

# 비선형 탄성효과를 고려한 FCC 나노박막의 순차적 멀티스케일 해석

## Sequential multiscale analysis of FCC nanofilm considering hyperelastic effect

김 원 배\* · 조 명 효\*\*

Kim, Wonbae · Cho, Maenghyo

### 요 약

본 논문에서는 표면효과와 비선형 탄성효과를 고려한 FCC 나노박막의 순차적 멀티스케일 해석 모델을 제시한다. 표면에서의 구성방정식은 표면응력과 표면탄성계수를 이용하여 선형으로 표시되며, 표면효과를 나타내기 위한 표면물성들은 EAM 포텐셜을 이용한 원자적 계산 방법으로 계산된다. 두께가 얇은 나노박막은 표면응력으로 인하여 면내 방향으로 수축 또는 인장의 변형이 발생하게 된다. 나노박막의 평형상태에서의 변형율은 두께가 얇은 박막의 경우 재료가 선형 탄성 영역을 벗어나는 값을 가지는 경우가 많으므로 나노박막의 해석시 벌크 영역의 비선형 탄성 효과를 고려해야 한다. 이러한 비선형 탄성 효과를 고려하기 위해 본 연구에서는 FCC 구조를 가지는 금속의 비선형 탄성 모델을 제시하고, EAM 포텐셜로 계산된 응력과 탄성 계수를 이용하여 매칭 기법을 통하여 비선형 탄성 모델의 계수들을 결정한다. 또한 Cauchy-Born Rule 모델과 분자동역학 전산모사를 통하여 본 연구에서 제안된 비선형 탄성 모델에 대한 검증을 수행한다.

**keywords** : multiscale, surface effect, hyperelastic, FCC, nanofilm, surface stress, finite element

### 1. 서 론

격자구조를 가지는 고체 표면층의 원자는 표면 위로는 원자의 배열이 없으므로 인접하는 원자의 수가 벌크영역의 원자보다 작은 값을 가진다. 이러한 이유로 표면에서의 원자는 벌크영역의 원자보다 높은 에너지 상태를 가지게 되며, 표면에서 표면응력이 존재하게 된다. 수백 나노미터 스케일의 나노박막의 경우는 표면 에너지와 표면응력에 의한 표면효과가 비교적 적게 나타나지만, 수 나노미터 또는 수십 나노미터의 두께를 가지는 나노박막의 경우는 표면대부피비 (Surface to volume ratio)가 커짐에 따라 표면효과에 대한 영향이 커지게 되어 유한요소해석을 통한 기계적 거동 해석시 반드시 표면효과가 고려되어야 한다.

표면효과를 나타내기 위한 연속체 모델로 Gurtin과 Murdoch(1975; 1978)는 등방성 표면에 대한 표면 탄성 모델 (surface elasticity model)을 제안하였다. 이 모델에서 표면의 구성방정식은 표면응력과 표면의 라미 상수 (surface Lamé constant)로 표현된다. 그러나 Gurtin과 Murdoch이 제안한 표면 탄성 모델은 {110}과 같

\* 정희원 · 서울대학교 기계항공공학부 박사과정 wbkim@snu.ac.kr

\*\* 정희원 · 서울대학교 기계항공공학부 교수 mhcho@snu.ac.kr

이 직교이방성 표면이나 일반적인 비등방성 표면에는 적용하기 어려운 단점이 있다. 따라서 본 연구에서는 표면응력과 표면탄성계수로 표시되는 표면 선형 탄성모델 (surface linear elasticity model)을 구성방정식으로 사용하였다.

FCC 격자구조를 가지는 천이금속의 경우 선형 탄성모델에 사용되는 표면응력과 표면탄성계수는 Dingreville과 Qu(2007)가 제안한 원자적 계산방법을 이용하여 계산이 가능하다. 본 연구에서는 Kim과 Cho(2010)가 제안한 surface relaxation model과 EAM 포텐셜(Foiles 등, 1986)을 이용하여 표면물성을 계산하였다. 이렇게 계산된 표면물성들로 이루어진 표면효과를 고려하여 유한요소 정식화를 수행하면 연속체 기반의 순차적 멀티스케일 해석의 수행이 가능하고 크기에 따른 영률 (Young's modulus)의 변화도 예측이 가능하다. 하지만 표면효과만을 고려하여 계산된 영률은 분자동역학으로 계산된 영률과 일치하지 않는데, 이것은 표면응력으로 인하여 발생하는 면내 방향의 변형률에 대한 고려가 없었기 때문이다. 수 나노미터 두께를 가지는 구리(copper) 나노박막의 경우 평형상태에서의 면내방향 변형률은 1~2 %의 크기를 가지게 되는데, 이 경우에는 벌크영역의 재료 물성이 선형 탄성 영역을 벗어나게 되므로 비선형 탄성효과를 고려해야 두께 변화에 따른 나노구조물의 물성의 변화를 예측할 수 있다.

본 연구에서는 이러한 비선형 탄성효과를 고려하기 위해 FCC 격자구조를 가지는 천이금속의 새로운 비선형 탄성 모델을 제시하고, 비선형 탄성 모델에 필요한 탄성계수들을 Cauchy-Born Rule을 이용하여 원자적 계산을 수행하여 얻어진 응력과 탄성계수와 최소자승법을 이용한 매칭 기법으로 계산한다.

## 2. 표면효과를 고려한 유한요소 정식화

본 연구에서는 나노박막의 표면효과를 고려한 연속체 기반의 멀티스케일 해석 모델을 만들기 위해 Mindlin 판이론을 사용하였다. Mindlin 판이론의 변위장에서 면내 방향의 변위  $u_\alpha$ 는  $u_\alpha = u_\alpha^0 + x_3\psi_\alpha$ 로 정의되고, 면외방향의 변위  $u_3$ 는  $u_3 = u_3^0 = w$ 로 정의된다. 여기서  $u_\alpha^0$ 와  $u_3^0$ 는 각각 중앙면에서의 면내방향과 면외방향의 변위를 나타내고,  $\psi_\alpha$ 는 노드에서의 회전각 변위를 나타낸다. 그리스 문자로 표시된 첨자  $\alpha$ 는 면내방향을 나타낸다. ( $\alpha = 1, 2$ )

가상일의 원리로부터 나노박막의 가상일은  $\delta W_{total} = \delta W_{int} + \delta W_{ext}$  과 같이 내부 가상일 (internal virtual work)과 외부 가상일(external virtual work)의 합으로 표현된다. 외부 가상일은 다음과 나타낼 수 있다.

$$\delta W_{ext} = \int_{\Omega} p_\alpha \delta u_\alpha^0 + p_3 \delta w dA \quad (1)$$

여기서  $p_\alpha$ 와  $p_3$ 는 면내방향과 면외방향으로 작용하는 단위면적당 힘을 나타낸다.

내부 가상일은  $\delta W_{int} = -\delta U = -\delta U_{bulk} - \delta U_{surf}$  와 같이 벌크에너지와 표면에너지로 구성된다. 여기서 벌크에너지와 표면에너지는 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\delta U_{bulk} = \int_v \sigma_{\alpha\beta} \delta \epsilon_{\alpha\beta} + \sigma_{3\alpha} \delta \gamma_{3\alpha} dv \quad (2)$$

$$\delta U_{surf} = \int_{\Omega^\pm} \tau_{\alpha\beta}^\pm \delta \epsilon_{\alpha\beta}^\pm + \tau_{3\alpha}^\pm \delta \gamma_{3\alpha}^\pm dA \quad (3)$$

여기서  $\tau_{\alpha\beta}^\pm$ 와  $\tau_{3\alpha}^\pm$ 는 각각 윗면( $\Omega^+$ )과 아랫면( $\Omega^-$ )에서의 면내방향과 면외방향의 표면응력을 나타내고,

$\epsilon_{\alpha\beta}^{s\pm}$ 와  $\gamma_{3\alpha}^{s\pm}$ 는 각각 면내방향과 면외방향의 윗면( $\Omega^+$ )과 아랫면( $\Omega^-$ )에서의 변형률을 나타낸다.

선형 탄성 가정에 의한 표면에서의 구성방정식은 다음과 같다.

$$\tau_{\alpha\beta}^{\pm} = \tau_{\alpha\beta}^0 + T_{\alpha\beta\kappa\lambda} \epsilon_{\kappa\lambda}^{\pm} \quad (4)$$

여기서  $\tau_{\alpha\beta}^0$ 는 무한한 두께를 가지는 표면에서의 표면응력을 나타내고,  $T_{\alpha\beta\kappa\lambda}$ 는 표면 탄성계수 (surface elastic tensor)를 나타낸다. 본 연구에서는 면외 방향의 표면응력  $\tau_{3\alpha}^{\pm}$ 을 '0'으로 가정하였다.

유한요소 정식화 과정을 통하여 구해진 최종 변분식은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \delta U = & \delta d^T \left[ \int_{\Omega} B_m^T [A + 2T] B_m + B_b^T [D + \frac{h^2}{2} T] B_b dA \right] d + \delta d^T \left[ \int_{\Omega} k B_s^T [G] B_s dA \right] d \\ & + \delta d^T \left[ \int_{\Omega} B_m^T [B] B_b + B_b^T [B] B_m dA \right] d + \delta d^T \left[ \int_{\Omega} 2B_m^T [G] \{\tau^0\} dA \right] d \end{aligned} \quad (5)$$

여기에서  $d$ 는 절점 변위를 나타내고,  $B_m, B_b, B_s$ 는 각각 membrane, bending, shear에 대한 변위와 변형률의 관계를 나타내는 행렬이고,  $[A], [D], [G], [B]$ 는 각각 membrane, bending, shear, membrane-bending coupling에 대한 벌크영역의 강성행렬을 나타내고, 표면응력  $\{\tau^0\}$ 와 표면 탄성계수  $[T]$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$\{\tau_{\alpha\beta}^0\} = [\tau_{11}^0, \tau_{22}^0, \tau_{12}^0]^T, \quad [T] = \begin{bmatrix} T_{1111} & T_{1122} & T_{1112} \\ T_{2211} & T_{2222} & T_{2212} \\ T_{1211} & T_{1222} & T_{1212} \end{bmatrix} \quad (6)$$

### 3. FCC 격자구조의 비선형 탄성 모델

등방성 (isotropic) 재료의 경우 Neo-Hookean model 또는 Mooney-Rivlin model 등이 비선형 탄성 (hyperelastic) 모델로 많이 사용되지만, FCC 격자구조를 가지는 재료는 등방성이 아니므로 등방성 재료에 사용되는 비선형 탄성 모델의 사용이 불가능 하다. 따라서 본 연구에서는 FCC 격자구조에 맞는 새로운 비선형 탄성 모델을 제안하고 이를 분자동역학 또는 원자적 계산을 통하여 검증하고자 한다.

본 연구에서 제안하는 비선형 탄성 모델은 식 (7)과 같이  $L_1, L_2, \dots, L_n$ 의  $n$ 개의 다항식 기저군 (polynomial basis)으로 이루어진 다항식 형태의 내부에너지를 가지는 모델로, 각각의 polynomial basis  $L_i$ 는 strain invariant로 표현된다.

$$U = \sum_{i=1}^n a_i L_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=i}^n a_{ij} L_i L_j + \sum_{i=1}^n \sum_{j=i}^n \sum_{k=j}^n a_{ijk} L_i L_j L_k + \dots \quad (7)$$

여기에서  $a_i, a_{ij}$ 와  $a_{ijk}$ 는 실험을 데이터를 통한 최소자승법에 의한 매칭기법으로 결정해야 하는 비선형 탄성 모델의 매개변수들이다. 본 연구에서는 실험 대신에 원자적 계산을 통하여 응력과 탄성계수를 계산하여, 이 데이터를 이용하여 비선형 탄성계수들을 결정하였다.

FCC 격자구조는 공간군 (space group)으로 분류상  $Fm\bar{3}m$ 의 point group에 해당되며, 결정학적 분류 (crystal class)로는 Cubic system의 hoxoctahedral class에 해당한다. 이 경우 9개의 strain invariant가 존재하며, 이를 다항식의 기저군 (Polynomial basis)  $L_i$ 로 사용하여 식 (8)의 비선형 탄성 매개변수 ( $a_i, a_{ij}, a_{ijk}$ )

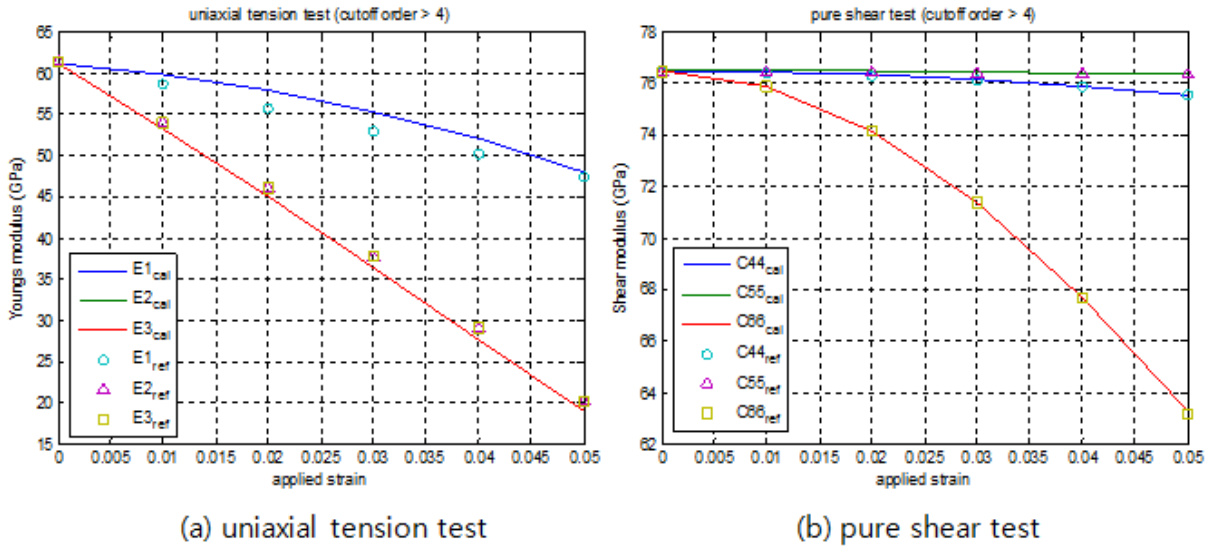


그림 1 Elastic moduli calculated from proposed hyperelastic model. (a) Young's moduli by uniaxial tension test. (b) Shear moduli by pure shear test.

들을 계산한다. 그림 1은 인장력과 전단력이 가해지는 경우의 탄성계수(Young's modulus)와 전단계수(shear modulus)의 변화를 나타내는 그림으로 본 연구에서 제안한 비선형 탄성 모델의 결과와 ref 값으로 제시된 원자적 계산의 결과와 비교적 잘 일치함을 나타내고 있다.

### 감사의 글

본 연구는 한국과학재단이 주관하는 중견연구자지원사업(No. 2010-0018920)과 한국과학재단이 주관하는 세계수준의 연구중심대학(World Class University, WCU) 육성사업(R31-2009-000-10083-0)의 지원을 받아 수행되었습니다.

### 참고문헌

- Dingreville, R. and Qu, J. (2007) A semi-analytical method to compute surface elastic properties, *Acta Mater.*, 55, pp.141~147.
- Foiles, S.M., Baskes, M.I., and Daw, M.S. (1986) Embedded-atom method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Phys. Rev. B*, 33(12), pp.7983~7991.
- Gurtin, M.E. and Murdoch, A.I. (1975) A continuum theory of elastic material surfaces, *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 57, pp.291~323.
- Kim, W. and Cho, M (2010) Surface effect on the self-equilibrium state and size-dependent elasticity of FCC thin films, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 18, 085006
- Smith, G.F. and Rivlin, R.S. (1958) The strain-energy function for anisotropic elastic materials, *Trans. Amer. Math. Soc.*, 88, pp.175~193.