

표면 효과가 있는 나노 허니콤 구조의 기계적 물성의 예측

Prediction of the Mechanical Properties of the Nano-sized Honeycomb Structures with Surface Effects

이 용 희* · 정 준 호** · 조 맹 효***
Lee, Yong-hee · Jeong, Joon-ho · Cho, Maeng-hyo

요 약

유한 요소 기법을 이용한 허니콤 구조물의 해석은 모델링 작업 및 격자 생성의 어려움뿐만 아니라 과도한 해석 시간이 요구되기 때문에 균질화 기법은 계산상의 효율성을 증대시킬 수 있는 매우 유용한 방법이라 할 수 있다. 그러나 나노 크기의 구조물에서는 표면 효과로 인하여 거시적인 구조물에서와는 매우 상이한 기계적 거동 양상을 띠게 되며 균질화 기법을 나노 크기의 허니콤 구조물에 적용하기 위해서는 이러한 표면 효과를 반영해야만 한다. 본 논문에서는 표면 효과를 고려한 유한 요소를 제안하고 이를 이용하여 나노 크기의 3차원 허니콤 구조물을 균질화 기법을 이용하여 등가의 2차원 판으로 대체하였다.

keywords : 표면효과, surface effect 나노 허니콤 구조, nano-sized honeycomb structure

1. 서 론

일반적으로 허니콤은 중량 대비 고강성을 실현시키는 구조물로서 다양한 분야에서 활용되고 있다. 나노 크기의 허니콤 구조물은 이와 더불어 부피 대비 넓은 표면적으로 인해 화학적 촉매나 충전량을 극대화 시키는 기능성을 겸비하게 되어 더욱 넓은 활용 가치를 가지게 되었다. 하지만 나노 크기의 구조물은 거시적 크기의 구조물과는 다른 물리적 거동을 보이고 있다. 나노 크기의 구조물에서의 특이한 기계적 거동은 표면 효과에 의한 것으로 밝혀졌으며 이 표면 효과는 표면에서의 원자간 결합 상태가 구조물 내부와 다르기 때문에 발생한다. 이와 같은 미시적인 구조의 변화는 구조물의 크기가 나노 크기로 작아지면 그 영향력을 무시할 수 없게 되며 정확한 기계적 거동을 예측하기 위해서 분자 동역학 해석(Molecular Dynamics Simulation)이 가장 일반적으로 이용되고 있다. 하지만 컴퓨터의 성능 및 수치 해석 방법의 발전에도 실제 제작되는 크기의 나노 구조물을 분자 동역학을 이용하여 해석하기에는 과도한 전산 자원의 요구되기 때문에 표면 효과를 고려한 연속체 모델 개발이 요구되었다.

구조물의 표면에 관한 구성방정식은 Gurtin 과 Murdoch [1]에 의해 처음으로 제안되어 이를 이용한 다양한 연속체 모델들이 나노 구조물 해석에 적용되어왔으며, 이러한 연속체 이론을 Cho, M 등[2]은 나노 박막 구조물을 해석하기 위해 Kirchhoff 판 이론에 기반한 유한 요소 모델을 개발하였다. 본 논문에서는 단결정 재료의 나노 허니콤 구조의 기계적 거동을 정확하게 예측하기 위해서 Gurtin과 Murdoch이 제안한 방법을

* 학생회원 · 서울대학교 기계항공공학부 석사과정 wickyguy@snu.ac.kr
** 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 박사과정 icdil@snu.ac.kr
*** 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 교수 mhcho@snu.ac.kr

수정하였으며 표면 효과를 고려한 유한 요소를 제시하고 균질화 기법과 차원 축소[3]를 통해 나노 크기의 허니콤 구조물의 기계적 물성치를 예측하였다.

2. 균질화

나노 크기의 허니콤 구조물의 경우, 그림 1과 같이 주기성을 보이는 박막으로 볼 수 있으며 이때 단위 셀의 길이 1과 전체 길이 L의 비율과 박막 필름의 두께 h와 전체 길이 L의 비율이 같다는 가정 하에 매개변수 $\epsilon = h/L$ 을 정의하게 된다. 이 매개변수를 이용하여 점근적으로 전개(asymptotic expansion)하여 얻어진 변위, 변형률 및 응력장을 평형방정식, 구성방정식 그리고 변위-변형률 관계식에 대입하게 되면 재귀적 형태의 방정식들을 얻게 된다.

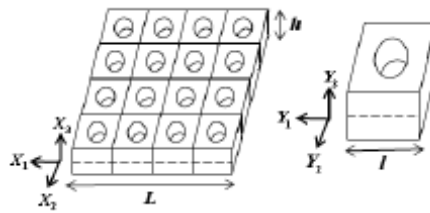


그림 1 주기성 구조와 단위 셀

그 방정식들을 통해 변위, 변형률 및 응력을 순차적으로 계산하게 되며 Kirchhoff 판 이론에서의 가정으로부터 다음과 같은 축약된 관계식을 얻게 된다.

$$\begin{Bmatrix} N_{\alpha\beta}^1 \\ M_{\alpha\beta}^1 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle C_{\alpha\beta\gamma\delta} \rangle + \langle C_{\alpha\beta\gamma\delta} \chi^{E_{\alpha\beta}} \rangle & \langle y_3 C_{\alpha\beta\gamma\delta} \rangle + \langle y_3 C_{\alpha\beta\gamma\delta} \chi^{E_{\alpha\beta}} \rangle \\ \langle y_3 C_{\alpha\beta\gamma\delta} \rangle + \langle y_3 C_{\alpha\beta\gamma\delta} \chi^{E_{\alpha\beta}} \rangle & \langle y_3^2 C_{\alpha\beta\gamma\delta} \rangle + \langle y_3^2 C_{\alpha\beta\gamma\delta} \chi^{E_{\alpha\beta}} \rangle \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} E_{\gamma\delta} \\ K_{\gamma\delta} \end{Bmatrix}. \quad (1)$$

식 (1)에서 $E_{\alpha\beta}$ 와 $K_{\alpha\beta}$ 는 거시적 스케일에서 정위된 단위 변형률과 단위 곡률을 의미하며, $\chi^{E_{\alpha\beta}}$ 와 $\chi^{K_{\alpha\beta}}$ 는 각기 $E_{\alpha\beta}, K_{\alpha\beta}$ 에 의한 응력과 굽힘 모멘트가 작용 할 때 발생하는 미시적 스케일에서의 주기 변위를 나타낸다. 따라서 합력과 변형률 및 곡률 관계식으로부터 등가의 강성 행렬을 얻어낼 수 있다.

3. 표면 효과의 고려한 유한 요소 모델

Gurtin과 Murdoch이 제안한 표면층의 구성방정식은 다음과 같이 정의된다.

$$\sigma_{\alpha\beta}^{s\pm} = \tau_0 \delta_{\alpha\beta} + (\mu_0 - \tau_0)(u_{\alpha,\beta}^{s\pm} + u_{\beta,\alpha}^{s\pm}) + (\lambda_0 + \tau_0)u_{r,r}^{s\pm} \delta_{\alpha\beta} + \tau_0 u_{\alpha,\beta}^{s\pm}, \quad (2)$$

위 식에서 표면 잔류 응력 τ_0 와 두 개의 라메 상수(Lame's constants) λ_0 와 μ_0 는 각 재료 고유의 물성치로 취급할 수 있다. 그러나 식 (2)는 등방성 재료에만 적용할 수 있기 때문에 결정 구조에서 나타나는 재료의 이방성을 고려할 수 없다. 본 연구에서는 표면층의 구성방정식을 결정하기 위해 분자동역학 해석 결과를 이용하였으며 표면층에서의 구성방정식은 다음 식 (3)로부터 유추할 수 있다.

$$C_{sur} = \begin{bmatrix} C_{11}^{MD} & C_{12}^{MD} & 0 \\ C_{12}^{MD} & C_{22}^{MD} & 0 \\ 0 & 0 & C_{66}^{MD} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{E_1 h}{(1-\nu_{12}\nu_{21})} & \frac{\nu_{12} E_2 h}{1-\nu_{12}\nu_{21}} & 0 \\ \frac{\nu_{21} E_1 h}{1-\nu_{12}\nu_{21}} & \frac{E_2 h}{1-\nu_{12}\nu_{21}} & 0 \\ 0 & 0 & G_{12} h \end{bmatrix}. \quad (3)$$

표면층에서의 구성방정식은 멤브레인 요소처럼 취급되어 3차원 유한 요소 모델에 추가되며 표면 효과를 고려한 유한 요소 모델은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$K = \int_V B^T C_{bulk} B dV + \int_A B_m^T C_{surface} B_m dA \quad (4)$$

4. 해석 결과의 분석

나노 크기의 허니콤 구조의 단위셀은 평면 상에서의 주기성을 만족하도록 그림 2에서와 같이 선택되어야 한다.

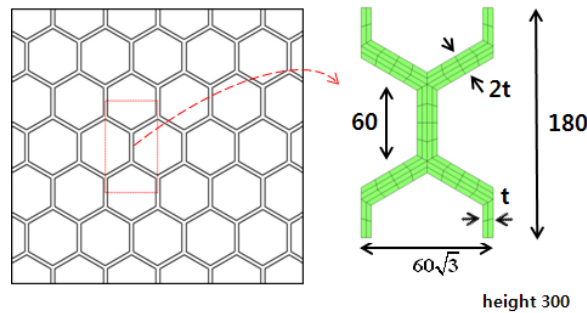


그림 2 허니콤 구조 단위셀

그림 (2)에서 보듯이 나노 허니콤 구조물의 벽은 서로 다른 격자 배열을 가짐으로 이에 따라 그림 (3)에서와 같이 각기 다른 구성 방정식을 표면에 적용하였으며 분자동역학 해석을 통해 얻어진 표면층에서의 구성 방정식은 식 (5)와 같다.

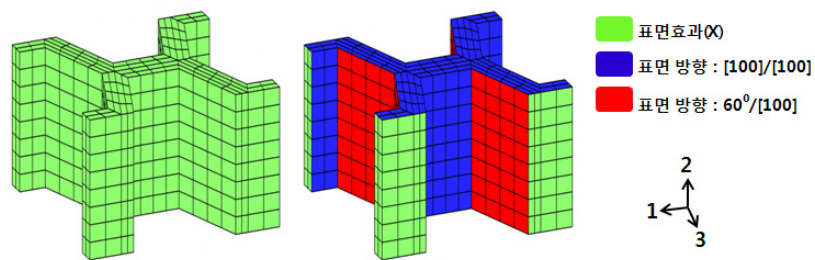


그림 3 방향에 따른 표면효과

$$C_{sur}^{[100]/[100]} = \begin{Bmatrix} 10.0930 & 24.2120 & 0 \\ 24.2120 & 10.0930 & 0 \\ 0 & 0 & 14.0045 \end{Bmatrix} \quad C_{sur}^{60^\circ/[100]} = \begin{Bmatrix} 5.3862 & 20.578 & 0 \\ 20.546 & -28.599 & 0 \\ 0 & 0 & 1.7591 \end{Bmatrix} \quad (5)$$

그림 3의 단위셀을 통해 예측한 나노 크기 허니콤 구조의 기계적 물성은 아래와 같다.

	A_{1111}	A_{1122}	A_{2222}	A_{1212}	D_{1111}	D_{1122}	D_{2222}	D_{1212}
Bulk	799.8387	763.6381	832.3465	20.48324	6.014E-12	5.710E-12	6.258E-12	1.720E-13
Surface	818.6038	729.0191	770.1716	73.11579	6.163E-12	5.461E-12	5.802E-12	5.687E-13
Surface/Bulk	1.023461	0.954666	0.925302	3.569542	1.024E+00	9.563E-01	9.271E-01	3.305E+00

표 1. 나노 크기의 허니콤 구조의 강성

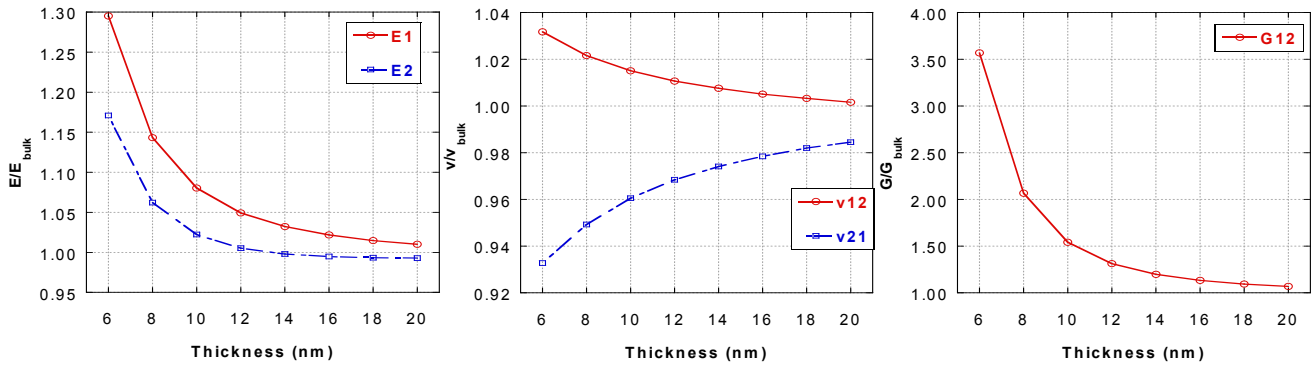


그림 4. 나노 크기의 허니콤 구조의 탄성계수, 푸아송비, 전단계수

그림 4를 보면 허니콤 구조의 벽면 두께가 얇아짐에 표면 효과에 의해 급격한 물성 변화를 보이게 되며 이는 곧 허니콤 구조물의 전역적 응답에 크나큰 영향을 끼치게 된다.

5. 결론

표면 효과에 의해 발생하는 나노 구조물의 특이적 거동을 묘사할 수 있는 유한 요소를 제시하였으며 효율적인 계산을 위해 균질화 기법을 적용하면 분자동역학 해석 방법에 비해 나노 크기의 허니콤 구조의 기계적 물성을 효율적으로 계산할 수 있다.

감사의 글

본연구는 2011년 서울대학교 교내 연구비 지원사업으로 이루어진 것으로, 본연구를 가능케한 WCU(World Class University)에 감사드립니다

참고문헌

- Gurtin, M.E., Murdoch, A.I. (1975), A continuum theory of elastic material surfaces, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 57, pp.291-323
- Cho, M., Choi, J., Kim, W. (2009), Continuum-based bridging model of nanoscale thin film considering surface effects, *Japanese journal of Applied Physics*, 48, 020219
- Buannic, N., Cartraud, P., Qeusnel, T. (2002), Homogenization of corrugated core sandwich panels, *Composite Structures*, 59, pp. 299-312