

나노역학 및 나노소재에 관한 테마기획을 내면서

· 임세영 | 한국과학기술원 기계공학과, 교수
e-mail : sim@mail.kaist.ac.kr

1959년 Cal.Tech.의 리처드 파인만(Richard Feynman)은 원자나 분자를 우리가 원하는 대로 배열하고 조작하는 기술이 가능하다는 것을 예견하였다[1]. 이 때에만 해도 이러한 기술의 실현 가능성에 대해 확신이 결여된 탓인지 파인만의 이런 주장은 별로 주목을 받지 못했다. 그러나 1980년대 들어와서 STM(Scanning Tunneling Microscope)에 이은 AFM(Atomic Force Microscope)의 출현으로 원자의 관찰뿐 아니라 조작까지도 가능하게 되었으며, 나노기술에서 있어서의 Bottom-up 접근이 구체화될 수 있는 전기가 마련되었다. 이후 1990년대에 들어와서 나노기술은 집중적인 조명을 받고 발전의 모멘텀이 형성되었다. 이는 기존의 MEMS 기술과 반도체 공정 기술에서 추구하는 Top-down 접근방식의 초소형화 추세, 그리고 생명공학 특히 생체의 나노스케일 분자메커니즘에 대한 지식의 축적 등에 힘입은 바 크다고 할

수 있다. 실제로 선진국은 물론 이미 우리나라에서도 나노기술의 진흥을 위해 각종 프런티어 사업과 나노핵심기반기술 개발사업이 시행되고 있다.

전통적인 기계공학의 핵심은 시스템의 힘과 운동(변형) 및 에너지의 밸런스와 제어 그리고 이를 통한 시스템의 운용 및 제작과 생산을 다루는 것이라 할 수 있다. 그러나 이런 기계공학 관점에서 작은 나노스케일의 시스템을 다뤄야 할 때 새로운 공학적 문제에 직면할 수밖에 없고, 결국 이런 공학적 문제를 중심으로 새로운 영역이 창출된다. 즉, 나노스케일의 시스템, 소자 및 공정 관련 제반 물리적 현상을 해석하고 규명하여 나노 시스템을 설계하고 제작하는 분야가 기계공학 전공자들에게 새로운 도전으로 떠오르고 있다. 이는 기존의 연속체(고체 및 유체)가 나노스케일로 작아질 때 물리적·기계적 거동이 연속체와 어떻게 달라지고 따라서 어떻게 시스템을 모델링해

야 하는지의 문제뿐만이 아니다. Bottom-up 방식의 나노소재(이를 테면 탄소나노튜브)에서 어떻게 기계적·역학적 거동을 규명하여 이런 소재를 응용한 설계와 제작에 활용하느냐 하는 문제 또한 중요할 것이다. 특히, 나노스케일 소재나 나노스케일 구조의 거동 파악에 있어서는 스케일 축소에 따른 새로운 물리현상이 나타나고 나아가서 물리적·전기적·화학적 거동이 역학적 거동과 커플(couple)되어 나타날 수 있기에 나노소재나 구조의 거동 규명은 그만큼 복잡할 수밖에 없다.

나노역학이라 함은 나노시스템이나 나노소재에서 시스템의 역학적 반응을 해석/측정하고 규명하는 분야로서 볼 수 있다. 기존의 전통적인 기계시스템이나 소재에서 힘, 에너지, 운동의 평형에 관한 역학적 반응을 규명하는 일이 이런 시스템의 설계 및 제조, 그리고 제어 및 운용을 위해 서 필히 구축해야 할 기반기술인

것처럼, 나노역학도 나노스케일 시스템이나 소재 및 공정의 설계, 제조 및 응용을 위해서 필히 갖추어야 할 기반기술이라고 할 수 있겠다.

앞에서와 같이 나노역학에 관한 포괄적인 정의로 볼 때 나노역학은 그 범위가 크게 확장될 수밖에 없다. 우선 길이스케일이 크게는 연속체스케일(continuum scale)에서부터 각 원자나 분자들의 거동을 통계역학과 뉴턴의 운동법칙에 따라 고려하는 원자적 스케일(atomistic scale) 그리고 슈뢰딩거 방정식을 고려하는 양자역학 스케일(quantum mechanics scale)의 세 스케일이 존재하게 된다. 이때 각 길이스케일에는 고유한 시간스케일이 존재하며(나노소재의 전산모사-장현주, 엄윤용 그림 1 참조), 고유한 시간스케일 이상으로 그 개념을 확장한 경우는 물리적인 고찰과 통계역학적인 고려가 필수적이다. 이와 같이 길이스케일이 나노스케일로 접근할 경우, 기존의 연속체에서 나타나지 않는 새로운 물리적 현상이 나타난다. 특히, 역학적 거동이, 다른 물리적 거동이나 화학적 거동과 커플링되어 나타나는 경우가 많다. 가장 극적인 예로서 탄소나노튜브의 경우 고온에서 하중을 받을 경우 탄소 원자의 결합 구조가 sp²에서 sp³로 바뀌면서 상온에서와 다른 좌굴모드가 나타나는 현상을 들 수 있다(탄소나노튜브의 역학적 거동에 관한 전산모사-전석기 참조). 또한, 반도체 나노튜브는 변형과 전자밴드구조 커플

링이 있어 변형에 따라 밴드갭(band gap)이 달라지는 거동을 보인다[2]. 나아가서 양자점(quantum dot)에서 변형과 전자 밴드구조의 커플링 및 변형이 포논(phonon) 스펙트럼 및 모드에 영향을 미치는 경우도[3] 역학적 거동이 물리적·전기적 거동과 커플되는 전형적인 예라하겠다. 이와 같이 나노스케일에서 커플링되어 나타나는 여러 물리적 거동을 규명할 수 있어야만 원하는 기능을 발휘할 수 있는 나노시스템이나 나노디바이스 혹은 나노공정을 설계하고 만들 수 있을 것이다.

반도체 회로나 MEMS 구조물의 Top-down 방식 초소형화에 따라 이들 시스템의 역학적 반응과 파손(failure) 및 신뢰성을 고려할 때 연속체적인 접근이 더 이상 통하지 않을 수 있다. 즉 나노시스템이나 나노구조의 크기가 연속체의 평균 결함간 거리와 같은 order로 축소되면, 연속체역학은 더 이상 적용이 불가하다. 예로서 개개의 결정입계(grain boundary)나 전위(dislocation)는 따로 따로(discretely) 모델해서 그 거동을 해석해야 한다. 또는 초소형 반도체에서 단 하나의 나노스케일 결함이 시스템 전체의 오작동(malfunction)이나 파손(failure)을 가져올 수도 있다. 따라서 결함 하나하나를 discrete하게 모델할 수 있는 분자동역학(molecular dynamics)이나 격자역학(lattice statics)과 같은 원자적 접근 방법(atomistic approach)을 사용해야 한다. 물론, 연속체

적 접근이 근사적으로라도 허용되는 상황에서는 기존의 연속체 개념은 나노스케일까지도 확장된다. 예로서 나노 인덴터에 의한 박막의 물성 평가가 그 예이다. 그러나 이때 물리적 현상의 시편 크기 종속성에 대한 고찰이 요긴하다.

전술한 바와 같이 나노기술의 발달에 따라 설계하고 제작하는 대상물이 나노스케일로 축소되어 감에 따라 드넓은 장르가 분명히 새롭게 열리고 있다. 이 새 장르에 기계공학자들이 보다 큰 관심을 갖도록 나노역학 일반을 소개하는 뜻에서 본 테마기획을 마련하였다. 따라서 나노역학이라는 광범위한 주제를 기술적으로 심도 있게 다루기보다는, 중요한 몇 가지 소주제에 대해 다음과 같이 간략히 설명하는 글을 실게 되었다.

- 양자 이중구조의 역학적 해석
전석기, 임세영(KAIST)
 - 나노소재의 전산모사
장현주(한국화학연구원), 엄윤용(KAIST)
 - 고분자/클레이 나노복합재료
서길수(영남대학교)
 - 나노 인덴테이션 시험의 원리 및 응용
한준희(한국표준과학연구원)
 - 원자 현미경에 의한 나노측정
박상일(PSIA)
 - 탄소나노튜브의 응용
김근수, 이영희(성균관대학교)
 - 탄소나노튜브의 역학적 거동에 관한 전산모사
전석기(KAIST)
- 여기서 중요한 나노소재인 나

노복합재료와 탄소나노튜브를 포함시켜, 이의 응용을 소개하도록 한바 이와 같은 소재의 이해가 나노역학 기반을 구성한다는 점에서 중요하고, 또한 보다 폭넓은 관점에서 이런 소재들을 살펴보는 것이 바람직하다는 뜻에서 이 소개를 테마기획에 포함시켰다. 이에 따라 편집위원회 이해를 구해서 원래 “나노역학”으로 주어진 테마기획 주제를 “나노역학과 나노소재”로 바꾸게 되었다. 광범위한 주제 중 여기 실린 내용 못지 않게 중요하지만 제한된 지면 관계상 다루지 못한 중요한 주

제들이 있다. 예로서 “나노 바이오 관련 나노역학”과 “나노스케일 해석기법(양자역학적 해석기법과 분자동역학 해석 기법 및 몬테카를로 해석기법 등)” 기타 “나노스케일 유체유동 및 열전달” 등을 들 수 있다. 앞으로 기계저널 테마기획에서 이런 주제들을 다룰 수 있다면 나노역학 및 나노기술에 관심 있는 독자들에게 크게 도움이 될 것이다. 끝으로 바쁜 시간을 쪼개서 기고에 협조해 주신 분들께 감사의 드린다.

[참고문헌]

[1] Feynman, R.P., 1960, A talk by Feynman at an annual meeting of the APS on Dec. 29, 1959. published in Caltech's Engineering and Science, Feb.
 [2] Peng, S. and K. Cho, 2002, ASME J. Appl. Mech. Vol. 69, pp.451~453.
 [3] Sood, A. K., J. Menendez, M. Cardona, and K. Ploog, Phys. Rev. Lett Vol. 54, p. 2115.

기계용어 해설

▶ 리니어모터(Linear Motor)

리니어모터는 일반회전형 모터를 축 방향으로 잘라서 펼쳐 놓은 형태이므로, 기존의 일반 모터가 회전형의 운동력을 발생시키는 것에 비해 직선방향으로 미는 힘인 추력을 발생시키는 점이 다르나 그 구동원리는 근본적으로 같다고 볼 수 있다. 일반 회전형 모터에 비해 직선구동력을 직접 발생시키는 장점이 있으므로 고속, 고가감속 실현이 가능하고 기계적인 변환장치가 필요없이 마찰에 의한 에너지 손실과 소음발생이 적어 회전형 모터에 비해 직선구동력이 필요한 시스템에 유리한 것이 특징이다.

▶ 압입하중-변위곡선(Indentation Load-depth Curve)

압입자에 인가되는 하중과 침투깊이를 측정하여 형성된 압입하중-변위곡선은 하중 인가부분과 제거부분으로 구성된다. 하중 인가부는 박막의 탄소성 변형정보를 갖고, 하중 제거부는 박막의 탄성적인 회복정보를 가진다. 탄성 회복곡선의 분석을 통해 최대하중에서의 접촉면적과 탄성회복 기술기

가 결정된다. 이로부터 최대하중을 접촉면적으로 나누어 나노정도를 평가하고, 탄성회복 기술기와 접촉면적으로부터 탄성계수를 평가한다.

▶ 크리프(Creep)

일정하중 또는 일정응력하에서 시간의 경과와 더불어 변형(strain)이 증가하는 현상을 크리프라고 한다. 일정온도, 일정응력하의 크리프를 정적크리프(pure creep)라 하고, 일정온도, 변동응력하의 크리프를 동적크리프(cyclic creep)라고 한다. 이 거동에 의한 파단을 크리프 파단(creep rupture)이라고 한다. 시간에 따른 크리프 변형을 크리프율(creep rate)이라고 하고, 이는 온도에 크게 의존한다. 금속에서는 용점의 1/2 이상의 온도에서 실용적으로 큰 문제가 되고, 저온에서는 변형률에 상응해서 큰 문제가 되는 양이다. 저온에서는 변형률에 상응해서 가공경화가 일어나지만 고온에서는 가공경화에 수반해서 반복연화가 진행되므로 크리프가 현저하게 일어난다. 따라서 회복연화가 되기 쉬운 재료는 저온에서는 강력하다고 하더라도 고온에서도 강한지는 알 수 없다.