

Development of a Multi-Scale Nano-Materials Simulation Platform using Python

김후성, 박정훈, 김한슬, 박민규, 김용훈¹

¹서울시립대학교 신소재공학과

최근 과학 전 분야에서 나노 스케일에서의 연구가 활발하게 진행되고 있다. 이에 따라 컴퓨터를 이용하여 실험에서 발견되는 현상을 해석하거나 일어날 일을 예측하는 일이 중요해지고 있다. 이러한 전산모사를 수행하기 위하여, 원자구조의 모델링이 선행되어야 한다. 현재 본 그룹에서는 Python 언어를 기반으로 모델링을 위한 패키지를 개발하고 있다. 이 패키지에는 최근 나노 과학에서 빈번히 사용되는 Graphene이나 Carbon Nano Tube, 실리콘 표면 등을 생성하는 기능과 만든 모델을 편집하여 연구자가 원하는 모델을 편집하는 기능이 포함되어 있다. 향후 Python을 모르는 사람들도 쓸 수 있는 GUI (graphic User Interface) 를 구현할 예정이다.