

표면효과를 고려한 박막구조의 멀티스케일 해석

Multi-scale Analysis of Thin film Considering Surface Effects

조 맹 효† 최 진 복* 정 광 섭**

Cho, Maenghyo Choi, Jinbok Jung, Kwangsub

(논문접수일 : 2007년 3월 8일 ; 심사종료일 : 2007년 5월 16일)

요 지

일반적으로 고전적인 탄성이론에서 매크로 스케일의 구조물의 물성은 구조물의 사이즈에 영향을 받지 않는다. 그 이유는 구조물 전체 체적에 대한 표면의 비율이 매우 작기 때문에 표면의 효과를 무시할 수 있기 때문이다. 그러나, 구조물 전체의 부피에 대한 표면의 비율이 커지게 되면 표면의 효과가 매우 중요한 역할을 하게 되며 지배적으로 나타나게 된다. 특히 나노 박막이나 나노 빔 등 나노 스케일의 구조물에서는 표면효과의 영향을 반드시 고려하여야만 한다. 분자 동역학 시뮬레이션은 이러한 나노 스케일의 구조물 역학적 해석을 위해서 그간 사용되어 온 일반적인 방법이었으나, 과도하게 요구되는 계산시간과 전산자원의 한계로 인해 여전히 수 나노 초 동안에 $10^6 \sim 10^9$ 개의 원자들에 대한 시뮬레이션이 가능한 정도이다. 따라서 실제적으로 MEMS/NEMS 분야에서 사용되는 서브마이크 스케일에서 마이크로 스케일의 구조물의 분자동역학 시뮬레이션을 통한 해석은 가능하나 설계를 목적으로 했을 때는 현실적이지 못하다. 따라서 본 연구에서는 이러한 분자 동역학 시뮬레이션 기법의 단점을 보완하고자 나노 스케일의 매우 작은 구조물에서 지배적으로 나타나는 표면효과를 고려할 수 있는 연속체 기반의 모델을 제시하고자 한다. 특히 본 논문에서는 박막구조물의 해석을 위하여 고전적인 Kirchhoff 평판이론을 바탕으로 표면효과를 고려할 수 있도록 하는 연속체 모델을 제안하고 이를 바탕으로 유한요소해석을 수행하여 그 해석 결과를 분자 동역학 시뮬레이션 결과와 비교 하였다.

핵심용어 : 표면효과, 멀티스케일 해석, 연속체, 유한요소해석

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 $10^6 \sim 10^9$ 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, multi-scale analysis, continuum, finite element method

1. 서 론

MEMS/NEMS 분야에서 박막(thin-film) 또는 빔(beam) 등의 나노구조물들의 응용이 가능해 짐으로 인해서 이러한 구조를 가지는 장치의 설계와 성능의 예측을 위하여 나노 구조물

의 물리적 또는 기계적 성질들을 시뮬레이션을 통해 파악해야 할 필요성이 대두되고 있다. 특히 이러한 나노 사이즈의 구조물의 물성은 두께가 얇아짐에 따라서 거시적(macro)인 스케일에서의 물성과는 다른 양상을 보이게 되는데, 이러한 현상은 실험(Cuenot *et al.*, 2004) 또는 분자동역학 시뮬레이션

† 책임저자, 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 교수

Tel: 02-880-1693 ; Fax: 02-886-1693

E-mail: mhcho@snu.ac.kr

* 서울대학교 기계항공공학부 대학원

** 서울대학교 기계항공공학부 대학원

• 이 논문에 대한 토론을 2007년 8월 31일까지 본 학회에 보내주시면 2007년 10월호에 그 결과를 게재하겠습니다.

(Cammarate *et al.*, 1989)을 통하여 확인되었다. 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 비율이 커지게 되면 표면 효과가 중요하며 지배적으로 작용하게 된다(Miller *et al.*, 2000). 따라서 이러한 박막구조를 정확하게 해석하기 위해서는 표면효과와 고려가 반드시 필요하다.

최근 분자동역학 시뮬레이션 분야의 발달로 인해 나노 스케일에서의 시뮬레이션이 가능해지게 되었고, 이에 대한 연구들이 활발하게 진행되고 있다. 그러나 전산자원의 한계와 과도하게 요구되는 계산시간상의 제약으로 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 *et al.*, 2004; Lim *et al.*, 2004). 따라서 본 연구에서는 고전적인 평판이론을 표면효과를 고려할 수 있도록 수정하여 나노 스케일의 박막구조 해석에 적용할 수 있는 연속체 모델을 제시하고 표면효과를 고려하는 인자는 분자동역학으로부터 도출하여 연속체 모델을 유한요소법으로 해석하는 계층적 멀티스케일 방법을 제안한다.

2. 표면효과를 고려한 Kirchhoff 평판이론 기반의 평형 방정식 유도

2.1 표면효과를 고려한 Kirchhoff 평판이론

두께가 매우 얇은 박막구조의 경우 Fig.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(thin film)구조의 경우 표면의 영향력을 무시할 수 없기 때문에 고전적인 평판 이론을 수정하여 표면효과를 고려할 수 있도록 해야 한다. 본 연구에서는 Kirchhoff 평판이론을 바탕으로 표면효과를 고려할 수 있는

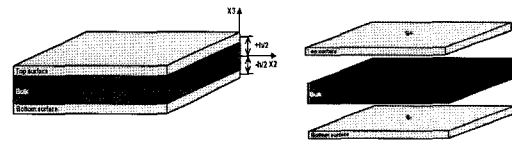


Fig. 1 Thin film structure

연속체 모델을 제안 한다.

여기서 bulk부분의 변위장과 상,하단의 표면(surface)의 변위장은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$u_\alpha = u_\alpha^0 - x_3 u_{3,\alpha}^0, \quad u_3 = u_3^0 \quad (1a)$$

$$u_\alpha^{s^+}, u_\alpha^{s^-}, u_3^{s^+}, u_3^{s^-} \quad (1b)$$

박막의 s^+ 와 s^- 표면상의 표면응력은 $\tau_{\alpha\beta}^+$ 와 $\tau_{\alpha\beta}^-$ 로 나타낼 수 있고 다음과 같은 평형방정식을 만족한다(Lu *et al.*, 2006; Gurtin *et al.*, 1978)

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

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

여기서 $\sigma_{\alpha 3}^+$ 와 $\sigma_{\alpha 3}^-$ 는 각각 $x_3 = \pm h/2$ 에서의 bulk의 응력(bulk stress)들을 나타낸다. 또한 표면과 bulk 사이의 변위 연속 조건은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$u_\alpha^{s^-} = u_\alpha \Big|_{z=-h/2} = (u_\alpha^0 - z w_{,\alpha}) \Big|_{z=-h/2} = u_\alpha^0 + \frac{h}{2} w_{,\alpha}, \quad u_3^{s^-} = w \quad (3a)$$

$$u_\alpha^{s^+} = u_\alpha \Big|_{z=h/2} = (u_\alpha^0 - z w_{,\alpha}) \Big|_{z=h/2} = u_\alpha^0 - \frac{h}{2} w_{,\alpha}, \quad u_3^{s^+} = w \quad (3b)$$

박막의 평형방정식을 유도하기 위하여 가상일의 원리(virtual work principle)를 사용한다.

$$\delta \Pi = \delta U - \delta W_E \quad (4)$$

여기서, U 는 내부변형에너지, W 는 외부에서 한 가상일을 나타낸다. 내부에너지는 표면과 bulk의 에너지를 각각 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\delta U = \delta U_{bulk} + \delta U_{surface} \quad (5a)$$

$$\delta U_{bulk} = \int_V \sigma_{ij} \delta \epsilon_{ij} dv \quad (5b)$$

$$\delta U_{surf} = \int_{\partial V} \tau_{\alpha\beta} \delta \epsilon_{\alpha\beta}^s + \tau_{\alpha 3} \delta \gamma_{\alpha 3}^s dv \quad (5c)$$

Kirchhoff 평판이론에서 변위장은 다음과 같이 가정된다.

$$u_\alpha = u_\alpha^o(x_1, x_2) - \frac{\partial w}{\partial x_\alpha} z \quad (6a)$$

$$u_3 = w(x_1, x_2) \quad (6b)$$

Kirchhoff 가정을 바탕으로 bulk 부분의 내부변형에너지와 표면의 에너지는 각각 다음과 같이 정리될 수 있다.

$$\begin{aligned} \delta U_{bulk} &= \int_{\Gamma} N_{\alpha\beta} v_\beta \delta u_\alpha^o - M_{\alpha\beta} v_\beta \delta w_{,\alpha} + M_{\alpha\beta,\beta} v_\alpha \delta w ds \\ &+ \int_{\Omega} -N_{\alpha\beta,\beta} \delta u_\alpha^o - M_{\alpha\beta,\alpha\beta} \delta w dA \end{aligned} \quad (7a)$$

$$\begin{aligned} \delta U_{surf} &= \int_{\Omega} (\tau_{\alpha\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta}^-) \delta u_{\alpha,\beta}^o + \frac{h}{2} (-\tau_{\alpha\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta}^-) \delta w_{,\alpha\beta} \\ &+ (\tau_{\alpha 3}^+ + \tau_{\alpha 3}^-) \delta w_{,\alpha} dA \end{aligned} \quad (7b)$$

따라서, 최종적인 변분식은 다음과 같이 얻어질 수 있다.

$$\begin{aligned} \delta U &= \delta U_{bulk} + \delta U_{surf} \\ &= \int_{\Omega} (N_{\alpha\beta} + \tau_{\alpha\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta}^-) \delta u_{\alpha,\beta}^o - \{M_{\alpha\beta} + \frac{h}{2} (\tau_{\alpha\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta}^-)\} \delta w_{,\alpha\beta} \\ &+ (\tau_{\alpha 3}^+ + \tau_{\alpha 3}^-) \delta w_{,\alpha} dA \end{aligned} \quad (8)$$

내부변형에너지와 외부 일에 의한 에너지를 고려하여 다음과 같이 변분을 취함으로써 평형방정식을 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} \delta \Pi &= \int_{\Omega} -(N_{\alpha\beta,\beta} + \tau_{\alpha\beta,\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta,\beta}^-) \delta u_\alpha^o - \{M_{\alpha\beta,\alpha\beta} + \frac{h}{2} (\tau_{\alpha\beta,\alpha\beta}^+ \\ &- \tau_{\alpha\beta,\alpha\beta}^-)\} \delta w - (\tau_{\alpha 3,\alpha}^+ + \tau_{\alpha 3,\alpha}^-) \delta w - p_\alpha \delta u_\alpha^o \\ &- p_3 \delta w dA + B.T. \\ \delta U^{B.T.} &= \delta U_{bulk}^{B.T.} + \delta U_{surf}^{B.T.} = \int_{\Gamma} (N_{\alpha\beta} v_\beta + \tau_{\alpha\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta}^-) v_\beta \delta u_\alpha^o \\ &- \left\{ M_{\alpha\beta} + \frac{h}{2} (\tau_{\alpha\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta}^-) \right\} v_\alpha v_\beta \delta \left(\frac{\partial w}{\partial v} \right) \\ &+ \left\{ \left(\frac{\partial M_{\alpha\beta}}{\partial s} + \frac{h}{2} \frac{\partial (\tau_{\alpha\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta}^-)}{\partial s} \right) t_\beta + M_{\alpha\beta,\beta} \right. \\ &\left. + \frac{h}{2} (\tau_{\alpha\beta,\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta,\beta}^-) + (\tau_{\alpha 3}^+ + \tau_{\alpha 3}^-) \right\} v_\alpha \delta w ds \end{aligned} \quad (9)$$

식 (9)로부터 유도되는 평형 방정식은 다음과 같다.

$$N_{\alpha\beta,\beta} + \tau_{\alpha\beta,\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta,\beta}^- + p_\alpha = 0 \quad (10a)$$

$$M_{\alpha\beta,\alpha\beta} + \frac{h}{2} (\tau_{\alpha\beta,\alpha\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta,\alpha\beta}^-) + (\tau_{\alpha 3,\alpha}^+ + \tau_{\alpha 3,\alpha}^-) + p_3 = 0 \quad (10b)$$

여기서, 식 (10a)와 식 (10b)에서 아래와 같이 $N_{\alpha\beta}^*, M_{\alpha\beta}^*$ 를 정의하면

$$N_{\alpha\beta}^* = N_{\alpha\beta} + \tau_{\alpha\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta}^- \quad (11a)$$

$$M_{\alpha\beta}^* = M_{\alpha\beta} + \frac{h}{2} (\tau_{\alpha\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta}^-) \quad (11b)$$

다음과 같이 간략하게 나타낼 수 있다.

$$N_{\alpha\beta,\beta}^* + p_\alpha = 0 \quad (12a)$$

$$M_{\alpha\beta,\alpha\beta}^* + (\tau_{\alpha 3,\alpha}^+ + \tau_{\alpha 3,\alpha}^-) + p_3 = 0 \quad (12b)$$

2.1 구성 방정식

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

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij} \quad (11)$$

여기서 λ 와 μ 는 Lamé 상수들이고, ε_{ij} 는 다음과 같이 주어지는 변형률이다.

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (12)$$

두께가 매우 얇은 박막구조이기 때문에 고전적인 판 이론에서는 면의 수직방향 응력 성분 σ_{33} 는 면내 응력성분에 비하여 매우 작다고 보아 무시하였다. 그러나 이렇게 되면 평형방정식을 만족할 수 없게 되므로 여기서는 수직방향 응력 성분이 다음과 같이 두께방향으로 선형적으로 변한다고 가정한다.

$$\sigma_{33} = \frac{1}{2} (\sigma_{33}^+ + \sigma_{33}^-) + \frac{1}{h} (\sigma_{33}^+ - \sigma_{33}^-) x_3 \quad (13)$$

그러면 식 (11)의 응력-변형률 관계는 다음과 같이 단순화 된다.

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{E}{1+\nu} \left(\varepsilon_{\alpha\beta} + \frac{\nu}{1-\nu} \varepsilon_{\gamma\gamma} \delta_{\alpha\beta} \right) + \frac{\nu}{1-\nu} \sigma_{33} \delta_{\alpha\beta} \quad (14)$$

여기서 E 는 Young's modulus이고, ν 는 Poisson's ratio이다. Gurtin과 Murdoch에 의한 표면 S^+ 와 S^- 의 구성방정식은 상·하단 표면의 물성치가 같을 경우 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\begin{aligned} \tau_{\alpha\beta}^{\pm} &= \tau_0 \delta_{\alpha\beta} + (\mu_0 - \tau_0)(u_{\alpha\beta}^{\pm} - \tau_{\alpha\beta}^{\pm}) + (\lambda_0 + \tau_0)u_{\gamma\gamma}^{\pm} \delta_{\alpha\beta} + \tau_0 u_{\alpha\beta}^{\pm}, \\ \tau_{\alpha 3}^{\pm} &= \tau_0 u_{3,\alpha}^{\pm} \end{aligned} \quad (15)$$

여기서 τ_0 는 구속되지 않은 상태에서의 박막의 표면 잔류응력이며, μ_0 와 λ_0 는 각각 표면의 Lamé 상수이다. 또한 수직 응력 성분 σ_{33} 는 아래와 같다.

$$\sigma_{33} = \frac{1}{2}(\tau_{\beta 3,\beta}^+ - \tau_{\beta 3,\beta}^-) + \frac{1}{h}(\tau_{\beta 3,\beta}^+ + \tau_{\beta 3,\beta}^-)x_3 \quad (16)$$

3. 유한요소 정식화와 표면상수의 결정

3.1 유한요소 정식화

식 (8)의 변분식은 식 (11ab)의 관계를 적용하면 다음과 같이 정리된다.

$$\begin{aligned} \delta U &= \delta U_{bulk} + \delta U_{surf} \\ &= \int_{\Omega} (N_{\alpha\beta}^*) \delta u_{\alpha,\beta}^o - (M_{\alpha\beta}^*) \delta w_{,\alpha\beta} + (\tau_{\alpha 3}^+ + \tau_{\alpha 3}^-) \delta w_{,\alpha} dA \end{aligned} \quad (17)$$

여기서 식 (15)에서 보는 바와 같이 $\tau_{\alpha 3}^{\pm} = \tau_0 u_{3,\alpha}^{\pm}$ 이므로 식 (17)은 다음과 같은 최종적인 변분식으로 표현된다.

$$\begin{aligned} \delta U &= \delta U_{bulk} + \delta U_{surf} \\ &= \int_{\Omega} (N_{\alpha\beta}^*) \delta u_{\alpha,\beta}^o - (M_{\alpha\beta}^*) \delta w_{,\alpha\beta} + (2\tau_0) \delta w_{,\alpha} dA \end{aligned} \quad (18)$$

표면효과를 포함하는 Kirchhoff평판 이론의 resultant force와 resultant moment를 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$\begin{aligned} N_{\alpha\beta}^* &= 2\tau_0 (\delta_{\alpha\beta} + u_{\alpha,\beta}^o) + P \varepsilon_{\alpha\beta}^o + Q \varepsilon_{\gamma\gamma}^o \delta_{\alpha\beta} \\ M_{\alpha\beta}^* &= -A u_{\alpha,\beta}^o - B u_{3,\gamma\gamma}^o \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (19)$$

여기서,

$$\begin{aligned} P &= \frac{Eh}{1-\nu^2} \left[(1-\nu) \left(1 + 2 \frac{l_2 - l_1}{h} \right) \right], Q = \frac{Eh}{1-\nu^2} \left(1 + \frac{l_3}{h} \right) \\ A &= \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)} (1-\nu) \left(1 - 3 \frac{l_3}{h} \right), B = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)} \nu \left(1 + \frac{3l_3 - l_1}{h} \right) \end{aligned}$$

이고, l_1 , l_2 그리고 l_3 는 각각 표면효과를 나타내는 상수 값들로서 다음과 같이 주어진다.

$$l_1 = \frac{2(1+\nu)\tau_0}{E}, l_2 = \frac{2(1+\nu)\mu_0}{E}, l_3 = \frac{(1-\nu^2)(\tau_0 + \lambda_0)}{E\nu} \quad (20)$$

Stretching부분과 bending부분의 강성행렬은 다음 식

(21)와 (22)처럼 각각 행렬형태로 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} N_{11}^* \\ N_{22}^* \\ N_{<12>}^* \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} 2\tau_0 \\ 2\tau_0 \\ 0 \end{Bmatrix} \\ + \begin{bmatrix} (2\tau_0 + P + Q) & Q & 0 \\ Q & (2\tau_0 + P + Q) & 0 \\ 0 & 0 & (\tau_0 + P/2) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,2} \\ u_{1,2} + u_{2,1} \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{Bmatrix} M_{11}^* \\ M_{22}^* \\ M_{12}^* \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} -(A+B) & -B & 0 \\ -B & -(A+B) & 0 \\ 0 & 0 & -A \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_{3,11} \\ u_{3,22} \\ u_{3,12} \end{Bmatrix} \quad (22)$$

위 식 (21)와 (22)에서 보인 바와 같이 강성행렬의 각 항에 표면효과를 나타내는 상수들이 포함되어 있으며, 이 상수 값들을 무시할 경우 위 식들은 고전적인 평판이론과 일치하게 된다.

3.2 표면상수의 결정

연속체 이론에 기초한 박막구조 해석결과의 정확도는 표면 상수 값들이 얼마나 신뢰성 있는 값들인지에 따라 크게 영향을 받는다. 일반적으로 이러한 상수 값들은 실험이나 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 얻어지며 정확하게 계산된 표면상수 값들을 사용할 경우 연속체 기반의 모델이 분자동역학 시뮬레이션의 결과와 잘 일치하게 됨을 확인할 수 있다.

본 연구에서는 표면상수들을 결정하기 위해 구속조건을 가하지 않은 상태, 인장 테스트, 전단 테스트에 대한 분자동역학(molecular dynamics)시뮬레이션을 통하여 각각의 경우에 대하여 변형률을 구하고 아래 식을 이용하여 표면상수 (τ_0, λ_0, μ_0) 값들을 결정한다.

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} N_{11}^* \\ N_{22}^* \\ N_{<12>}^* \end{Bmatrix} &= \frac{Eh}{1-\nu^2} \begin{Bmatrix} (u_{1,1} + \nu u_{2,2}) \\ (\nu u_{1,1} + u_{2,2}) \\ \frac{1}{2}(1-\nu)(u_{1,1} + u_{2,2}) \end{Bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2(1+u_{2,2}) & 4u_{1,1} & 2(u_{1,1} + u_{2,2}) \\ 2(1+u_{1,1}) & 4u_{2,2} & 2(u_{1,1} + u_{2,2}) \\ -(u_{1,2} + u_{2,1}) & 2(u_{1,2} + u_{2,1}) & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tau_0 \\ \mu_0 \\ \lambda_0 \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (23)$$

여기서 $N_{\alpha\beta}^*$ 는 resultant forces 그리고 $u_{\alpha,\beta}$ 는 변형률을

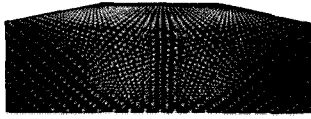


Fig. 2 Model for copper thin film

나타낸다.

본 연구에서는 구리 박막구조에 대하여 *Nosé-Poincaré* $N\sigma T$ 앙상블과 Lennard-Jones 포텐셜을 사용하여 Fig.2와 같이 구리박막을 모델링하고 이에 대한 분자동역학 시뮬레이션을 수행하였다. 분자 동역학 시뮬레이션에 사용한 *Nosé-Poincaré* $N\sigma T$ 앙상블 알고리즘은 Choi와 Cho에 의해 수행되었다(Choi *et al.*, 2006).

4. 수치예제

4.1 표면효과를 고려한 Kirchhoff plate 이론검증

먼저 표면효과를 고려하도록 변경된 Kirchhoff 평판이론에 기반한 연속체 모델의 이론식을 검증하기 위하여 이를 기반으로 유한요소정식화를 거쳐 얇은 iron surface에 대한 유한요소해석을 수행하였다. iron surface에 대한 표면상수 값들은 Table 1과 같다(Gurtin *et al.*, 1978).

가로, 세로, $1 \times 10^{-7} m$ 두께 1나노미터의 초기 유한요소 모델에서 두께를 증가시켜 가면서 Fig.3과 같이 인장 테스트를 수행한 결과 두께가 두꺼워 짐에 따라 박막의 탄성계수가 bulk의 값으로 수렴됨을 확인할 수 있었다. Fig.4의 그래프

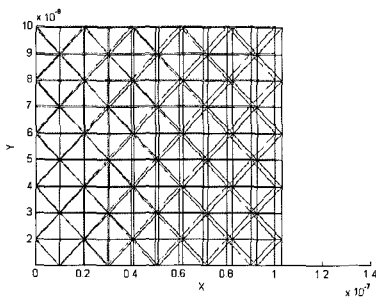


Fig. 3 Tensile test

Table 1 Young's modulus, Possion's ratio and surface parameter values of iron surface

moduli	Iron free surface
E	$17.73 \times 10^{10} N/m^2$
ν	0.25
τ_0	$1.7 N/m$
μ_0	$2.5 N/m$
λ_0	$-8 N/m$

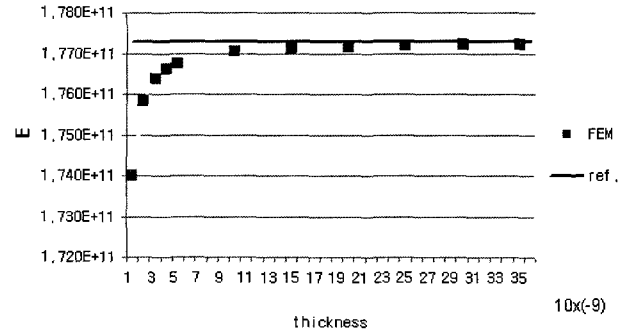


Fig. 4 Convergence of Young's modulus

에서 보는 바와 같이 박막구조의 두께가 매우 얇을 경우에는 Young's modulus의 값이 bulk값에 비하여 매우 작게 나타남을 알 수 있고, 박막의 두께가 약 20나노미터 이상에서는 Young's modulus의 값이 거의 bulk값에 수렴함을 확인할 수 있다.

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 12층(layer), 두께방향으로 6층으로 원자를 배열하였다. 계산된 표면상수 값은 Table 2와 같다.

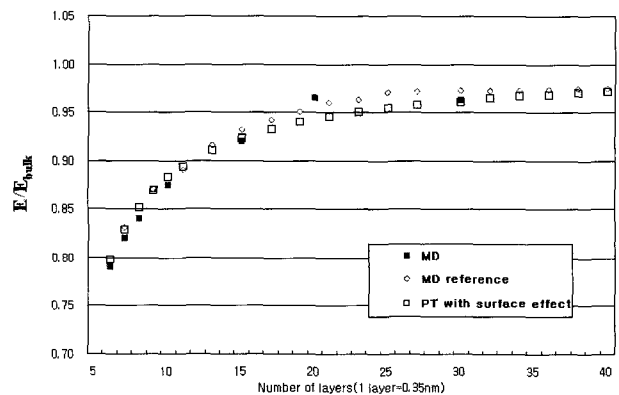


Fig. 5 Convergence of Young's modulus

Table 2 Young's modulus, Possion's ratio and surface parameter values of copper

moduli	copper
E	$120.7 \times 10^9 N/m^2$
ν	0.34
τ_0	$0.0345 N/m$
μ_0	$-14.056 N/m$
λ_0	$6.589 N/m$

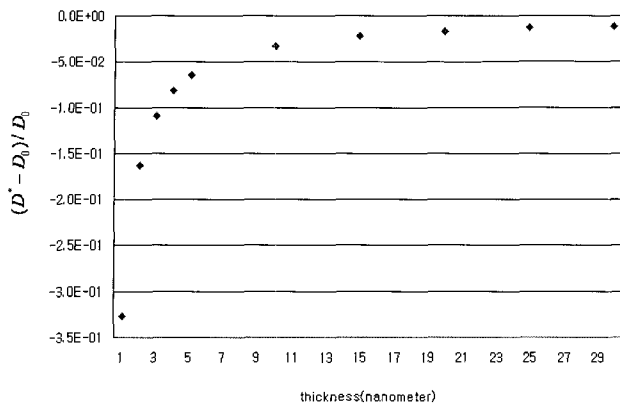


Fig. 6 Bending rigidity

Fig.5에서 보는 바와 같이 박막의 두께가 얇을 경우 Young's modulus의 값이 bulk값에 비해 작은값을 보이며 두께가 두꺼워질수록 표면효과와 영향이 작아지면서 bulk의 Young's modulus값으로 수렴하는 것을 확인할 수 있다. 또한 분자동역학 시뮬레이션을 통해 얻은 결과와 비교했을 때 본 연구에서 제시한 유한요소모델을 통해 얻은 결과와 잘 일치함을 확인할 수 있다.

Fig.6은 굽힘강성(Bending rigidity)을 계산한 결과이다. 두께가 얇아 질수록 굽힘강성이 작아짐을 확인할 수 있다. 여기서 D^* 는 표면효과를 고려할 경우의 굽힘강성이고 D_0 는 고전적인 평판이론에서의 굽힘강성을 나타낸다.

5. 결 론

표면효과(surface effects)를 고려한 박막(thin film)해석을 위하여 고전적인 Kirchhoff plate이론을 표면효과를 고려할 수 있도록 수정함으로써 나노 스케일의 구조물을 해석할 수 있는 연속체 모델을 제시하였다.

철(iron)박막과 구리(copper)박막에 대한 시뮬레이션을 통해 박막의 두께가 얇아짐에 따라 표면효과와 영향으로 bulk의 물성과는 다른 물성을 나타냄을 확인할 수 있었다. 박막구조의 정확한 해석을 위해서는 신뢰성 있는 표면상수

값들과 물성치 확보가 중요하므로 정확한 측정기법이나 효율적인 분자동역학 시뮬레이션 기법에 대한 연구가 필요하다.

감사의 글

본 연구는 한국과학재단이 주관하는 서울대학교 마이크로 열 시스템 연구센터의 지원을 받아 수행되었습니다.

참 고 문 헌

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.

Choi K.S., Cho, M.H. (2006) Fully Flexible Solid Unit Cell Simulation with Recursive Thermostat Chains, *Journal of Chemical Physics*, 125, 184105.

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. p.69.

Gurtin, M.E., Murdoch, A.I. (1978) Surface stress in solids, *Int.J.Solids Struct.*, 14, pp.431~440.

Lim, C.W., He, L.H. (2004) Size-dependent nonlinear response of thin elastic films with nano-scale thickness, *Int. J. Mech. Sci.*, 46, pp.1715~1726.

Lu, P., He, L.H., Lee, H.P., Lu, C. (2006) Thin plate theory including surface effects, *International Journal of Solids and Structures*, 43, pp.4631~4647.

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, pp.535~537.