

나노 구조물 설계를 위한 다중 스케일 해석 기술

김재현, 김정엽, 최병익 | 한국기계연구원

1. 서론

최근 나노 기술은 세계적인 관심의 대상이 되고 있으며, 공정, 소자, 재료 기술 등 다양한 분야에서 많은 연구 활동이 이루어지고 있다. 나노 기술은 기존의 거대 구조물과는 다른 거동을 보이는 나노 구조물을 이용한다는 점에서 여러 가지 새로운 가능성을 보여준다. 상용화된 어떤 소재보다도 큰 강도와 탄성계수를 가지는 신소재, 상용화된 어떤 트랜지스터보다도 크기가 작은 일전자 트랜지스터(single electron transistor), DNA 컴퓨터 및 양자 컴퓨터, 분자 전자 공학 소자, NEMS (Nano Electro Mechanical System) 등은 나노 기술이 활발하게 연구되면서 그 실현 가능성이 점점 높아지고 있다. 나노 기술의 발전은 지금까지 이용하기 어려웠던 나노 스케일의 자연 현상에 대한 관심을 촉진시키고 있으며, 이를 토대로 한 응용 연구가 진행되고 있다. 예를 들어, 리소그라피와 같이 톱다운(top-down) 방식으로 원하는 구조물을 제조하는 것과는 달리 분자들이 스스로 일정한 패턴을 형성하게 하는 바텀업(bottom-up) 방식의 구조물 제조 방법들이 IBM 등을 중심으로 활발하게 연구되고 있다.

나노 구조물의 해석기술은 나노 구조물을 형성하고, 조작하고, 응용하는 전반적인 나노 기술의 발전에 필수적인 것이다. 기존의 공학 설계 분야에서 광범위하게 이용되어 온 연속체 기반 해석 및 설계 기술의 예와 같이, 나노 구조물을 이용한 새로운 공학적 응용에 있어서도 적절한 해석 및 설계 기술이 필요하다는 점은 쉽게 생각할 수 있다. 최근의 많은 연구 보고에서 나노 구조물 해석 기술의 중요성이 강조되고 있으며, 좀 더 구체적으로는 다음과 같은 구체적인 분야에 적용될 것으로 예측되고 있다.^[1-4] 나노 구조물의 Transport 현상 해석 기술을 이용한 nanoelectronics에의 적용, 나노 구조물의 광학 특성 해석을 통한 optoelectronic 소자에의 적용, cohesion/decohesion tunneling을 이용한 양자 계산에의 적용, Soft/Hard 재료의 계면 해석을 통한 바이오센서에의 적용 등이 그 몇가지 예이다.

나노 구조물은 기존의 해석 기술을 그대로 적용하기 어려운 중요한 난제를 포함하고 있다. 기존의 공학적 설계 및 해석에서 많이 사용되어온 연속체 기반 계산 기술(예를 들어, 유한 요소법, 유한 차분법, 경계요소법 등)은 나노 구조물에는 더 이상 적용될 수 없다는 증거들이 밝혀지고 있으며, 반대로 원자 길이 스케일에서 적용되는 제1원리 계산(first principle calculation)은 나노 구조물에 적용하기에는 계산량이 너무 많다. 분자동역학 계산에서도 제1원리 계산처럼 심하지는 않지만, 계산량이 많은 문제가 나노 구조물의 해석에 큰 장애물이 되고 있다. 아직까지도

나노 구조물의 해석에 일반적으로 적용될 수 있는 해석 기술은 존재하지 않는다. 연구자들 사이에서는 나노 구조물을 다루기 위해서는, 기존의 여러 가지 해석 기술들이 대상으로 하는 서로 다른 길이 및 시간 스케일을 연결할 수 있는 다중 스케일 해석 기술이 필요하다는 점에서 공감대가 형성되고 있다. 현재까지 논의되고 있는 다중 스케일 해석 기술들은 기존 해석 기술들을 배경으로 연구되고 있기 때문에, 엄밀한 양자역학적인 계산인 제1원리 계산(또는 ab initio 계산법)과 분자 동역학, Monte Carlo 방법, 연속체 해석 기술 등과 같은 기존 해석 기술에 대한 이해가 필수적이다. 이러한 기존 해석 기술에 대한 이해에서 출발하여 나노 구조물의 길이 및 시간 스케일에 적절한 다중스케일 해석 기술이 개발되어야 한다.

2. 재료 거동 해석 기술의 개요

재료 거동 해석 기술은 재료의 거동을 나타내는 수식을 수치적인 방법을 이용하여 다루는 기술이다. 재료 거동 해석 기술은 크게 두 가지 요소로 구성된다.^[5,6] 첫 번째 요소는 주어진 재료가 가지는 전체 포텐셜 에너지(total potential energy)를 재료 내의 원자나 분자의 위치의 함수로 나타내는 것이다. 전체 포텐셜 에너지를 계산하는 방법에는 ab initio 방법, 근사적인 전자 구조 방법, 실험적인 모델, 구성방정식을 이용한 연속체 모델 등이 있다. 두 번째 요소는 수치 계산 기법이다. 원자 또는 분자들의 집합으로 되어 있는 재료 시스템의 전체 포텐셜 에너지를 계산하고, 그 시스템에 알맞은 지배 방정식을 수치적으로 풀어가는 방법들을 포함한다. 이러한 수치 계산 기법에는 분자 정역학(Molecular Statics), 분자 동역학(Molecular Dynamics), Monte-Carlo 방법, Kinetic Monte-Carlo 방법, 격자 동역학(Lattice Dynamics), 유한요소법(Finite Element Method), 유한차분법(Finite Difference Method) 등이 있다.

아래 그림 1에서는 길이와 시간 스케일에 따라, 폴리머에 적용될 수 있는 해석 방법이 구분되고 있음을 볼 수 있다. Quantum chemistry 방법에는 양자 역학에 기초한 제 일원리 계산 (Ab initio calculation) 방법과 근사적인 전자 구조 계산 방법이 있고, atomistic simulation은 실험적인 원자 포텐셜 모델을 이용하는 방법으로서, 계산기법상 분자동역학과 Monte Carlo 기법을 사용한다. Mesoscopic model과 Soft fluid는 나노 구조물 해석을 위한 다중 스케일 해석(multi-scale analysis)을 의미하며, Finite element 는 연속체 해석 기술에 해당한다. Ab initio 방법은 실험 데이터와의 fitting 과정을 거치지 않으므로 정확성 면에서 가장 완전한 해석이라 할 수 있지만, 매우 많은 계산 시간을 필요로 하므로 현재 수십 개 이하의 원자만을 다룰 수 있을 뿐이다. 반면에 실험적으로 측정된 구성방정식을 이용하는 연속체 모델은 실험 데이터에서 결정된 재료 상수를 이용하기 때문에 거대 구조물(bulk structure)을 다룰 수 있으며, 계산 시간 면에서 상당히 유리하다. 계산의 정확성을 위해서는 실험 데이터와의 fitting을 최소화하는 Ab initio 방법 쪽으로 가야 하지만, 계산의 비용 및 속도 면에서는 상당한 단순화 과정을 거친 연속체 모델 쪽으로 가야한다. 결국 계산의 정확성과 계산 비용 사이의 trade-off가 있는 셈이다.

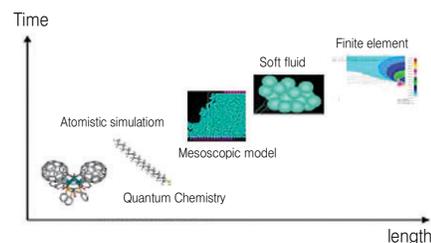


그림 1. 폴리머 재료의 모사에 있어서 시간과 길이 스케일의 범위^[8]

2.1 Ab initio 계산 방법

재료 내에서 원자핵(nuclei of atoms) 간의 접합(bonding) 및 상호 작용(interaction)은 전자에 의해 발생한다. 전자 구조로부터 유발되는 포텐셜 에너지의 총합을 재료 시스템의 전체 에너지라 부르고, 이 전체 에너지를 원자의 위치와 위치의 미분(derivative)으로 표현하는 것은 원자 단위 재료 거동 해석 기술에서 매우 중요한 부분을 이룬다. Ab initio는 라틴어로서 From the beginning이라는 의미를 가진다. 이는 물질 구성의 가장 원초적인 원리, 즉 first principle에 기초한다는 것을 뜻한다. 이 방법은 실험적으로 얻어진 상수들을 사용하지 않고, 전자 구조를 나타내는 파동함수(wave function)을 계산하는 방법이다. 수소 원자와 같이 매우 간단한 구조인 경우에는 Schrödinger 방정식을 해석적으로 해결하여 파동함수를 구하는 것이 가능하지만, 원자의 개수가 여러 개가 되면 수치적인 방법을 동원해야 한다.

Ab initio 방법이 실험적으로 얻어진 상수들을 사용하지 않는 방법이기 는 하지만, 보다 많은 개수의 원자들을 다루기 위해서는 몇 가지 가정들이 필요하다. 다음과 같은 두 가지 가정이 가장 널리 사용되고 있다.

- Born-Oppenheimer 가정: 원자핵(nuclei)은 공간 상에 고정되어 있다고 가정하고, 전자의 파동함수를 구한다. 그 다음 원자에 가해지는 힘을 계산하여 원자핵을 이동하고, 다시 전자의 파동함수를 구한다.
- One electron 가정: 각 전자가 다른 전자들과 상호작용하는 것을 평균 포텐셜로 모사하는 것이 가능하다고 가정하고, 각 전자에 대하여 독립적으로 파동함수를 구한다.

실제로 ab initio 방법으로 계산하기 위해서는 먼저 전자들에 대한 파동함수를 시험적으로 가정한다.^[7] 그 다음 변분 원리(variational principle)를 이용하여 시스템의 총 에너지를 최소화하는 전자 파동함수를 얻을 때까지 반복 과정(iterative process)을 수행한다. 자기 일치성(self-consistency)은 전자간 상호작용을 확인함으로써 얻을 수 있다. Ab initio 방법에는 크게 두 가지 방법이 있다. 첫 번째 방법은 density functional theory이다. 전자의 밀도는 그 재료 시스템의 기저 상태 에너지(ground state energy)와 물성을 결정한다. 이것을 이용하여 포텐셜 에너지 항을 전자 밀도의 함수로 나타내고, 얻어지는 Schrödinger-방정식과 유사한 방정식(Schrödinger-like equation)을 자기 일치성을 가지도록 해결한다. 이 방정식이 유명한 Kohn-Sham 방정식이다. 두 번째 방법은 Hartree-Fock 방법이다. 이 방법에서는 전자의 파동함수를 하나의 전자 궤도에서 얻어진 비대칭(antisymmetric) 함수의 조합으로 가정한다. 이로서 포텐셜 에너지 항을 전자 파동함수의 함수로서 표현할 수 있고, 역시 Schrödinger-방정식과 유사한 방정식을 얻을 수 있다. 이 방정식을 자기 일치성을 가지도록 해결함으로써 원하는 전자 파동 함수를 구할 수 있다.

2.2 근사적인 전자 구조 계산법

근사적인 전자 구조 계산법은 ab initio 방법에서 간략화하는 가정을 더 추가한 방법이다. 여기에는 weak pseudo-potential 방법과 tight-binding 방법이 대표적이다. Weak pseudo-potential 방법은 원자의 코어(core) 부분 바깥에서 실제 원자 포텐셜과 동일한 전자 밀도(electron density)를 가지는 pseudo-potential을 사용한다. 이러한 pseudo-potential은 자유 전자 Hamiltonian의 섭동(perturbation)으로 다루어 질 수 있으므로, 2차 섭동 이론(second order perturbation theory)을 이용하여 재료 시스템 전체 에너지를 전자의 평균 밀도에 의존하는 에너지와 원자간의 거리의 함수에 의존하는 pair potential의 합으로 나타낸다. 이 방법은 pair potential을 이용하기

때문에 재료 내의 공유 결합(covalent bonding)이 무시 가능한 경우에 적용 가능하다. 이러한 재료들로는 Li, K, Na, Cs, Be, Mg, Al, Sn, Pb, Ca 등과 같은 금속과 이들 금속간의 합금 재료들이 있다.

Tight-binding 방법은 재료 시스템 전체의 Hamiltonian을 원자 위치의 함수로서 표현된 bond(hopping) integral의 합으로 나타낸다.^[8] Bond integral은 원자의 위치에 의존하는 알려진 함수로 가정되며, 자기 일치성이 확보하기 위한 iteration과정을 사용하지 않는다. 특히 Parameterized tight-binding 방법은 bond integral과 그 함수형태를 실험 데이터나 ab initio 계산결과를 이용하여 결정하고, 자기 일치성 조건 대신에 전하의 중성 조건(charge neutrality)을 사용하는 경우가 많다.

2.3 실험적인 원자 포텐셜을 이용한 계산법

실험적인 원자 포텐셜을 이용한 계산법은 재료의 특성에 따라 여러 가지 형태를 가진다. 금속 결합(metallic bonding)이 지배적인 재료에는 pair-potential을 이용하고, 공유결합(covalent bonding)이 지배적인 재료에서는 tight-binding 방법에 기초한 Bond-Order potential을 사용한다. 금속 재료에 대한 실험적인 원자 포텐셜로서 Many-body potential도 자주 사용된다. Many-body potential에서는, 포텐셜의 함수 형태를 양자역학적으로 결정하고, 포텐셜에 포함되는 매개변수들은 실험 데이터나 ab initio 계산 결과에서 fitting하여 결정한다. EAM(Embedded Atom Method)나 Finnis-Sinclair potential 등이 이러한 many-body potential에 해당한다. 이온결합(ionic bonding) 재료에서의 실험적인 원자 포텐셜은 기본적으로 금속재료와 비슷한 pair-potential 형태를 지니지만, shell model과 같이 전자적인 극성(electronic polarization)을 포함하는 방법이 사용된다.

Pair-potential은 weak pseudo-potential과 마찬가지로 전자의 평균 밀도에 의존하는 에너지 항과 두 원자간의 상호 작용에 의존하는 에너지 항으로 이루어져 있다. 이러한 에너지 항들은 격자 상수(lattice parameter)나 탄성계수(elastic moduli) 등과 같은 재료의 평형상태 물성(equilibrium properties)을 이용하여 fitting되어 사용된다. 분자동역학 계산에서 자주 이용되는 Morse potential, Lennard-Jones potential 등이 이러한 pair-potential의 가장 간단한 형태이다. 많은 형태의 pair-potential이 금속 재료의 모델링을 위하여 개발되고 있지만, pair-potential이 금속에 사용될 때는 몇 가지 문제가 있음을 고려해야 한다.

1) pair-potential은 전자의 밀도에 의존하는 에너지 항을 정확하게 고려하지 못하고, 일정 부피(또는 일정 밀도)하에서 원자들의 상태 변화에 따른 에너지의 변화만을 나타낸다. 따라서 자유표면(free surface)이나 결합(defect) 주위와 같이 전자의 밀도가 크게 변화하는 부분에서는 이러한 pair-potential을 이용하는 것은 적절하지 못하다.

2) pair-potential 만으로 평형 상태를 계산한 경우 항상 Cauchy relation이 만족되는 결과를 얻게 되지만, 이것은 실제 금속 재료의 경우에 성립되지 않는 결과이다.

3) 공유결합을 가지는 실리콘(silicon)이나 게르마늄(germanium) 같은 재료에서는 적절하지 않다.

실리콘과 같은 공유결합 재료와 transition metal에서는 tight-binding 방법에 기초한 Bond-order 포텐셜이 사용된다. 이 포텐셜은 포텐셜 에너지가 원자 위치에 의존하는 것을 표현하며 결합의 양자역학적인 특성을 포함한다. 특히 결합 에너지가 원자간의 거리뿐만 아니라, 결합 간의 각도에도 의존하는 특성도 포함하므로, 금속 결합과 공유 결합이 혼재되어 있는 transition metal이나, 공유결합이 지배적인 반도체 재료의 모델링에 적합하게 된다. 이

러한 bond-order potential은 실제로 two body interaction 뿐만 아니라, three body, four body interaction에 해당하는 항들을 포함한다. 금속 재료에 사용되는 many-body central potential로는 EAM과 Finnis-Sinclare 방법이 대표적이다. EAM에서 금속은 양의 전하를 가지는 이온들이 그들을 덮고 있는(screening) 전자들 속에 포함되어 있는 것으로 본다. 이러한 금속 시스템의 총 에너지는 pair-potential이나 parameterized tight-binding 방법과 마찬가지로 두 부분으로 구성된다. 첫 번째 부분은 전자 에너지(electronic energy)이고, 두 번째 부분은 전자들에 의해 덮여 있는 이온들 간의 반발 상호작용이다. Density functional theory에 의하면, 원자들의 임의 배열에 의한 전자 에너지는 전체 전자 밀도의 고유한 functional로서 표현될 수 있다. 금속에서 임의의 점에서의 전자 밀도는 각 원자들에 속해 있는 전자 밀도의 선형 합(linear superposition)으로 표현될 수 있으므로, 이로부터 전체 에너지를 구할 수 있다. Finnis-Sinclare 방법도 비슷한 과정을 사용하여 포텐셜을 유도하지만, 전자 밀도에 의존하는 에너지 항의 함수 형태(embedding function)를 전자 밀도의 제곱근 항으로 모델링하여 사용한다. 이러한 many-body central potential은 전자 밀도가 일정하게 유지되는 재료 시스템에만 적용 가능한 pair-potential과는 달리, 전자 밀도가 급격히 변화하는 자유표면이나, 결합이 포함된 시스템의 해석에 이용될 수 있다.

이온 결합 재료에서 사용되는 실험적인 원자 포텐셜들은 크게 두 가지 부분으로 구성된다. 첫 번째 부분은 이온들 사이에 작용하는 원거리(long range) Coulomb 상호작용이다. 전체 원자에 대하여 원거리 Coulomb 상호작용을 합하여 계산하면, 수렴 속도가 매우 느리므로, Ewald 방법과 같은 합산 방법이 사용되게 된다. 두 번째 부분은 단거리(short range) 상호작용 부분이다. 보통 단거리에서 발생하는 이온들 간의 Pauli repulsion 을 표현하며, Born-Mayer potential 등으로 표현될 수 있다. 이온 결합 재료와 금속 간의 가장 큰 차이점은, 이온 결합 재료는 부도체라는 점과 결합 주위에서 내부 전기장이 형성될 수 있다는 점이다. 따라서 결합 에너지는 이온 결합 재료의 전자적 극성에 크게 의존하므로 전자적 극성을 표현할 수 있는 모델이 사용되어야 한다. 이러한 모델로서 대표적인 것이 shell model이다. Shell model에서는 일정 전하를 가진 각 이온이 두 가지 부분으로 이루어진 것으로 본다. 이온과 같은 질량을 가지는 core 부분과 질량을 가지지 않고 전하량만을 가지는 shell부분이 그것이다. core부분과 shell부분의 전하를 합하면, 원래 이온이 가지고 있던 전하량과 같아지도록 한다. Core와 shell은 스프링으로 연결되어 있고, 둘 사이에 작용하는 힘은 core와 shell간의 거리에 의존하는 것으로 모델링된다.

2.4 구성 방정식을 이용한 연속체 계산법

거대 구조물에 사용되는 많은 재료들은 고체역학(solid mechanics)의 오랜 역사를 통해 개발된 탄성, 소성, 점탄성 등과 같은 구성 방정식을 이용하여 그 거동을 표현하여 왔다. 구성 방정식의 함수 형태는 선형 탄성 이론(Hook의 법칙), 비선형 탄성 이론, deformation plasticity, incremental plasticity, standard linear visco-elastic model 등 다양한 형태로 제안되어 왔으며, 이러한 구성 방정식에 필요한 매개변수들은 인장 시험(tensile test)과 같은 기계적인 물성 실험 데이터를 이용하여 결정하였다.

이러한 구성 방정식에 의한 재료 거동 모사는 앞에서 제시한 방법들에 비하여 가장 단순화된 모델로 볼 수 있는데, 보다 많은 재료 상수를 도입하여 재료 거동을 모사할수록 더 정확한 해석이 가능해 질 수 있다. 예를 들어 변형량이 매우 커져서 선형 탄성 이론만으로 재료 거동을 모사할 수 없다면, 비선형 구성방정식을 만들고 그에 따라 도입되는 재료 상수를 실험을 통해 결정함으로써 보다 정확한 재료 거동 모사가 가능하다. 이러한 재료 거동 모사는 매우 원시적으로 보일 수 있지만, 그 적용성 면에서는 매우 우수한 결과를 보여왔다. 원자나 분자 레벨에서 일어나

는 근본적인 물리적인 원리에서 출발하지는 않았지만, 실제 현상으로 나타나는 재료 거동을 간단한 함수 형태로 모사하고, 그에 해당하는 재료상수들을 실험적으로 결정함으로써 거대 구조물의 기계적인 거동을 충분히 예측할 수 있었다. 그러나, 이러한 구성 방정식은 재료를 연속체로 가정하고 유도된 것이므로, 재료의 크기가 작아져서 더 이상 연속체로 모델링할 수 없는 경우에는 이러한 구성 방정식을 사용할 수 없다. 특히 나노 구조물과 같이 수십에서 수백 나노미터의 크기를 가지는 구조물에 대해서는 더 이상 연속체 가정에 근거한 구성 방정식을 그대로 이용할 수 없다.

2.5 수치 계산 기법

재료 거동을 모사하기 위한 수치 계산 기법들은 원자 레벨의 계산에서 이용되는 분자 정역학(Molecular Statics), 분자 동역학(Molecular Dynamics), Monte-Carlo 방법, Kinetic Monte-Carlo 방법, 격자 동역학(Lattice Dynamics) 등과 연속체 레벨의 계산에 이용되는 유한 요소 방법(Finite Element Method), 유한 차분 방법(Finite Difference Method), 경계 요소 방법(Boundary Element Method) 등이 있다.

2.5.1 분자 정역학(molecular statics)

분자 정역학은 재료 시스템의 내부 에너지를 최소화하는 원자나 분자의 위치를 결정하는 방법이다. 여기에는 온도의 영향은 포함되지 않게 된다. 원리는 N개의 particle로 이루어진 재료 시스템의 포텐셜 에너지를 particle의 위치의 함수로 나타내고 포텐셜 에너지를 최소화하는 particle들의 위치를 찾는 것이다. 특별한 주의가 필요한 점은 이러한 포텐셜 에너지는 국소 최소점(local minimum)을 여러 개 가질 수 있다는 것이다. 이러한 국소 최소점은 particle들의 초기 위치와 사용된 에너지 최소화 방법에 의존한다. 에너지 최소화 방법은 Steepest descent method, Variable metric method(or Fletcher-Powell algorithm), Conjugate gradient method 등이 있으며, 국소 최소점이 아닌 global minimum을 찾아내는 보장된 방법은 아직 없다.

분자 정역학 계산시에 고려할 점은 다음과 같다. 먼저, global minimum을 찾아내는 보장된 방법이 없으므로, 에너지 최소화 방법들을 사용하여 찾아낸 최소점이 global minimum인지 확인하여야 한다. 따라서 계산시에 사용하는 particle들의 초기 위치(starting configuration)들을 바꾸어가며 가장 최소의 에너지가 나오는 지를 확인해야 한다. 여러 가지 에너지 최소화 방법중에서 steepest descent method는 starting configuration에서 가장 가까운 국부 최소점에 수렴하는 경향이 있으며, variable metric method와 conjugate gradient method는 shallow local minimum은 지나쳐가는 경향이 있다. Starting configuration시에 존재하는 대칭성은 계산도중에도 계속 유지되는 경향이 있으므로, 대칭성이 없는 starting configuration을 원할 때는 particle들의 위치를 랜덤(random)하게 배치하는 방법을 사용한다.

2.5.2 분자동역학(molecular dynamics)

분자 동역학은 원자나 분자의 움직임을 고전적인 particle dynamics에서 사용하는 운동방정식을 해결함으로써 결정하는 방법이며, 시스템의 운동에너지는 시스템의 온도와 관련된다. 분자동역학 해석은 다음과 같은 과정을 거쳐서 진행된다. 먼저, 적절한 경계조건(periodic, non-periodic, semi-periodic etc)을 가지는 particle들의 집합을 설정한다. 설정된 particle들에 초기 조건을 부여한다. 초기 조건으로는 particle들의 초기 위치와 초기 속도를 부

여하는 방법과 particle들의 초기 위치와 그 다음 time step에서의 위치를 부여하는 방법이 자주 사용된다. 그 다음 과정은 평형화 과정이다. Particle들에 부여된 초기 조건이 평형상태에 있지 않을 가능성이 많기 때문에, 이 초기 particle system의 운동에너지와 포텐셜 에너지가 일정한 값으로 안정화될 때까지 운동방정식을 적분해가면서 particle system을 relax시켜야 한다. 이러한 과정 중의 particle들의 속도와 운동량을 각각 합한 값은 항상 zero가 되어야 하며 이것은 시스템에 강체운동(rigid body motion)이 발생하지 않음을 의미한다. 마지막으로 적절한 ensemble에 대하여 분자동역학 계산을 수행하게 된다. 운동 방정식을 적분해가는 알고리즘에는 Verlet algorithm, Predictor-corrector algorithm 등 여러 가지가 있지만, 문제의 성격에 따라 적절한 알고리즘을 선택하여 계산한다. 분자동역학을 적용하는 ensemble에는 여러 종류가 있다. 온도와 particle의 개수, 전체 부피를 일정하게 유지하면서 분자동역학을 적용할 수 있는데, 통계역학에서는 이러한 것을 Canonical ensemble이라 부른다. 온도와 particle의 개수, 그리고 압력을 일정하게 유지하면서 분자동역학 계산을 할 수 있는데, 이것을 canonical isothermal-isobaric ensemble이라 부른다. 또한 온도와 particle의 개수, 평균 응력 텐서를 일정하게 유지하면서 분자동역학을 적용할 수 있는데, 이를 canonical isothermal-isostress ensemble이라 부르며 이렇게 분자동역학 계산을 수행하는 알고리즘을 Parrinello-Rahman algorithm이라 한다. 이상 언급한 여러 가지 ensemble에 대하여 분자동역학 계산을 수행하기 위해서는 보존되는 물리량에 따라 특별한 알고리즘이 사용되게 된다.

2.5.3 Monte-Carlo 방법

Monte-Carlo 방법은 시스템의 가능한 상태들을 랜덤하게 선택하는 통계적인 방법을 사용하여 시스템의 평형 상태 구조나 물성을 구하는 방법이다. 분자동역학이 시간에 따른 particle system의 변화를 계산하지만, Monte-Carlo는 통계역학적인 개념에서 ensemble에서 평균되는 물리량을 계산한다. 분자동역학에서 계산된 물리량의 시간 평균값과 Monte Carlo에서 계산되는 물리량의 ensemble 평균값은 Ergodic theorem에 의해서 일치하게 된다.

Monte-Carlo 계산은 phase space 상에서 일정한 확률을 가지고 일어날 수 있는 상태(state)들의 집합을 구성함으로써 이루어진다. 이러한 상태들의 집합을 구성하는 방법으로 Markow chain과 같은 랜덤 이동을 사용한다. 랜덤이동은 초기 상태(initial state)에서 다음 상태를 찾아내는 방법으로 이해할 수 있는데, 다음 상태로 이동할 확률은 계산하고자 하는 프로세스의 특성에 따라 결정된다. Canonical ensemble의 경우 확률은 Boltzmann distribution 함수를 이용하여 주어지며, Metropolis algorithm이 많이 사용된다. 계산하고자 하는 ensemble에 따라서, 적절한 distribution 함수와 partition 함수를 이용하여 계산을 수행한다.

Monte-Carlo 방법에서 사용되는 random work는 시간에 따른 상태의 이동을 나타내는 것이 아니므로, 이것을 시간적인 프로세스로 이해하는 것은 문제가 있다. 이러한 점에서 점진적으로 진행되는 프로세스를 모델링하는 목적으로 Kinetic Monte-Carlo 방법이 활발하게 연구되고 있다. Lattice dynamics는 particle로 이루어진 시스템의 진동을 모델링하는 방법이다.

2.5.4 편미분 방정식의 수치 해석 기법

연속체 역학에서 이용되는 유한 요소 방법(Finite Element Method)과 유한 차분 방법(Finite Difference Method), 경계 요소 방법(Boundary Element Method)은 연속체의 거동을 나타내는 편미분방정식을 수치적으로 해결하는 방법이다. 유한 요소 방법을 간단히 설명하면 다음과 같다. 우선 해석대상인 재료의 영역을 유한한 크기

의 요소(element)로 나누고, 각 요소 내에서의 변위나 기타 물리량을 interpolation 함수를 사용하여 요소의 절점(node)에서의 값으로 표현한다. 각 요소 절점에서의 물리량을 미지수로 하여 경계조건과 지배방정식으로부터 행렬방정식을 유도한다. 이 행렬방정식을 해결함으로써 해석 대상의 거동에 대한 근사해를 얻게 된다.^[9] 이러한 연속체 해석 방법은 거대 구조물의 거동해석에 성공적으로 적용되었으며 대부분의 거대 제품(자동차, 비행기, 전자제품, 선박 등)은 이러한 연속체 해석에 기초한 설계 과정을 통해 생산되게 된다.

해석 대상의 크기가 수십 나노미터의 크기로 작아지면, 재료의 거동은 더 이상 연속체로 모델링할 수 없게 되므로 그에 해당하는 편미분 방정식은 의미를 잃게 된다.

3. 나노 구조물 해석을 위한 다중 길이 차원 해석 기술

나노 구조물은 특성 길이가 100nm이하되는 구조물이다. 이러한 구조물은 해석하기가 매우 까다롭다. 구조물의 크기가 아주 작아서 원자 수십 개 정도라면, ab initio 방법을 이용한 계산이 가능하고, 구조물의 크기가 수천 나노미터의 정도의 크기라면 연속체 방법을 사용함으로써 쉽게 해석할 수 있다. 그러나, 그 중간 정도의 크기인 나노 구조물은 연속체 방법을 쓰면 해석 결과에 많은 오류가 포함되고, ab initio나 분자동역학과 같은 원자 레벨 방법을 쓰면 계산량이 너무 많아지는 문제가 있다. 현재의 기술 발전 속도로 볼 때, Moore의 법칙은 머지 않아 나노 구조물을 이용한 나노 전자소자(nanoelectronic device)가 개발될 것임을 예견하고 있지만, 아직은 이러한 나노 구조물을 해석하는 방법은 정립되어있지 않다. 여기에서는 현존하는 몇 가지 나노 구조물 해석 방법^[6, 10]을 정리하고, 각각의 원리와 적용 범위 등을 살펴보고자 한다. 먼저 ab initio방법과 분자동역학 방법을 연계한 Car-Parrinello 방법을 살펴본다. 그 다음, multi-scale 해석 방법 중에 상당한 관심을 모으고 있는 Quasi-continuum 방법을 살펴보고, Coarse grained dynamics 방법, Lattice Boltzmann 방법, Dissipative particle dynamics 방법을 차례대로 살펴본다.

3.1 Car-Parrinello 방법

Car-Parrinello 방법은 ab initio 분자동역학의 대표적인 방법이다.^[11] 이 방법은 보통 multi-scale 방법으로 구분되지는 않지만, ab initio방법과 분자동역학의 영역 사이에 길이와 시간 스케일 차이를 이어주는 것으로 보고, 여기에서는 multi-scale 방법과 함께 다룬다. 보통 분자동역학에서는 실험적인 원자 포텐셜을 이용하여 분자 또는 원자간의 동역학 문제를 해결하지만, ab initio 분자 동역학에서는 실험적인 원자 포텐셜을 사용하지 않는다. 대신에 ab initio 방법으로 전자의 파동함수를 계산하고, 이로부터 Hellmann-Feynman Theorem을 이용하여 원자 간에 작용하는 힘을 구하여 보통의 분자동역학에서처럼 원자의 운동을 계산한다.

Car-Parrinello 방법은 density functional theory을 기초로 하여 local density approximation과 Pseudo-potential, plane wave basis를 이용한다. 실제 전자의 파동함수와 원자핵의 운동은 서로 긴밀하게 연관되어 있으므로, Car-Parrinello방법에서는 전자의 파동함수를 원자핵의 운동과 연계하여 iteration을 통해 계산한다. 이 방법은 1985년 Car와 Parrinello에 의해 처음 발표된 이후에, conjugate gradient 방법과 총 에너지 최소화 방법과 같은 Kohn-Sham 방정식의 iteration 해를 효율적으로 구하는 여러 가지 방법들이 계속해서 개발되고 있다.

3.2 Quasi-Continuum 방법

Tadmor, Ortiz, Phillips의 Quasi-Continuum 방법^[12]은 원자 단위 해석 영역과 연속체 단위 해석 영역 사이의 길이 차원을 자연스럽게 연결해주는(seamless bridging) 계산 기법 중 하나이다. 이 기법의 주된 목적은, 원자 단위로 조밀하게 묘사된 재료의 거동을 운동학적인 제한 조건(kinematic constraint)을 사용하여 점차 덜 조밀한 묘사 방법으로 체계적으로 대체해 가는 것이다. 운동학적인 제한 조건을 사용할 때에는, 격자 결함(lattice defect)과 같이 조밀하게 기술해야 할 부분에서는 원자 단위의 조밀한 묘사 방법이 유지되고 변형장이 거의 변화하지 않는 영역에서는 많은 수의 원자들을 묶어서 다룰 수 있어야 한다.

Quasi-Continuum 방법은 다음과 같은 세 가지 요소를 포함하고 있다.^[13] 첫째는 재료의 원자적인 에너지를 최소화하는 방법, 둘째는 유효 평형 방정식(effective equilibrium equation)을 계산하기 위한 합산 법칙(summation rule), 셋째는 변형장에 따라 구조물의 mesh를 적응해 가는 방법이다. Quasi-Continuum 방법이 처음 제안되었을 때에는 분자 정역학과 마찬가지로 에너지의 최소화 상태를 계산하기 때문에 온도에 의한 원자의 fluctuation은 고려되지 않았다. 이는 결국 절대 온도 0 K에서의 재료 거동을 모사하는 셈이었다. 이러한 문제를 해결하기 위하여 Shenoy 등^[14]은 온도의 영향을 고려할 수 있도록 Quasi-Continuum 방법을 확장하는 방법을 제시하였다. Quasi-Continuum 방법은 재료 내에 결함이나 응력 집중 부위가 있을 때에 유용하게 적용되며, 금속 재료의 Many-body potential로서 자주 사용되는 EAM(Embedded Atom Method)을 이용한 계산 결과들이 계속적으로 발표되고 있다. 주로 다루어 지는 문제들로는 입계(grain boundary), 균열(crack), 전위(dislocation) 등의 상호작용, 전위의 생성, 나노인덴테이션 과정의 모사 등이 있다.^[15, 33, 34]

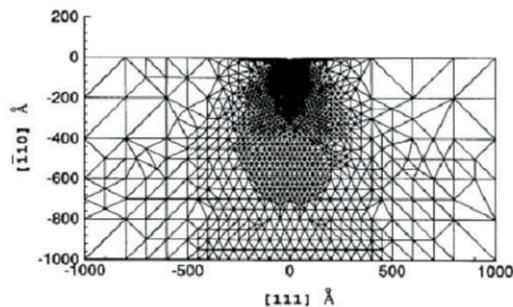


그림 2. Quasi-continuum 방법에 의한 Nano indentation과정의 해석^[14]

3.3 Coarse Grained Dynamics 방법

분자동역학(Molecular Dynamics)은 재료 시스템의 미세 구조나 거동을 연구하는 데에 강력한 도구이지만, 폴리머와 같이 분자량이 크고 복잡한 분자를 다루기에는 적합하지 않다. 이러한 복잡한 분자들에 대한 특성 시간 단위(characteristic length scale)는 분자동역학으로 다룰 수 있는 작은 분자들의 시간 단위보다 매우 크기 때문이다.

Coarse Grained Dynamics는 분자동역학이 가지는 이러한 시간 단위의 한계를 극복하는 데에 유용하다.^[16-18] 일반적인 분자동역학에서는 각각의 질점(mass point)이 하나의 원자를 나타내지만, 이 방법에서는 원자들의 집합(group)을 나타낸다. 만일 재료 시스템의 일부에서는 원자레벨의 분해능을 가지면서 다른 부분에서는 Coarse

graining을 사용한다면 이 둘 사이를 연결하는 적절한 scaling rule을 고안하는 것이 유리하다.

Coarse Grained Dynamics에서도 분자동역학과 마찬가지로 질점의 운동방정식을 다루게 되지만, 질점에 가해지는 힘은 원자단위 모델이 아닌 다른 모델로부터 유도된다. 대표적인 모델이 united atom model, bead-spring model, ellipsoidal model 등이다. 이러한 모델들은 포텐셜 함수로서 표현되는데, 보통 다음과 같은 세 부분으로 구성된다. 첫째는 원자들간의 화학결합과 관련된 에너지를 나타내는 bonding potential이다. 이 bonding potential은 화학결합의 stretching과 굽힘(bending)과 관련된다. 두 번째는 화학적으로 결합되지 않은 원자들간의 상호 작용을 나타내는 non-bonding potential이다. 여기에는 van der Waals 포텐셜과 Coulomb 포텐셜이 포함된다. 셋째는 외부에서 가해진 field와 외벽(wall)의 영향을 나타내는 external potential이다.

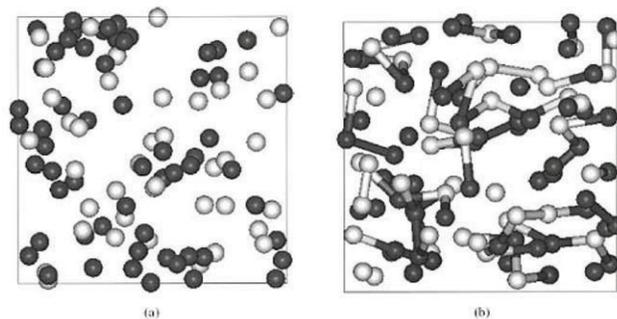


그림 3. (a) Initial structure (b) Final structure after bond creation^[32]

3.4 Lattice Boltzmann 방법

Lattice Boltzmann 방법^[19, 20]은 Boltzmann 방정식에 기초한 수치 계산 기법이며, 복잡한 형상 속에서 단일상(single phase) 또는 다중상(multi phase)의 유체에 관련된 여러 가지 복잡한 유동문제를 해결하는 유용한 방법이다. 이 방법은 유체를 particle들의 집합으로 다루며, 각 grid 점에서 유체의 각 구성요소들(multi-phase 유체에 대하여)에 대한 속도 분포 함수를 이용하여 이 particle들을 나타낸다. 유체 particle들은 가해진 외력하에서 운동하면서 서로 충돌할 수 있고, 충돌하는 particle들의 시간 평균 운동은 Navier-Stokes 방정식을 만족하도록 구속을 가한다.

Lattice Boltzmann 방법은 원자 포텐션을 이용하여 원자나 분자의 운동방정식을 다루는 분자 동역학과 편미분 형태의 지배방정식을 다루는 연속체역학 사이에 존재하는 방법으로 이해할 수 있다. 실제로, Lattice Boltzmann 방법으로 다루는 particle들의 평균 자유 이동 거리(mean free path)가 점점 작아져서 연속체와 유사하게 됨에 따라, 계산 결과는 Navier-Stokes 방정식의 결과에 수렴하게 된다. 더욱이 이 방법은 두 가지 유체 사이의 경계를 지나면서 압력이 감소하는 것과 유체와 고체의 경계에서 일어나는 wetting 영향과 같은 다양한 경계조건을 자연스럽게 다룰 수 있고, 유체 시스템의 시간에 따른 변화 양상을 모델링할 수 있다. 또한 자연스럽게 병렬화될 수 있으므로, 계산 시간과 메모리 면에서 효율적인 계산을 수행할 수 있다.

Lattice Boltzmann 방법을 이용한 예로는, Random porous media와 같은 복잡한 형상 속에서의 유체의 거동 모사, 혼합 유체의 separation문제와 같은 다중상 유체의 거동 모사, 용해물(melt)과 결정 성장 사이의 상호작용과 같은 유체와 고체 사이의 유동 문제 모사 등이 있다.^[21]

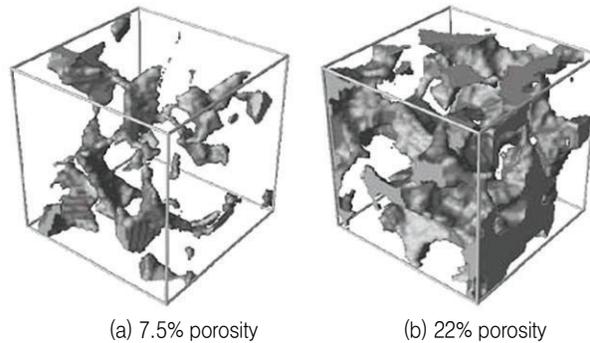


그림 4. Random porous 재료에서 유체의 거동 해석^[21]

3.5 Dissipative Particle Dynamics 방법

현탁액(예를 들어 시멘트나 콜로이드)과 같은 복잡한 유체의 특성을 이해하는 것은 중요하고도 어려운 작업이다. 이러한 복잡한 유체들은 서로 다른 유체들 간의 경계 조건, 유체와 고체 간의 경계 조건 등을 다루는 것이 어렵기 때문에, 이들의 거동을 수치적으로 모사하는 것은 상당히 도전적인 작업이 된다.

Dissipative Particle Dynamics는 이러한 경계 조건을 자연스럽게 다룰 수 있는 계산 기법이다.^[22] 이 방법은 1985년 Hoogerbrugge와 Koelman에 의해 시작되었으며 다중상 시스템, 폴리머, 콜로이드, 현탁액 등과 같은 복잡한 유체의 유동학적인 거동을 모사하려는 목적에서 개발되었다. 이 방법은 Newton의 법칙에 따라 particle들을 움직인다는 점에서 분자동역학과 유사하지만, particle 간의 상호 작용이 보다 큰 시간 간격에 대하여 적용된다는 점에서 분자동역학과 다르다. 이러한 특징때문에 Dissipative Particle Dynamics는 분자동역학보다 훨씬 큰 시간 단위에서 물리적인 거동을 모사할 수 있다.^[23]

원래 Dissipative Particle Dynamics에서는 유체의 덩어리를 나타내는 자유 particle들의 위치를 업데이트시키기 위해 Euler 알고리즘을 사용하고, 고체 개재물의 위치를 업데이트시키기 위해 leap frog 알고리즘을 사용하였지만, NIST에서 QDPD(Quaternion-based Dissipative Particle Dynamics) 알고리즘을 개발하였다. QDPD 알고리즘은 자유 particle과 고체 개재물의 위치를 업데이트시키기 위해서 velocity Verlet 알고리즘을 사용하고, 고체 개재물의 운동은 Omelayan의 방법을 사용하여 결정한다.

4. 나노 구조물 해석 기술의 연구 동향

여기에서는 현재까지의 미국, 유럽, 일본 등 선진국의 나노 구조물 해석 기술 연구 동향과 활발한 연구 활동을 보이고 있는 연구자들에 대하여 조사하고, 그들이 수행중인 연구 주제를 살펴본다.

4.1 선진국의 연구동향

미국 NSTC(National Science and Technology Council)의 “National Nanotechnology Initiative(2000)”^[1]에 나타나 있는 것처럼, 나노 구조물 해석 기술에서 이슈가 되고 있는 것은 첫째로 설계에 의한 나노 구조재료

(Nanostructured materials by design)이다. 나노 기술을 이용하여 현재의 재료보다 더 강하고, 더 가벼우며, 더 단단하고, 더 안전한 재료를 개발하는 방법으로, 설계를 통해 주어진 목적에 맞는 새로운 재료를 창조해 내겠다는 것이다. 이러한 비전을 구체화시키기 위해서 나노 구조물의 보다 근본적인 이해와 새로운 현상의 탐구, 설계 예측 능력의 향상 등을 위한 Multi-scale and coupled phenomena modeling and simulation 기술의 개발을 독려하고 있다. 원하는 물성과 기능을 가지는 새로운 재료 창출을 위한 설계 및 모사 소프트웨어, 그리고 나노 구조물의 생산을 위한 공정 프로세스 모사에 대한 개발도 활발히 진행되고 있다.

나노 구조물 해석 기술에서 또 다른 이슈가 되고 있는 것은 나노전자공학, 광전자 및 자기학(Nano-electronics, optoelectronics and magnetics)이다. Moor의 법칙에 의해 예견되는 전자공학의 발전은 가까운 장래에 나노 구조물을 이용한 전자/광전자/자기 소자의 개발을 필요로 하고 있다. 나노 구조물은 거대구조물과는 매우 다른 전자기 물성, 광물성, 기계적 물성, 물리/화학적 물성을 지니고 있으므로, 나노 구조물을 이용한 새로운 소자의 개발을 위해서는 나노 구조물 해석 기술의 발전이 필수적이라 할 수 있다. 따라서 나노 구조물 해석 기술을 이용하여 실험을 최소화하면서 소자의 전자기 특성 및 광 특성, 물리/화학적 특성을 예측하는 기술이 활발히 연구되고 있다.

미국 DOE(Department of Energy)의 “Theory and Modeling in Nanoscience(2002)”^[2]에는 현재까지 세계적으로 연구되어온 나노 해석 기술의 현황과 앞으로의 과제에 대하여 다음과 같이 정리하고 있다.

- 전달 메커니즘(transport mechanism)에 대한 해석 기술: 분자 전자공학(molecular electronics)에 필요한 전자 전달(electron transport), spintronics를 이용한 소자 개발을 위한 spin 전달, 화학적/생물학적 센서와 나노유동해석에 필요한 분자 전달 등에 대한 해석 기술
- 광물성에 대한 해석 기술: 소재의 광물성은 소재의 크기에 따라 급변하는 경우가 많다.
- 나노 계면에 대한 해석 기술: 나노 구조물은 형상과 재질이 다른 재료들이 복합되어 사용되는 경우가 자주 발생한다.
- 부드러운 재료와 단단한 재료로 이루어진 나노구조물의 해석 기술: DNA나 혈액과 같은 바이오 재료와 실리콘과 같은 세라믹 재료가 복합된 나노 구조물의 해석이 필요하다.
- 시간과 길이 차원의 연결 기술: 양자역학적 해석이나 원자 레벨 해석의 결과가 보다 크기가 큰 나노 구조물의 해석에 연결되는 것이 필수적이다.
- 자기 조립 과정의 해석 기술: 나노 구조물의 대량 생산에 필수적이다.
- Nano building block과 나노 구조물의 dynamics/assembly/growth에 대한 해석 기술
- 나노 해석을 위한 fast algorithm

독일의 Max Planck Institute의 보고서 “European white book on fundamental research in materials science(2000)”^[3]에 보면, 유럽에서의 나노 해석 동향 및 앞으로의 연구 방향을 발견할 수 있다. 아래 그림은 보고서 중에서 이러한 내용을 잘 요약한 것을 인용한 것이다. 실용적인 응용에 많은 관심을 가지고 있는 미국의 경우와는 달리 보다 기본적인 이론에 관심을 가지고 있음을 알 수 있다.

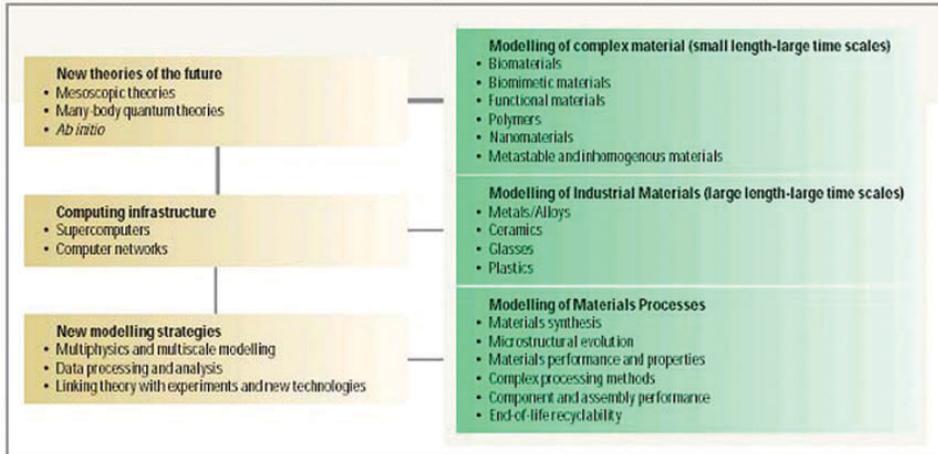


그림 5. 유럽에서의 재료 거동 해석 기술의 연구 동향³⁾

일본의 나노 구조물 해석 기술의 동향은 “일본의 나노기술 현황”^[24]에 잘 정리되어 있다. 이 보고서는 주로 JRCAT(Joint Research Center for Atom Technology)에서 수행된 ATP(Atomic Technology Project)의 연구 목표와 결과를 토대로 하고 있다. 이 중에서 나노 구조물 해석 기술에 관련된 연구 동향을 보면 다음과 같다.

- Surface atomic process 해석: 실리콘의 표면에서 일어나는 reconstruction, homo-epitaxial growth, 산화과정 등에 대한 해석과 실리콘과 실리콘 산화물 사이의 구조적/전자적 물성, 수분에 의한 Fe의 산화 등에 대한 수치적인 해석을 다룬다.
- 화학 반응 해석: 여러 가지 화학물질의 합성, 금(gold) 위에 형성되는 자기 조립 단일층(self-assembled monolayer)의 해석, 유기 금속(organic metal)의 전자 구조 해석 등을 다룬다.
- 상 제어(phase control) 해석: LaMnO₃의 자성에 미치는 격자 왜곡의 영향 해석, 여러 가지 자성체의 에너지 및 spin구조의 해석, 고압(high pressure) 하에서 FeO와 MnO의 상태도(phase diagram) 해석 등을 다룬다.
- 분광(spectroscopy)과 전자 여기(electron excitation) 해석
- 거대 시스템을 위한 보다 신속한 계산 방법의 개발

4.2 연구 그룹

Multi-scale 해석 기법에 의한 나노 구조물의 거동에 대한 연구는 NIST, Lawrence Berkeley National Lab., Sandia National Lab., Max Planck Institute 등의 연구소와 Hewlette-Packard, IBM 등과 같은 기업 연구소, Stanford, Caltech, Michigan, Duke, Cornell, 나고야, Cambridge 대학 등의 다양한 배경을 지닌 연구 그룹에 의해 활발히 수행되고 있다.

Ab initio 계산방법을 보다 큰 사이즈의 구조물에 적용하려는 연구는 solid state physics나 condensed matter physics를 전공한 연구자들을 중심으로 이루어지고 있고, 실험적인 원자 포텐셜을 이용한 분자동역학을 보다 큰 구조물에 적용하려는 연구는 solid mechanics를 전공한 기계공학자와 재료공학 전공자들을 중심으로 이루어지고 있다. Lattice Boltzmann 방법이나 coarse grained dynamics, dissipative particle dynamics 등은 유체역학의 전공

자들이나 폴리머를 다루는 화학공학 전공자들을 중심으로 많은 연구가 이루어지고 있다.

여기서는 대표적으로 미국 IBM 연구소와 일본의 나고야 대학, 미국의 Cornell, Caltech, Northwestern 대학의 연구 그룹을 살펴본다.

4.2.1 IBM

미국 IBM 연구소는 세계에서 가장 빠른 슈퍼컴퓨터를 이용하여 매우 많은 자유도(degree of freedom)을 가지는 해석을 수행하여왔다. 특히 IBM Almaden 연구소에 있는 Abraham 그룹은 대표적인 multi-scale 문제인 균열에 관한 다수의 연구 논문을 발표하였다.

균열 문제는 거시적으로 흔히 관찰되는 문제이지만, 거시적 해석에 자주 사용되는 선형 탄성 이론만으로는 균열 끝단에서 일어나는 비선형성과 atom간의 분리(separation)을 제대로 모사할 수 없다. 따라서 재료의 toughness 실험에서 사용될만한 거시적인 구조물이 균열을 포함하고 있는 경우에는 다음과 같은 해석 전략을 사용한다. 균열 끝단에서는 양자역학에 근거한 해석, 즉 tight binding method와 같은 방법을 사용하고 균열 끝단에서 조금 떨어진 영역에서는 재료 변형의 비선형성을 모사하기 위하여 분자동역학을 사용한다. 균열로부터 충분히 멀리 떨어져서 재료의 거동이 탄성이론으로 모사 가능한 영역에서는 선형 탄성에 기초한 유한 요소 해석(finite element analysis)를 사용한다. 특히 균열의 동적 진전 과정을 분자동역학에 기초한 방법으로 해석하여 기존의 이론에서 예측할 수 없었던 균열 진전 속도에 관한 새로운 결과를 제시하여, 재료 거동 해석에 관련된 새로운 가능성을 보여주었다.^[25-27] 또한 균열의 동적 진전 문제뿐만 아니라 재료의 brittle/ductile 특성에 따른 균열 해석, 하드디스크에서 일어나는 미소한 접촉문제 해석 등에 관한 연구를 수행하였다.

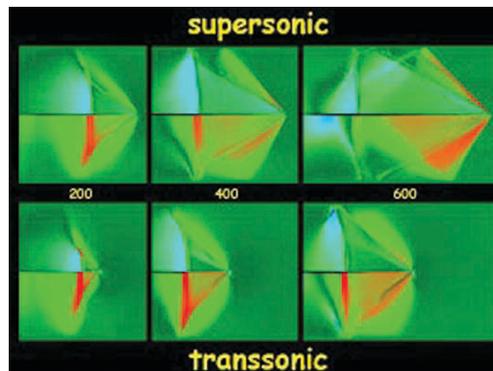


그림 6. Brittle한 재료 내에서 supersonic crack 진전해석 결과^[26]

4.2.2 나고야 대학

1997년 일본의 Ministry of International Trade and Industry에서 Multi-scale 해석의 필요성을 인식하고 이에 관련된 프로젝트를 제안하였으며, 1998년부터 나고야 대학을 중심으로 일본의 산업계, 학계, 정부의 연합으로 OCTA 프로젝트가 시작되었다. 이 프로젝트의 목적은 soft material(폴리머나 bio-material)에 대한 multi-scale 해석 시스템을 구축하는 것으로서, 그 결과로 multi-scale 프로그램이 개발되었다. 이 프로그램은 폴리머 모델에 대한 분자동역학 해석 등 각기 다른 scale의 해석을 담당하는 네 개의 simulation engine과 해석 결과의

Visualization을 위한 그래픽 프로그램으로 구성되어 있다.^[32]

이 프로그램은 소스(source)가 공개되어 있고 유연하여 매우 다양한 연구에 이용되었으며, 몇 가지 예를 들면 다음과 같다.

- Analysis of the interfaces of the phase separated structures in ultra thin polymer films.
- Prediction of electro-rheological effect of binary polymer blends.
- Molecular dynamics study of poly (ethylene oxide) (PEO) containing LiI salt.
- Molecular dynamics simulation of alkane crystallization processes.
- Effect of short-chain branching
- Prediction of elastic properties of thermoplastic elastomer.
- Derivation of coarse-grained potential for polyethylene.
- Study of interface strength of polymer blend.
- Estimation of optical transmittance of polymer materials using spherulites growth model.
- Prediction of strain energy on photo-resist patterns.

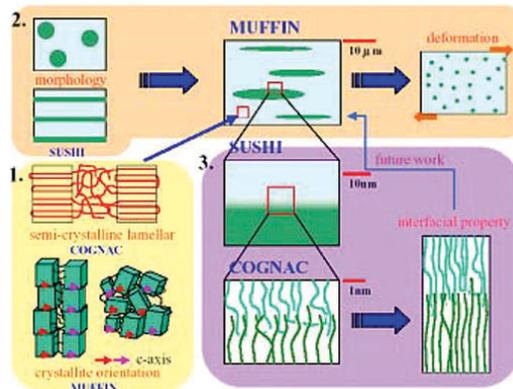


그림 7. OCTA 프로그램을 이용한 해석의 예^[29]

4.2.3 Cornell 대학

Cornell 대학의 Cornell theory center에는 Multi-scale modeling group^[30]이 있다. 여기에는 T. Arias, S. Baker, P. Dawson, M. Grigoriu, T. Ingraffea, M. Miller, C. Myers, L. Phoenix, J. Sethna, W. Wawrzynek 등이 참여하고 있으며 이들은 각각 physics와 mechanical engineering, material science, civil engineering 등의 다양한 전공 배경을 지니고 있다.

이들의 연구 방향은 여러 가지 길이와 시간 스케일에서의 재료의 구조와 프로세스에 대한 정보를 통합하여 재료 거동에 대한 보다 향상된 기술을 개발하는 것이다. 이 그룹에서 주목할 만한 것은, 이들이 Digital Material이라는 multiscale 해석 프로그램을 개발하고 있고, 해석 코드의 C++와 Python소스를 공개하고 있다는 것이다. 이 프로그램은 분자동역학코드, phase field코드, quasi-continuum코드, Hysteresis코드로 이루어져 있다. 이 그룹에서 다루고 있는 구체적인 연구내용은 다음과 같다.

- Electronic and atomic structure of nanoscale defects in crystalline solids
- Parameterizations of nanoscale defects for use in longer-range continuum theories
- Dislocation dynamics, interactions, and structure formation
- Texture characterization and evolution in polycrystals, and their role in determining mechanical properties
- Void nucleation, growth and coalescence in solids
- Fatigue crack initiation in polycrystals
- Computational fracture mechanics and crack growth modeling
- Statistical characterizations of material properties from microstructural variability
- Novel algorithms and programming environments for materials simulation.



그림 8. Cornell 대학의 Digital material의 구성^[90]

Tadmor, Ortiz, Phillips은 1996년 Quasi-continuum method를 발표하였다.^[12] Quasi-continuum 방법은 앞에서 기술한 바와 같이 여러 가지 Multi-scale 해석 방법 중에서도 정교함과 적용성에 있어서 매우 우수한 방법으로서, 여러 연구자들에 의해 계속적인 연구가 이루어지고 있다. 현재 Ortiz와 Phillips는 미국의 칼텍(Caltech)에서, Tadmor는 이스라엘의 Technion에서 활발히 연구를 진행하고 있다. 이들은 재료의 거시적 거동(macroscopic behavior)을 미시적인 원리(microscope principle)에 기초하여 해석하는 데에 관심을 가지고 있으며, 파괴, 소성 역학, 해석에 기초한 재료 설계, 전위 역학(dislocation mechanics), multiscale algorithm, 나노 구조물 해석 등에 관련된 여러 연구 프로젝트들을 수행하고 있다. Ortiz교수의 연구 프로젝트들을 살펴보면 다음과 같다.

- Virtual Facility for Simulating the Dynamic Response of Materials
- Design and Testing of Materials by Computation: A Multi-Scale Approach
- A Next-Generation Scalable Finite Element Software to Describe Fracture and Fragmentation of Solids and Structures
- Scalable Quasi-Continuum Software for Advanced Mixed Atomic-Continuum Simulation of Material Behavior at the Nanoscale
- Steels with High Dynamic Strength and Toughness: An Integrated Materials by Design Approach

- Multiscale Modeling and Process Optimization for Engineered Microstructural Complexity
- Center for Integrative Multiscale Modeling and Simulation

4.2.4 Northwestern 대학

Northwestern 대학의 Liu 교수 그룹은 미국 정부의 지원을 받아서 2001년부터 2020년까지 20년간 Cybersteel 프로젝트를 진행하고 있다.^[31] 이 연구과제의 목적은 steel의 다중 스케일 해석 기술을 개발하는 것이다. 실험적인 매개변수가 들어가지 않는 양자역학적인 계산에서 시작하여 steel의 결함과 손상 메커니즘을 모사하고, hierarchical한 다중 스케일 해석 기법과 concurrent한 다중 스케일 해석 기법을 적절하게 적용하여 거시적인 steel의 물성을 예측하는 것을 최종 목표로 하고 있다.

아래 그림에서 볼 수 있는 것처럼 양자역학 계산 결과는 microcell의 계산에 이용되고 microcell은 macrocell의 계산에 이용된다. 이러한 계산 과정을 통하여 steel의 iron matrix와 secondary particle 간의 상호작용 및 거시적인 구성 방식이 결정된다. 최종적으로 steel의 microstructure와 steel의 기계적 물성(즉, fracture toughness, strength 등)의 관계를 예측함으로써, 원하는 물성을 지닌 steel의 재료 설계 기술을 확보하려 하고 있다.

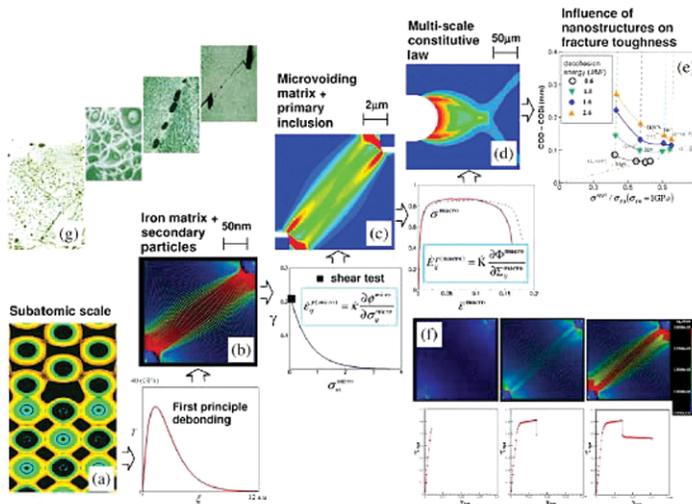


그림 9. Northwestern 대학의 Cybersteel project^[31]

5. 향후 발전 전망

Ab initio 방법은 실험 데이터와의 fitting 과정을 요구하지 않는 완전한 해석 방법이지만, 너무 많은 해석 시간과 해석 비용을 필요로 때문에 나노 구조물과 같이 수천만 개 이상의 원자나 분자를 포함하는 대상에는 적절하지 못하다. 앞으로 컴퓨터의 성능이 계속 발전하더라도 나노 구조물을 ab initio 방법만으로 해석하는 것은 당분간 어려울 것으로 보인다.

이러한 이유로 나노 구조물 해석에 관련된 향후 발전 방향은 크게 두 가지로 생각해 볼 수 있다.

첫째는 시간과 길이 스케일 간의 차이를 연결하는 알고리즘(bridging time and length scale)을 개발하는 것이다. 즉, 스케일 별로 고유한 principle을 적용하여 수치적으로 해석하고, 스케일과 스케일의 경계영역(interface region or handshaking region or space sharing)에서는 각각의 해석 결과를 연결하는 수치적인 기법을 개발하는 것이다. 현재 활발하게 연구되고 있는 scale bridging 모델로는 다음과 같은 것들이 있다. 먼저 Mathematical homogenization(or up-scaling) 방법은 2가지 이상의 스케일에 관련된 문제에서 보다 coarse 한 스케일의 결과를 얻고자 할 때, fine 한 스케일의 결과를 실제로 계산하지 않고 coarse 한 스케일의 결과를 얻는 방법이다. 이 방법의 장점은 정확도(accuracy)와 효율(efficiency) 사이의 trade-off 관계를 명확히 알 수 있다는 점이다. Space sharing 방법은 앞서 간단하게 언급된 균열 문제가 그 예가 된다. 균열 선단에서는 양자역학적인 계산을 수행하고, 균열 선단에서 조금 떨어진 영역에서는 분자동역학을 사용하며, 균열 선단에서 충분히 떨어진 곳에서는 선형 탄성 이론에 근거한 유한 요소 해석을 사용한다. 이 방법은 기존에 개발된 방법들을 조합함으로써 비교적 쉽게 구현할 수 있는 장점이 있는 반면에, 수학적 엄밀성이 부족한 경우가 많으므로 스케일 간의 경계에서 보존되는 물리량을 주의 깊게 살펴볼 필요가 있다. 이외에도 space sharing과 유사한 time sharing 방법과 orthogonal decomposition이나 principal component analysis 등이 있다.

두 번째 발전 방향으로는, 이러한 scale bridging 알고리즘과 별도로 보다 빠른 알고리즘을 개발하는 것이다. 예로서 일반적인 ab initio 계산은 원자 개수의 3제곱에 비례하여 계산량이 늘어나지만, fast Fourier Transform을 사용하는 새로운 알고리즘은 $N^2 \log N$ 또는 $N \log N$ 에 비례하는 계산량을 가진다. 또한 새로 개발된 시간 적분(time integration) 알고리즘을 이용한 분자동역학 코드는 기존의 분자동역학 코드에 비하여 보다 긴 시간에 일어나는 현상을 모사할 수 있다. 이러한 알고리즘 개발은 ab initio 방법, ab initio 분자동역학 방법, Monte Carlo 방법, Kinetic Monte Carlo 방법 등에서 활발히 이루어지고 있으며, 이외는 별도로 계산 결과의 분석 및 Visualization에 관련된 알고리즘도 활발히 개발되고 있다.

❁ 참고 문헌

- [1] NSTC, 2000, National nanotechnology initiative.
- [2] McCurdy, C.W., Stechel, E., Cummings, P., Hendrickson, B. and Keyes, D., 2002, Theory and modeling in nanoscience, Report of the workshop.
- [3] Wegner, G., 2000, European white book on fundamental research in materials science, Max-Planck Institute.
- [4] Westmoreland, P.R., Kollman, P.A., Chaka, A.M., Cummings, P.T., Morokuma, K., Neurock, M., Stechel, E.B. and Vashishta, P., 2002, Application of molecular and materials modeling, WTEC Panel report.
- [5] Vitek, V., 2002, Atomistic modeling of structures and properties of materials, Lecture note (Univ. of Pennsylvania).
- [6] Ghoniem, N.M. and Cho, K., 2000, The emerging role of multiscale modeling in nano- and micro-mechanics of materials, Report of the Symposium on Multiscale Modeling, Los Angeles.
- [7] Gaudoin, R. and Foulkes, W.M.C., 2002, Ab initio calculations of bulk moduli and comparison with

- experiment, *Physical Review B* 66, 052104.
- [8] Masuda-Jindo, K., Menon, M., Subbaswamy, K.R. and Aoki, M., 1999, Atomistic simulation of lattice defects in nano-scale semiconductors: minimal-basis TBMD method, *Computational Materials Science* 14, pp. 203–208.
- [9] 장현주와 엄윤용, 2002, 나노 소재의 전산모사, *대한기계학회 기계저널* 42, pp. 35–41.
- [10] Nieminen, R.M., 2002, From atomistic simulation towards multiscale modeling of materials, *Journal of Physics: Condensed matter* 14, pp. 2859–2876.
- [11] Car, R. and Parrinello, M., 1985, Unified approach for molecular dynamics and density functional theory, *Physical Review Letters* 55, pp. 2471–2474.
- [12] Tadmor, E.B., Ortiz, M., and Phillips, R., 1996, Quasicontinuum analysis of defects in solids, *Philosophical Magazine* A73, pp. 1529–1563.
- [13] Ortiz, M., Cuitino, A.M., Knap, J. and Koslowski, M., 2001, Mixed atomistic-continuum models of material behavior: the art of transcending atomistics and informing continua, *MRS Bulletin* 26, pp. 216–221.
- [14] Shenoy, V.B., Miller, R., Tadmor, E.B., Rodney, D., Phillips, R. and Ortiz, M., 1999, An adaptive finite element approach to atomic-scale mechanics—the quasicontinuum method, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47, pp. 611–642.
- [15] Shilkrot, L.E., Curtin, W.A. and Miller, R.E., 2002, A coupled atomistic/continuum model of defects in solids, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 50, pp. 2085–2106.
- [16] Rudd, R.E. and Broughton, J.Q., 1998, Coarse-grained molecular dynamics and the atomic limit of finite elements, *Physical Review B* 58, pp. 5893–5896.
- [17] Rudd, R.E., 2002, Coarse-grained molecular dynamics and multiscale modeling of NEMS resonators, *Computational Nanoscience and Nanotechnology 2002*(www.cr.org), pp. 173–176.
- [18] Curtarolo, S. and Ceder, G., 2002, Dynamics of an inhomogeneously coarse grained multiscale system, *Physical Review Letters* 88, 255504.
- [19] Succi, S., 1997, Lattice Boltzmann equation: failure or success?, *Physica A* 240, pp. 221–228.
- [20] Miller, W., 2001, The lattice Boltzmann method: a new tool for numerical simulation of the interaction of growth kinetics and melt flow, *Journal of Crystal Growth* 230, pp. 263–269.
- [21] NIST LB, <http://math.nist.gov/mcsd/savg/parallel/lb/index.html>
- [22] NIST QDPD, <http://math.nist.gov/mcsd/savg/parallel/dpd/#id107912>
- [23] Willemsen, S.M., Vlugt, T.J.H., Hoefsloot, H.C.J., and Smit, B., 1998, Combining dissipative particle dynamics and Monte Carlo techniques, *Journal of Computational Physics* 147, pp. 507–517.
- [24] 이희정, 2002, 일본의 나노기술 현황 : Atom Technology project, 한국과학기술정보연구원 해외교포활용 활성화 과제 보고서.
- [25] Abraham, F.F., Brodbeck, D., Rudge, W.E. and Xu, X., 1997, A molecular dynamics investigation of

rapid fracture mechanics, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 45, pp. 1595–1619.

[26] Abraham, F.F. and Gao, H., 2000, How fast can cracks propagate? Physical Review Letters 84, pp. 3113–3116.

[27] Abraham, F.F., 2001, The atomic dynamics of fracture, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 49, pp. 2095–2111.

[28] http://www.almaden.ibm.com/st/computational_science/msmp/fractures/

[29] OCTA AMUSE, OCTA application report: AMUSE, <http://octa.jp>

[30] <http://www.tc.cornell.edu/Research/CompMatSci/Multiscale/>

[31] Liu, W.K., Hao, S., Vernerey, F.J., Kadowaki, H., Park, H., and Qian, D., 2003, Multiscale analysis and design in heterogeneous systems, VII Inter. Conf. Comp. Plasticity.

[32] Aoyagi, T., Sawa, F., Shoji, T., Fukunaga, H., Takimoto, J-I, and Doi, Masao, 2002, A general-purpose coarse-grained molecular dynamics program, Computer Physics Communications 145, pp. 267–279.

[33] Knap, J. and Ortiz, M., An analysis of the quasicontinuum method, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 49, pp. 1899–1923.

[34] Miller, R., Ortiz, M., Phillips, R., Shenoy, V. and Tadmor, E.B., 1998, Quasicontinuum models of fracture and plasticity, Engineering Fracture Mechanics 61, pp. 427–444.



김 재 현

- 한국기계연구원 구조연구부 선임연구원
- 관심분야 : 나노 구조물의 해석, 설계 및 측정 기술 개발
- E-mail : jaehkim@kimm.re.kr



김 정 엽

- 한국기계연구원 구조연구부 선임연구원
- 관심분야 : 나노 구조물의 해석, 설계 및 측정 기술 개발
- E-mail : jkim@kimm.re.kr



최 병 익

- 한국기계연구원 구조연구부 책임연구원
- 관심분야 : 미소 구조물의 다중스케일/다중 물리 해석 및 설계 기술 개발
- E-mail : choibi@kimm.re.kr