

박막구조해석을 위한 표면효과를 고려하는 연속체 모델

최진복[†] · 정광섭* · 조맹효**

Continuum Model considering Surface Effect for Thin film

Jinbok Choi, Kwangsub Jung and Maenghyo Cho

Key Words : surface effect(표면효과), thin film(박막), multi-scale analysis(멀티스케일해석), continuum(연속체), finite element method(유한요소법)

Abstract

The classical continuum theory-based thin film model is independent of their size and the surface effect can be ignored. But the surface to bulk ratio becomes very large in nano-size structures such as nano film, nano wire and nano beam. In this case, surface effect plays an important role and its contribution of the surface effect must be considered. Molecular dynamics simulation has been a conventional way to analyze these ultra-thin structures but structures in the range between submicro and micro are difficult to analyze by classical molecular dynamics due to the restriction of computing resources and time. Therefore, in present study, the continuum-based method is considered to predict the overall physical and mechanical properties of the structures in nano-scale, especially, for the thin-film. The proposed continuum based-thin plate finite element is efficient and reliable for the prediction of nano-scale film behavior.

1. 서 론

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⁽¹⁾ 또는 분자동역학 시뮬레이션⁽²⁾ 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 표

면 효과가 중요하게 작용하게 된다⁽³⁾. 따라서 이러한 박막구조를 정확하게 해석하기 위해서는 표면 효과의 고려가 반드시 필요하다. 최근 분자동역학 분야의 발달로 인해 나노스케일에서의 시뮬레이션이 가능하게 되었고 이에 대한 연구들이 활발하게 진행되고 있다. 그러나 전산자원의 한계와 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⁽⁴⁾⁽⁵⁾. 따라서 본 연구에서는 고전적인 평판 이론을 표면효과를 고려할 수 있도록 수정하여 나노스케일의 박막구

[†] 서울대학교 기계항공공학부 대학원
E-mail : jbchoi95@snu.ac.kr
TEL : (02)877-1645 FAX : (02)866-1693

* 서울대학교 기계항공공학부

** 서울대학교 기계항공공학부 교수

조 해석에 적용할 수 있는 연속체 모델을 제시하고 표면효과를 고려하는 인자는 분자동역학으로부터 도출하며 연속체 모델을 유한요소법으로 해석하는 계층적 멀티스케일 방법을 제안한다..

2. 표면효과를 고려한 Kirchhoff 평판이론 기반의 평형방정식유도

2.1 표면효과를 고려한 Kirchhoff 평판이론

두께가 매우 얇은 박막구조의 경우 Fig.1 에서 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 나노스케일의 박막 구조의 경우 표면의 영향력을 무시할 수 없기 때문에 고전적인 평판 이론을 수정하여 표면효과를 고려할 수 있도록 해야 한다.

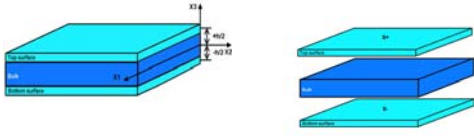


Fig. 1 Thin film structure

여기서 bulk 의 변위장과 표면(surface)의 변위장은 다음과 같다.

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

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

박막의 s^+ 와 s^- 표면상의 표면응력은 $\tau_{i\alpha}^+$ 와 $\tau_{i\alpha}^-$ 로 나타낼 수 있고 다음과 같은 평형방정식을 만족한다. (6)(7)

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

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

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

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

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

박막의 평형방정식을 유도하기 위하여 가상일의 원리를 사용한다.

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

여기서 U 는 내부변형에너지, W 는 외부에서

한일에너지를 나타낸다. 내부에너지는 표면과 bulk 의 에너지를 각각 다음과 같이 나타낼 수 있다.

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

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

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

Kirchhoff 평판이론에서 변위장은 다음과 같이 가정된다.

$$u_\alpha = u_\alpha^0(x_1, x_2) - \frac{\partial w}{\partial x_\alpha} z \quad (6.a)$$

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

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

$$\delta U_{bulk} = \oint_{\Gamma} N_{\alpha\beta} v_\beta \delta u_\alpha^0 - M_{\alpha\beta} v_\beta \delta w_{,\alpha} + M_{\alpha\beta,\beta} v_\alpha \delta w ds + \int_{\Omega} -N_{\alpha\beta,\beta} \delta u_\alpha^0 - M_{\alpha\beta,\alpha\beta} \delta w dA \quad (7.a)$$

$$\delta U_{surf} = \int_{\Omega} (\tau_{\alpha\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta}^-) \delta u_{\alpha,\beta}^0 + \frac{h}{2} (-\tau_{\alpha\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta}^-) \delta w_{,\alpha\beta} + (\tau_{\alpha 3}^+ + \tau_{\alpha 3}^-) \delta w_{,\alpha} dA \quad (7.b)$$

따라서, 최종적인 변분식은 다음과 같이 얻어질 수 있다.

$$\delta U = \delta U_{bulk} + \delta U_{surf} = \int_{\Omega} (N_{\alpha\beta} + \tau_{\alpha\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta}^-) \delta u_{\alpha,\beta}^0 - \{M_{\alpha\beta} + \frac{h}{2} (\tau_{\alpha\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta}^-)\} \delta w_{,\alpha\beta} + (\tau_{\alpha 3}^+ + \tau_{\alpha 3}^-) \delta w_{,\alpha} dA \quad (8)$$

내부변형에너지와 외부일에 의한 에너지를 고려하여 정리하여 다음과 같이 변분을 취함으로써 평형방정식을 얻을 수 있다.

$$\delta \Pi = \int_{\Omega} - (N_{\alpha\beta,\beta} + \tau_{\alpha\beta,\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta,\beta}^-) \delta u_\alpha^0 - \{M_{\alpha\beta,\alpha\beta} + \frac{h}{2} (\tau_{\alpha\beta,\alpha\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta,\alpha\beta}^-)\} \delta w - (\tau_{\alpha 3,\alpha}^+ + \tau_{\alpha 3,\alpha}^-) \delta w - p_\alpha \delta u_\alpha^0 - p_3 \delta w dA + B.T.$$

$$\delta U^{B.T.} = \delta U_{bulk}^{B.T.} + \delta U_{surf}^{B.T.} = \oint_{\Gamma} (N_{\alpha\beta} v_\beta + \tau_{\alpha\beta}^+ + \tau_{\alpha\beta}^-) v_\beta \delta u_\alpha^0 - \left\{ M_{\alpha\beta} + \frac{h}{2} (\tau_{\alpha\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta}^-) \right\} v_\alpha v_\beta \delta \left(\frac{\partial w}{\partial v} \right) + \left\{ \left(\frac{\partial M_{\alpha\beta}}{\partial s} + \frac{h}{2} \frac{\partial (\tau_{\alpha\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta}^-)}{\partial s} \right) t_\beta + M_{\alpha\beta,\beta} + \frac{h}{2} (\tau_{\alpha\beta,\beta}^+ - \tau_{\alpha\beta,\beta}^-) + (\tau_{\alpha 3}^+ + \tau_{\alpha 3}^-) \right\} v_\alpha \delta w ds \quad (9)$$

식(9)로부터 유도되는 평형 방정식은 다음과 같다.

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

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

여기서,

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

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

로 다시 정의할 수 있다. 그러면 식(10)은 다음과 같이 간단히 쓸 수 있다.

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

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

2.2 구성방정식

박막의 bulk 와 surface 가 균질(homogeneous)하고 등방성(isotropic)이라면 bulk 의 구성방정식은 다음과 같다.

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij} \quad (13)$$

여기서 λ 와 μ 는 Lamé 상수들이고 는 다음과 같이 주어지는 변형률이다.

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (14)$$

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 응력성분과 다음과 같이 두께방향으로 선형적으로 변한다고 가정한다.

$$\sigma_{33} = \frac{1}{2}(\sigma_{33}^+ + \sigma_{33}^-) + \frac{1}{h}(\sigma_{33}^+ - \sigma_{33}^-)x_3 \quad (15)$$

그러면 식(11)의 응력-변형률 관계는 다음과 같이 단순화 된다.

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{E}{1+\nu} \left(\varepsilon_{\alpha\beta} + \frac{\nu}{1-\nu} \varepsilon_{\gamma\gamma} \delta_{\alpha\beta} \right) + \frac{\nu}{1-\nu} \sigma_{33} \delta_{\alpha\beta} \quad (16)$$

여기서 E 는 Young's modulus 이고 ν 는 Poisson's ratio 이다. Gurtin 과 Murdoch 에 의한 표면 S^+ 와 S^- 의 구성방정식은 상, 하단 표면의 물성치가 같을 경우 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\begin{aligned} \tau_{\alpha\beta}^\pm &= \tau_0 \delta_{\alpha\beta} + (\mu_0 - \tau_0)(u_{\alpha,\beta}^\pm + \tau_{\beta,\alpha}^\pm) + (\lambda_0 + \tau_0)u_{\gamma,\gamma}^\pm \delta_{\alpha\beta} + \tau_0 u_{\alpha,\beta}^\pm, \\ \tau_{\alpha 3}^\pm &= \tau_0 u_{3,\alpha}^\pm \end{aligned} \quad (17)$$

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.

$$\sigma_{33} = \frac{1}{2}(\tau_{\beta 3,\beta}^+ - \tau_{\beta 3,\beta}^-) + \frac{1}{h}(\tau_{\beta 3,\beta}^+ + \tau_{\beta 3,\beta}^-)x_3 \quad (18)$$

3. 유한요소 정식화와 표면상수의 결정

3.1 유한요소정식화

식(10.a)와 (10.b)로부터 표면효과를 포함하는 Kirchhoff plate 이론의 resultant force 와 resultant

moment 를 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$N_{\alpha\beta}^* = 2\tau_0(\delta_{\alpha\beta} + u_{\alpha\beta}^0) + P\varepsilon_{\alpha\beta}^0 + Q\varepsilon_{\gamma\gamma}^0 \delta_{\alpha\beta} \quad (19)$$

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

여기서,

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

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

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

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

Stretching 파트와 bending 파트의 강성행렬은 다음식(19)와 (20)처럼 각각 행렬형태로 나타낼 수 있다.

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

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

여기서 $N_{<12>}^*$ 는 N_{12} 의 대칭 부분이다. 위 식(21)과 (22)에서 보는 바와 같이 강성행렬의 각 항에 표면효과를 나타내는 상수들이 포함되어 있으며, 이 상수값들을 무시할 경우 위 식들은 고전적인 평판이론과 일치하게 된다.

3.2 표면상수의 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 확인할 수 있다.⁽³⁾

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 (τ_0, λ_0, μ_0) 값들을 결정한다.

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

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

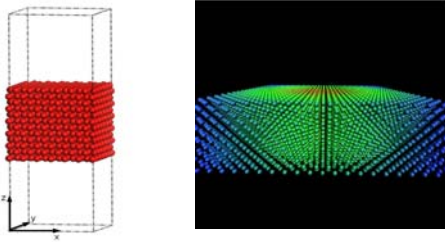


Fig. 2 Model for copper thin film

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

4. 수치 예제

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

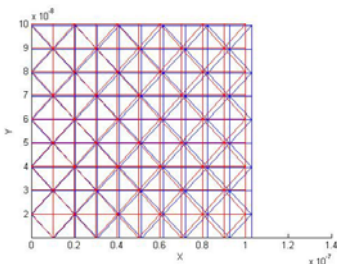


Fig. 3 Tensile test

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	$-8 N/m$

Table 1. Young's modulus, Poisson's ratio and surface parameter values of steel

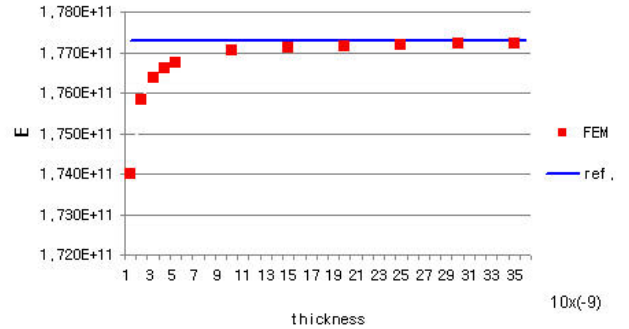


Fig. 4 Convergence of Young's modulus

4.2 구리(Cu) 박막구조의 해석

구리 박막구조에 대하여 3.2 절에서 설명한 바와 같이 분자동역학 시뮬레이션을 통해 표면상수값들을 계산 하여 기존의 분자동역학 시뮬레이션 결과와 비교하여 보았다. 분자동역학 시뮬레이션을 위한 구리박막 모델은 면내 방향으로 12 층(layer), 두께방향으로 6 층으로 원자를 배열하였다. 계산된 표면상수 값은 Table 2 와 같다. Fig.5 에서 보는 바와 같이 분자동역학 시뮬레이션을 통해 얻은 결과와 본 연구에서 제시한 유한요소모델을 통해 얻은 결과가 잘 일치 함을 확인 할 수 있다.

moduli	Copper free surface
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	$6.589 N/m$

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

후 기

본 연구는 국방과학연구소와 서울대 비행체특화센터의 지원을 통해 수행되었습니다.

참고문헌

- (1) 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.
- (2) 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.
- (3) Miller, R.E., Shenoy, V.B. (2000) Size dependent elastic properties of nanosized structural elements. *Nanotechnology* 11, pp.139-147.
- (4) Sharma, P., Ganti, S., Bhate, N. (2003) Effects of surfaces on the size-dependent elastic state of nanoinhomogeneities. *Appl. Phys. Lett.* 82, 535-537.
- (5) 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.
- (6) 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.
- (7) Gurtin, M.E., Murdoch, A.I. (1978) Surface stress in solids. *Int. J. Solids Struct.* 14, pp.431-440.

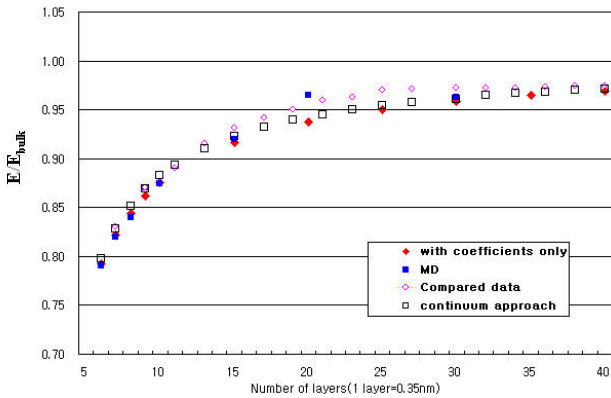


Fig. 5 Convergence of Young's modulus

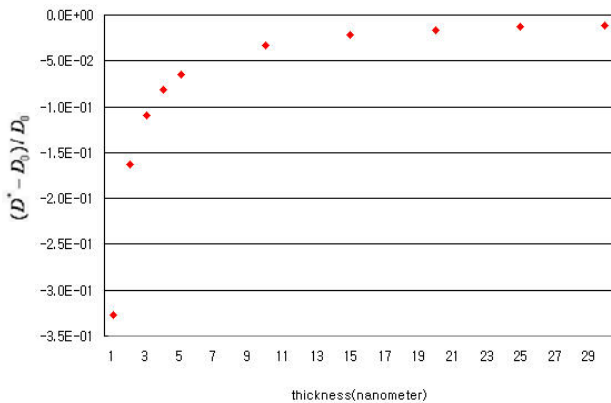


Fig. 6 Bending rigidity

Fig. 6 은 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 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 표면효과의 영향으로 bulk의 물성과는 다른 성질을 나타냄을 확인할 수 있었다. 박막구조의 정확한 해석을 위해서는 신뢰성 있는 표면상수 값들과 물성치 확보가 중요하므로 정확한 측정기법이나 효율적인 분자동역학 시뮬레이션 기법에 대한 연구가 필요하다.