

# 분자동역학을 이용한 FCC 나노박막의 탄성계수 연구

김원배<sup>†</sup> · 조맹효<sup>\*</sup>

## Molecular dynamics study of the elastic moduli of FCC nanofilm

Wonbae Kim<sup>†</sup> and Maenghyo Cho<sup>\*</sup>

**Key Words :** Molecular Dynamics Simulation(분자동역학), Nanofilm(나노박막), Elastic modulus(탄성계수), Embedded Atom Method

### Abstract

In this paper, elastic properties such as Young's modulus and Poisson's ratio of various transition metal nanofilms are calculated for the {100} and {110} surfaces by using molecular dynamics simulation. A new method using 3<sup>rd</sup> order elastic constants and least square method is presented for the calculation of elastic constants. We also introduce analytical method of calculating elastic constants for EAM potential and its results as the reference value to be compared with the simulation results.

### 1. 서론

나노 스케일에서 FCC, BCC 와 같은 격자 구조물은 격자의 방향에 따라 다른 물리적 성질을 갖는다. 또한 수 nm 정도의 두께를 가지는 나노 구조물은 표면응력(surface-stress)에 의한 영향<sup>(1)</sup>으로 두께에 따라 다른 기계적 특성을 가진다. 예를 들어 {100} 표면을 가지는 구리 나노박막의 경우 두께가 얇아지면 <100> 방향의 탄성계수는 감소하고, <110> 방향의 탄성계수는 증가한다.<sup>(2)</sup>

수 nm 의 두께를 가지는 나노박막의 경우 표면장력(surface tension)으로 인한 면내방향으로의 수축(contraction)이 일어난다. 이 상태가 박막에서는 응력(stress)이 없는 평형(equilibrium) 상태가 된다. 분자동역학에서는 변형을 주어진 상태에서 내부의 virial stress 를 통계적으로 측정하여 탄성계수를 측정하는데, 변형이 작은 경우 계산된 응력 데이터의 편차가 커서 제대로 된 해석 결과를 얻기가 어렵다. 따라서 데이터의 편차에 영향을 받지 않을 정도의 변형(예를 들어  $\epsilon > 0.01$ )을 가하여 전

산모사를 수행하여야 한다. 그러나 변형률이 커지게 되면, 변형률과 응력의 관계가 선형구간을 벗어나게 되어서 간단한 선형 해석방법으로 계산한 탄성계수에는 오차가 크게 발생한다.

이렇게 계산과정에서 발생한 오차를 줄이기 위하여 본 연구에서는 분자동역학 전산모사를 이용하여 탄성계수를 계산하는 방법으로, 비선형 탄성계수인 3<sup>rd</sup> order elastic constant 와 최소자승법(least square method)을 이용한 새로운 방법을 제시하고자 한다.

### 2. EAM 을 이용한 이론해 계산

#### 2.1 이론값 계산식 정리

본 연구에 사용된 재료는 FCC 격자구조를 가지는 천이금속(Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt)을 사용하였고, 원자간에 작용하는 상호 작용력으로는 EAM Potential<sup>(3)</sup> 을 사용하였다. 전산모사에 앞서 cubic system 의 물리적 특성을 파악하기 위해 EAM Potential 로부터 이론적으로 벌크(bulk) 구조물의 탄성계수를 계산하였다.

Johnson<sup>(4)</sup>과 Dingrevill<sup>(5)</sup>의 방법에 의거하여 EAM potential 로부터 탄성계수의 해석해를 구하는 식은 다음과 같다. Taylor expansion 에 의하여 원자 n 에 작용하는 에너지  $E^{(n)}$  은 식(1)과 같이 나타낼 수 있다.

<sup>†</sup> 서울대학교 기계항공공학부 박사과정

E-mail : wbkim@snu.ac.kr  
TEL : (02)880-1645 FAX : (02)886-1693

<sup>\*</sup> 서울대학교 기계항공공학부 교수

E-mail : mhcho@snu.ac.kr

$$E^{(n)} = A^{(n)} + A_{ij}^{(n)} \varepsilon_{ij} + \frac{1}{2} A_{ijkl}^{(n)} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} + \dots \quad (1)$$

위의 식에서 deformation gradient  $\eta_{ij}$  를 이용하여  $\varepsilon_{ij}$  와  $r_i^{mn}$  의 관계를 기술하면,  $A^{(n)}, A_{ij}^{(n)}, A_{ijkl}^{(n)}$  은 식(3)과 같이 표현된다.

$$\begin{aligned} r_i^{mn} - \hat{r}_i^{mn} &= \eta_{ij}^{mn} \hat{r}_j^{mn} = \eta_{ij} \hat{r}_j^{mn}, \\ \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2} (\eta_{ij} + \eta_{ji}) \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} A^{(n)} &= E^{(n)} \Big|_{r^{mn} = \hat{r}^{mn}}, \\ A_{ij}^{(n)} &= \left[ \sum_{p \neq n} \hat{r}_i^{pn} \frac{\partial E^{(n)}}{\partial r_j^{pn}} \Big|_{r^{mn} = \hat{r}^{mn}} \right]_{(i,j)}, \\ A_{ijkl}^{(n)} &= \left[ \sum_{p \neq n} \sum_{q \neq n} \hat{r}_i^{pn} \hat{r}_k^{qn} \frac{\partial^2 E^{(n)}}{\partial r_j^{pn} \partial r_l^{qn}} \Big|_{r^{mn} = \hat{r}^{mn}} \right]_{(i,j),(k,l)} \\ [u_{i,j}]_{(i,j)} &= \frac{1}{2} [u_{i,j} + u_{j,i}] \end{aligned} \quad (3)$$

여기서  $\hat{r}^{mn}$  은 평형상태에서의 원자간의 거리를 나타내고, 심볼  $\langle i, j \rangle$  는 symmetric part 를 의미한다. 탄성론에서 평형상태의 에너지는 아래와 같이 cohesive energy( $E_c$ )와 탄성계수( $C_{ijkl}$ )로 표현된다.

$$E = -E_c + \frac{1}{2} \Omega^{(n)} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} + \dots \quad (4)$$

여기서  $\Omega^{(n)}$  은 원자의 부피를 의미한다. 위의 식들로부터 식(5)와 같은 평형상태의 관계식을 도출할 수 있다.

$$\begin{aligned} A^{(n)} &= -E_c, \\ A_{ij}^{(n)} &= 0, \\ A_{ijkl}^{(n)} &= \Omega^{(n)} C_{ijkl} \end{aligned} \quad (5)$$

식(3)과 식(5)로부터 다음과 같은  $C_{ijkl}$  계산식을 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} C_{ijkl} &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{1}{\Omega^{(n)}} A_{ijkl}^{(n)} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{p \neq n} \sum_{q \neq n} \frac{1}{\Omega^{(n)}} \hat{r}_i^{pn} \hat{r}_k^{qn} \frac{\partial^2 E^{(n)}}{\partial r_j^{pn} \partial r_l^{qn}} \Big|_{r^{mn} = \hat{r}^{mn}} \end{aligned} \quad (6)$$

EAM potential 은 embedding energy  $G(\bar{\rho})$  와 pair energy  $\phi(r^{mn})$  으로 표현할 수 있다. 여기서  $\bar{\rho}$  는 전자밀도(electron density)를 나타낸다.

**Table 1 Elastic moduli of bulk (analytical method)**

	(단위: GPa)					
	Cu	Ag	Au	Ni	Pd	Pt
{100}/<100>	61.5 (0.43)	53.9 (0.41)	35.7 (0.46)	110.5 (0.40)	49.2 (0.46)	44.1 (0.47)
{100}/<110>	126.0 (-0.18)	101.6 (-0.11)	76.4 (-0.15)	213.5 (-0.16)	106.8 (-0.18)	104.0 (-0.24)
{110}/<100>	61.5 (0.43)	53.9 (0.41)	35.7 (0.46)	110.5 (0.40)	49.2 (0.46)	44.1 (0.47)
{110}/<110>	126.0 (0.87)	101.6 (0.78)	76.4 (0.99)	213.5 (0.77)	106.8 (1.00)	104.0 (1.12)
{111}/<110>	126.0 (0.52)	101.6 (0.48)	76.4 (0.61)	213.5 (0.46)	106.8 (0.60)	104.0 (0.66)

※ ( )는 Poisson's ratio

$$\begin{aligned} E^{(n)} &= G(\bar{\rho}) + \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \phi(r^{mn}) \\ \bar{\rho} &= \sum_{m \neq n} f(r^{mn}) \end{aligned} \quad (7)$$

탄성계수  $C_{ijkl}$  를 이론적으로 계산하기 위해  $E^{(n)}$  을  $r_i^{mn}$  으로 이차 미분한 식은 아래와 같다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial E^{(n)}}{\partial r_i^{pn} \partial r_k^{qn}} &= G'' \left[ f'(r^{pn}) \frac{r_i^{pn}}{r^{pn}} \right] \left[ f'(r^{qn}) \frac{r_k^{qn}}{r^{qn}} \right] \\ &+ G' \left[ f'' \frac{r_i^{pn} r_k^{pn}}{r^{pn} r^{pn}} + f' \frac{1}{r^{pn}} \left( \delta_{ik} - \frac{r_i^{pn} r_k^{pn}}{r^{pn} r^{pn}} \right) \right] \delta_{pq} \\ &+ \frac{1}{2} \left[ \phi'' \frac{r_i^{pn} r_k^{pn}}{r^{pn} r^{pn}} + \phi' \frac{1}{r^{pn}} \left( \delta_{ik} - \frac{r_i^{pn} r_k^{pn}}{r^{pn} r^{pn}} \right) \right] \delta_{pq} \end{aligned} \quad (8)$$

식(8)을 식(6)에 적용하여 계산을 하면, 방향에 따른 cubic system 의 탄성계수를 계산할 수 있다.

## 2.2 이론값 계산 결과

Table 1 은 식(6)의 계산 결과로 Young's modulus 와 Poisson's ratio 를 나타낸 것이다. 먼저 bulk 모델의 cubic system 에 대한  $C_{ijkl}$  를 계산한 후에 좌표변환을 통하여 {100}과 {110}의 표면에 대한 <100> 방향과 <110> 방향의 Young's modulus 와 Poisson's ratio 를 각각 계산하였다.

이 결과는 두꺼운 박막이 가지는 탄성계수를 의미하며 박막의 방향에 따라 Young's modulus 와 Poisson's ratio 가 다른 값을 나타낸다. 특히 Poisson's ratio 의 경우 등방성(isotropic) 재료와는 다르게 -0.24 ~ 1.00 의 값을 나타내고 있다.

## 3. 분자동역학 전산모사

### 3.1 전산모사 모델링

본 연구에는 나노박막의 탄성계수를 계산하기 위하여 분자동역학 프로그램으로 Sandia National

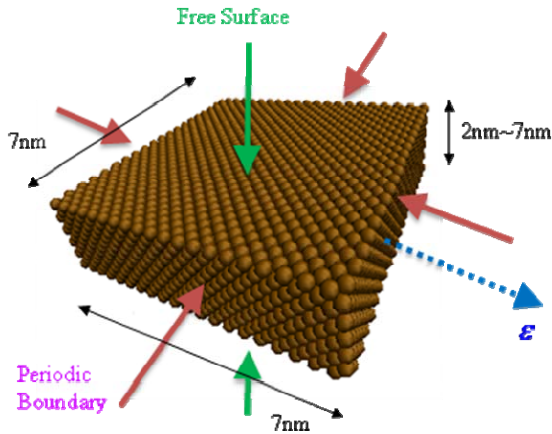


Fig. 1 {100}/<100> nanofilm model

Lab.에서 개발한 LAMMPS 를 사용하였다.

나노박막의 재료로는 천이금속 중 10 족과 11 족에 해당하는 6 개의 금속(Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au)를 사용하였다. 원자간에 상호 작용력으로는 Daw 와 Baskes 의 EAM potential<sup>(3)</sup>을 사용하였다.

전산모사에서는 직교이방성 특성을 가지는 세 종류의 방향에 대해서 모델을 사용하였다. 첫번째 모델은 {100}/<100> 모델로 {100} 표면을 가지는 나노박막의 <100> 방향으로 인장을 가하였을 때의 모델이다. 두번째 모델은 {100}/<110> 모델로 {100} 표면의 나노박막의 <110> 방향의 탄성계수를 계산하는데 사용하였다. 마지막 세번째 모델은 {110} 방향의 표면을 가지는 나노박막으로 면내 방향은 각각 <110> 방향과 <100> 방향을 가진다.

경계조건은 면내방향(in-plane direction)으로는 주기경계조건(periodic boundary condition)을 부여하여 길이가 무한하다고 가정하였고, 두께방향에 대해서는 자유경계(free boundary)를 부과하여 자유롭게 수축과 팽창이 가능한 박막을 모델링 하였다.

{100} 박막은 가로세로 방향으로 각각 20 개의 단위격자(unit cell)를 배열하였고, {110} 모델은 각각 14 개, 20 개의 단위격자를 배열하였다. 두께 방향은 {100} 모델의 경우 5,10,15,20 개의 단위격자를, {110} 박막의 경우 4,7,10,14 개의 단위격자를 배열하여 2~7 nm 의 두께를 가지도록 하였다.

### 3.2 전산모사 방법

전산모사는 초기 relaxation 과정을 수행한 후에 quasi-static method 를 이용하여 응력(stress)을 측정하는 방식으로 진행하였다.

초기 relaxation 과정은 stress 가 없는 초기 평형 상태(equilibrium state)를 찾는 과정으로 NPT 를 100ps 수행한 후에, 50ps 의 추가 모사과정을 통하여 100 개의 데이터를 샘플링하여 초기값으로 사용하였다. 이때 원자들의 위치를 변형률(strain)이 '0'인 free stress 상태로 간주한다.

응력의 측정은 NVT 200ps 과정을 통하여 면내 한방향(x 방향)으로 원자들을  $\epsilon = 0.01$  만큼 변형시킨 후에, NVT 50ps 동안 100 개의 샘플링을 수행하여 데이터로 사용한다. 이 과정 이후에는  $\epsilon$  을 0.02, 0.03 순으로 늘려가며  $\epsilon = 0.05$  까지 측정을 반복하여 수행하였다.

본 연구에서의 전산모사는 0.1K 의 온도하에서 수행되었으며, virial stress 를 계산하여 응력으로 사용하였다.

{100}/<100> 모델과 {100}/<110> 모델은 각각 면내 한 방향(x 방향)만 변형을 주어 전산모사를 수행하였다. {110} 방향의 해석을 위해서는 면내의 두 방향(<110>방향과 <100>방향)의 데이터가 모두 필요하므로 x 방향과 y 방향 변형에 대한 전산모사를 각각 수행하여 데이터로 사용하였다.

## 4. 탄성계수 계산 방법

### 4.1 2 차원 구조물의 구성방정식

나노와이어와 같은 1 차원 구조물은 입력된 변형률에 대한 응력을 측정하여, '응력(stress) / 변형률(strain)' 의 계산으로 간단하게 Young's modulus 를 계산할 수 있다. 그러나 나노박막과 같은 2 차원 구조물은 면내방향에 대하여 각각 3 개의 응력과 변형률이 존재하므로 간단하게 계산이 되지 않고, 2 차원 구성방정식을 이용하여 계산을 하여야 한다.

$$\begin{Bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_6 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{26} \\ sym. & & C_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_6 \end{Bmatrix} \quad (9)$$

일반적인 재료의 경우 2 차원 구성방정식에서 식(9)와 같이  $C_{11}$ ,  $C_{22}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{16}$ ,  $C_{26}$ ,  $C_{66}$  의 여섯개의 elastic constants 가 필요하지만, 직교이방성(orthotropic) 재료의 경우  $C_{16}$ ,  $C_{26}$  가 '0'이 되어 식(10)과 같이 4 개의 탄성계수만 필요하게 된다.

$$\begin{Bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_6 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & 0 \\ & C_{22} & 0 \\ sym. & & C_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_6 \end{Bmatrix} \quad (10)$$

보다 더 특별한 경우의 예로 본 연구에서 수행된 {100}/<100> 과 {100}/<110> 박막의 경우, 면내 가로와 세로 방향이 동일한 방향군(direction family)을 나타내므로  $C_{11}$  와  $C_{22}$  가 같은 값을 가지게 된다. 전단 변형의 경우 독립적으로 표현될

수 있으므로, 이러한 경우 구성방정식은 식(11)과 같이 더욱 간단하게 표현할 수 있다.

$$\begin{Bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ \text{sym.} & C_{11} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \end{Bmatrix} \quad (11)$$

#### 4.2 3<sup>rd</sup> order elastic constants 을 이용한 비선형 구성방정식의 적용

분자동역학을 이용한 정량적 해석에 있어서 가장 어려운 부분은 데이터의 편차(deviation)가 크다는 점이다. 또 하나의 다른 문제점은 두께가 얇은 나노박막의 경우 relaxation 을 과정을 통하여 stress 가 '0'인 평형상태(equilibrium state)를 찾아야 하는데 있다. 따라서 전산모사를 통해 얻은 평형상태에는 정확하게 응력(stress)이 '0'인 상태가 아니고 약간의 초기 응력이 존재할 수 있다.

전산모사를 수행하는데 있어서 위에서 언급한 두 가지 문제점으로 인하여  $\varepsilon < 0.01$  인 경우에 대해서는 전산모사를 통하여 정량적인 데이터를 획득하는데 어려움이 많다. 따라서 본 연구에서는  $\varepsilon$  을 0.01 단위로 0.01~0.05 까지 증가시키면서 데이터를 획득하였다.

변형률( $\varepsilon$ )을 크게 하여 데이터를 획득함에 따라 발생하는 문제는 전산모사를 통하여 데이터를 획득하는 응력-변형률 관계가 더 이상 선형 관계가 아니라는 데 있다.

이러한 문제를 해결하고자 본 연구에서는 3<sup>rd</sup> order elastic constant 인  $C_{ijklmn}$  을 이용한 2 차식을 이용하여 비선형 구간에서의  $C_{ijkl}$  을 계산하였다. 고차항을 포함한 응력-변형률 관계식은 식(12)와 같이 표현된다.

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} + C_{ijklmn} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{mn} + C_{ijklmnpq} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{mn} \varepsilon_{pq} + \dots \quad (12)$$

위의 식에서  $\varepsilon_{kl}$  의 2 차항까지만 고려하면 응력 ( $\sigma_{ij}$ )은 아래와 같이  $C_{ijkl}$  와  $C_{ijklmn}$  로 표현된다.

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} + C_{ijklmn} \varepsilon_{kl} \varepsilon_{mn} \quad (13)$$

식(13)을 Voigt notation 을 사용하여 표현하면 식(14)와 같이 나타낼 수 있다.

$$\sigma_i = C_{ij} \varepsilon_j + C_{ijk} \varepsilon_j \varepsilon_k \quad (14)$$

직교이방성(orthotropic) 재료에서 변형률이  $\varepsilon_1$  만 존재하는 경우( $\varepsilon_2 = 0$ ), 위의 식은 아래와 같이 비교적 간단하게 기술할 수 있다. (... 으로 생략된

부분은 모두 '0'이 된다.)

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= C_{11} \varepsilon_1 + \dots + C_{111} \varepsilon_1^2 + \dots \\ \sigma_2 &= C_{21} \varepsilon_1 + \dots + C_{211} \varepsilon_1^2 + \dots \end{aligned} \quad (15)$$

변형률이  $\varepsilon_2$  만 존재하는 반대의 경우( $\varepsilon_1 = 0$ )에는 아래와 같이 표현된다.

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= C_{12} \varepsilon_2 + \dots + C_{122} \varepsilon_2^2 + \dots \\ \sigma_2 &= C_{22} \varepsilon_2 + \dots + C_{222} \varepsilon_2^2 + \dots \end{aligned} \quad (16)$$

전산모사를 통하여 얻어진 데이터로부터  $C_{ijkl}$  와  $C_{ijklmn}$  의 탄성계수(elastic constants)를 구하기 위하여 최소자승법(Least square method)를 사용하였다.

$$\begin{aligned} \Pi &= \sum (\sigma_i - \hat{\sigma}_i)^2, \\ \frac{\partial \Pi}{\partial C_{ij}} &= 0, \\ \frac{\partial \Pi}{\partial C_{ijk}} &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

위의 식에서  $\sigma_i$  는 식(14)의 응력-변형률 관계식에서 계산된 응력을 나타내고,  $\hat{\sigma}_i$  은 전산모사를 통하여 계산된 virial stress 이다.

#### 4.3 해석방법의 검증

3<sup>rd</sup> order elastic constants 와 최소자승법을 이용한 해석방법의 검증을 위해 Foiles<sup>(6)</sup> 의 계산 결과와 비교하였다.

탄성계수(elastic constant)의 벌크(bulk)값을 계산하기 위해서 x, y, z 방향 모두 주기경계조건(PBC, Periodic boundary condition)을 적용하였고,  $\varepsilon$  을 0.01 단위로 0.01~0.05 까지 증가시키면서 응력을 측정하였다. 사용된 모델의 크기는 세 방향 모두 5 개의 unit cell 로 이루어진 모델을 사용하였고, 3<sup>rd</sup> order elastic constant 와 최소자승법(least square method)를 모두 적용하여 해석하였다.

Table 2 의 해석결과를 기록한 도표로, Foiles 가 계산한 값과 매우 잘 일치하고 있음을 보여주고 있다.

Table 2 Elastic constants of bulk materials

	(단위: GPa)					
	Cu	Ag	Au	Ni	Pd	Pt
C11	167 (167)	129 (129)	183 (183)	233 (233)	217 (218)	302 (303)
C12	123 (124)	90 (91)	158 (159)	153 (154)	183 (184)	271 (273)

※ ( )는 Reference 6 의 계산값

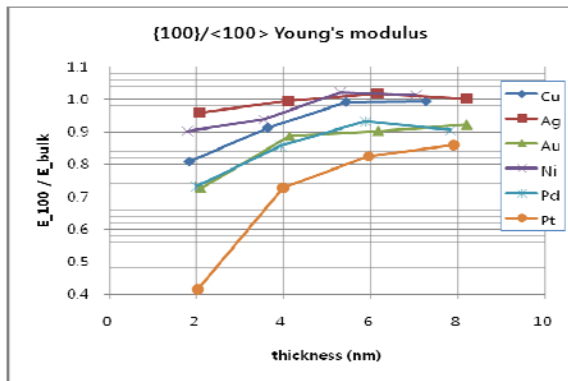


Fig. 2 {100}/<100> Young's modulus

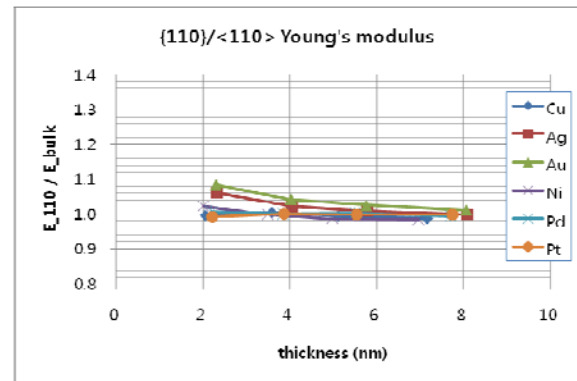


Fig. 5 {110}/<110> Young's modulus

## 5. 전산모사 결과

### 5.1 {100}/<100> 결과

Fig. 2 는 {100}/<100> 방향의 Young's modulus 계산 결과를 나타낸 그림이다. 값의 비교를 위하여 벌크값으로 무차원하여 도시하였다.

정도의 차이는 있지만 6 개의 금속 모두 두께가 작아지면 modulus 값이 작아지는 결과를 보여주고 있다. Ag 와 Ni 는 2nm 의 작은 두께의 박막이라도 10% 미만의 modulus 의 변화를 나타내고 있고, 반면에 2nm 의 두께에서 Cu 는 20%, Au 와 Pd 는 30%, 그리고 Pt 는 60%까지 modulus 감소한다.

Young's modulus 와는 반대로 {100}/<100> 모델의 Poisson's ratio 는 두께가 감소하면 증가하는 경향을 보인다. Young's modulus 의 변화가 큰 재료는 Poisson's ratio 또한 큰 변화를 보여주고 있다.

### 5.2 {100}/<110> 결과

Fig. 3 은 {100}/<110> 모델의 두께에 따른 Young's modulus 를 나타낸 그림이다. {100}/<100> 모델과는 반대로 두께가 감소하면 Young's modulus

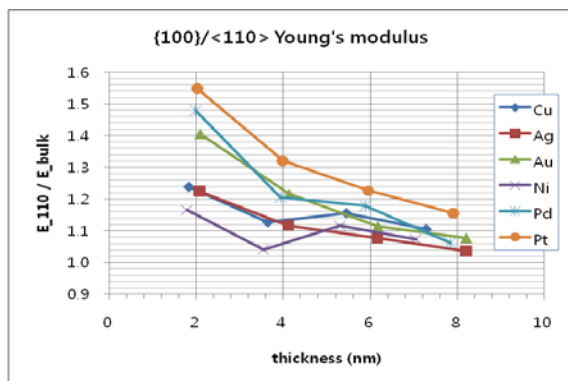


Fig. 4 {100}/<110> Young's modulus

가 증가하는 경향을 나타내고 있다. Poisson's ratio 의 경우는 -0.2 ~ 0.0 사이의 음수값을 나타내는 특징이 있으며, 두께에 따른 변화는 크지 않다.

### 5.3 {110}/<110> 결과

{110}/<110> 모델은 {110} 표면을 가지는 박막으로 면내에 직교하는 두 축 (x 축과 y 축)의 방향이 각각 <110>과 <100>으로 다른 방향을 가진다. <110> 방향의 Young's modulus 는 두께가 작아지면 약간 증가하거나 거의 변화가 없다. 가장 변화가 큰 Au 와 Ag 의 경우도 두께가 2nm 일 때 10% 미만의 증가를 보이고 있다. Poisson's ratio 는 두께가 감소하면 거의 일정한 값을 나타내며, 재료에 따라 0.8 ~ 1.2 의 비교적 큰 값을 가진다.

### 5.4 {110}/<100> 결과

{110}/<100> 방향은 {100}/<100> 모델과 마찬가지로 두께가 감소하면 Young's modulus 가 감소하지만, 재료에 따라 감소폭이 0% ~ 15% 정도로 {100} 박막에 비해서는 매우 작다. Poisson's ratio 는 {110}/<110> 모델과 마찬가지로 거의 변화가 없으며, 두께의 변화에 상관없이 재료에 따라 0.4 ~ 0.5 사이의 일정한 값을 나타낸다.

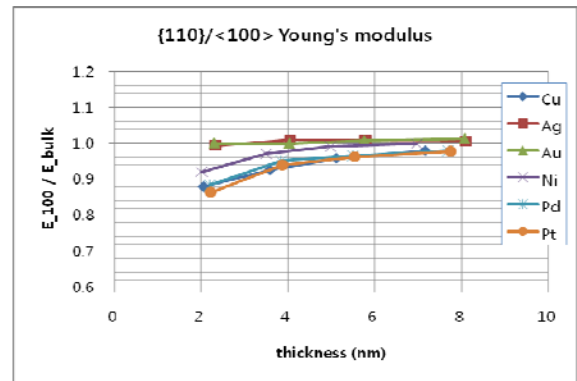


Fig. 3 {110}/<100> Young's modulus

## 6. 결 론

본 연구에서는 분자동역학 전산모사를 통하여 두께의 변화에 따른 천이금속 영역에 해당하는 나노박막의 탄성계수의 변화에 대하여 고찰하였다. 본 연구를 통하여 분자동역학을 이용한 나노박막의 해석방법으로 3<sup>rd</sup> order elastic constant와 최소자승법을 이용한 새로운 정량적인 해석방법을 제시하였다. 또한 나노박막의 탄성계수를 EAM potential을 이용한 해석해의 결과와 비교하여 방향과 두께에 따른 탄성계수의 변화를 알아보았다.

10 족과 11 족에 해당하는 천이금속(Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au)의 나노박막은 수 nm 스케일의 두께를 가질 때, 두께가 작아지면 {100}/<100> 방향의 Young's modulus가 감소하는 경향을 보이며, {100}/<110> 방향은 증가하는 경향을 보인다. {110} 박막의 경우 두께의 변화에 대한 경향성은 {100} 박막과 유사하지만 변화의 폭이 상대적으로 작게 나타난다.

Poisson's ratio의 경우 방향에 따라 -0.24 ~ 1.2의 값을 나타내며, {100} 박막은 두께에 따라 변하지만 {110} 박막에서는 두께와 상관없이 거의 일정한 값을 나타낸다.

## 후 기

본 연구는 과학기술부가 주관하는 국가지정연구사업의 연구비지원에 의해 수행되었습니다. (No. R0A-2007-000-20109-0)

## 참고문헌

- (1) L. G. Zhou and Hanchen Huang, 2004, "Are surfaces elastically softer or stiffer?", *Applied Physics Letters*, Vol. 84, No. 11, pp. 1940~1942
- (2) F. H. Streitz, R.C. Cammarata and K. Sieradzki, 1994, "Surface-stress effects on elastic properties. I. Thin metal films", *Physical Review B*, Vol. 49, No. 15, pp. 10699~10706.
- (3) Murray S. Daw and M. I. Baskes, 1984, "Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals", *Physical Review B*, Vol. 29, No. 12, pp. 6443~6453.
- (4) D. J. Oh and R. A. Johnson, 1988, "Simple embedded atom method model for fcc and hcp metals", *J. Mater. Res.*, Vol. 3, No. 3, pp. 471~478.

(5) Remi Dingreville, Ambarish J Kulkarni, Min Zhou and Jianmin Qu, 2008, "A semi-analytical method for quantifying the size-dependent elasticity of nanostructures", *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 16, No. 2, 025002.

(6) S. M. Foiles, M. I. Baskes and M. S. Daw, 1986, "Embedded-atom method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys", *Physical Review B*, Vol. 33, No. 12, pp. 7983~7991.