., He, L.H. (2004) Size-dependent nonlinear response of thin elastic films with nano-scale thickness. *Int. J. Mech. Sci.* 46, 1715-1726.
- P.Lu, L.H. He, H.P. Lee, C.Lu (2006) Thin plate theory including surface effects. *International Journal of Solids and Structures* 43, pp.4631-4647.
- Gurtin, M.E., Murdoch, A.I. (1978) Surface stress in solids. *Int. J. Solids Struct.* 14, pp.431-440.