

나노 스케일 현상 해석을 위한 시뮬레이션 기법

Nano-scale Simulation Techniques



조 맹 효*



이 승 윤**



강 신 규***



최 광 석***

*서울대학교 기계항공공학부 부교수
**서울대학교 기계항공공학부 박사과정
***서울대학교 기계항공공학부 석사과정

1. 서 론

최근 나노 기술과 바이오 기술들이 각광을 받으면서 나노 스케일에서의 현상을 해석하기 위한 노력들이 국내외적으로 많은 관심을 끌고 있다. 기존의 유한요소를 비롯한 전산 역학에 관심을 기울였던 연구자들은 나노-마이크로-메트로 스케일로 연계되는 멀티스케일 해석에 너도 나도 앞을 다투고 뛰어들고 있고, 멀티스케일 모델링에 대한 새로운 저널이 발간되는 등, 이 분야의 수요가 커지고 있다. 이제 multi-scale, multi-physics라는 용어는 새로 듣는 참신한 키워드가 아닐 정도로 흔히 들을 수 있는 상투어가 되어 가고 있다.

나노 스케일에서 관심을 가지는 나노 기술은 재료공학(또는 재료학), 화학공학, 물리학, 화학, 생물학 등에서는 새로 태동되는 분야는 아니다. 이런 학문 분류에 해당하는 전공들에서는 오래 전부터 이 분야에 대해 가르치고 배우고 연구해 왔다. 다만 최근 '나노'라는 이름으로 다시 키워드를 바꾸어 연구가 진행되고 있는 것이다.

요즘 나노/바이오 기술이 국가의 핵심역량 기술로 자리매김 하면서 국가적으로 대대적인 연구투자 와 지원이 이루어지고 있다. 이러한 시기에 우리 전산구조공학회의 '전산구조'의 관점에서 바라본다면 나노 스케일 해석, 멀티스케일 해석 등이 가지는 의미와 그 학문적 위치는 어떤 것

인가? 저자의 제한된 정보와 짧은 지식으로 이러한 문제에 대해 의미 있는 답을 하기는 쉽지 않겠지만 '구조/고체역학'이라는 테두리 안에서 그 의미에 대해 생각해 보고자 한다.

나노 스케일 기술에 관련된 연구/개발을 한다고 하면 주로 나노 사이즈 또는 마이크로 사이즈 정도의 입자, 패턴, 소자, 시스템을 가공, 성형, 측정, 해석, 설계하는 것이라고 생각해 볼 수 있다. 이중 기존의 학문 분류에 의한 재료, 화공, 물리, 화학 등에서는 가공, 성형, 측정 등에 대해 주로 연구할 것이고 가공과 성형을 위해서 또는 나노/마이크로 현상의 이해를 위해서 해석을 수행해 왔으리라 생각할 수 있다. 일단 '전산구조'에서는 컴퓨터를 사용하는 시뮬레이션을 기반으로 하므로 나노 기술과 관련해서도 해석, 설계와 관련하는 것이 가장 자연스럽게 접근하는 방법이다. 분자 동역학(MD), 몬테칼로 시뮬레이션 등이 나노 스케일에서 수행되는 전산모사 방법이다. 분자동역학은 나노 스케일의 분자, 원자간의 현상을 모사하는 일종의 표준 수치 방법이라 불리도 무방할 것이다. 물론 전산모사 시간의 한계, 대용량의 전산 자원이 요구되는 점 등 많은 문제점을 가지고 있으나 이 방법 이외에 대안은 없어 보인다. 물리, 화학 분야에서 분자 동역학 모사는 오래 전부터 수행되어 오던 분야이며, 이 분야의 전문가 층은 무척 두터운 편이라 할 수 있다. 특히 화학, 물리 분야에서는 양자

레벨에서부터의 전산 모사에 관심이 많아 ab initio 또는 first principle이라고 불리는 분자 동역학 시뮬레이션에 관심이 많다고 할 수 있다.

양자 수준에서부터 고전 분자 동역학이 적용되는 스케일이 물리, 화학 전공자들이 주로 관심을 가지는 territory라고 한다면 고전 분자 동역학이 적용되는 스케일에서부터 연속체 스케일까지는 우리 전산구조공학자의 영역이라고 할 수 있겠다. 여기서 물론 수 나노 스케일($10^{-9} \sim 10^{-8}$ m)정도는 중간 지대라서 누구나 관심을 가질 수 있는 영역이라고 할 수 있다. 이 스케일에서 아래로 내려가는 멀티스케일에서는 물리, 화학전공자들이 주로 관심을 가지고 영역을 개발하고 있고, 나노 스케일에서 더 큰 스케일로 올라가는 멀티스케일 영역은 현재 물리, 화학 전공자들과 기계/토목 분야의 연속체 전공자들이 관심을 다 가지고 있는 것 같다. 고체/구조 전공자들이 나노 스케일의 현상을 이해하고 연구하기 위해서는 양자역학, 통계 열역학, Lattice dynamics 등에 대한 이해가 추가적으로 필요할 것이고, 수치적인 방법으로는 분자동역학(Molecular dynamics)에 대한 이해가 필요할 것이다. 물리나 화학 전공자가 나노에서 연속체로 올라가는 멀티스케일 해석에 관심이 있다면 연속체 역학과 유한요소법(FEM)에 대한 이해가 필요할 것이다.

우리가 양자 역학을 열심히 공부한 후 나노 스케일 보다 더 작은 스케일에서 연구를 한다 하더라도 말릴 사람은 없을 것이다. 하지만, 연구 영역에서 우위를 점하거나 보편적으로 관심을 가질 수 있는 연구 결과를 도출하기 위해서는, 나노 스케일로부터 출발하여 그 보다 큰 마이크로, 연속체 스케일까지를 연구하여, 결국 연속체 스케일에서 나노 스케일의 기술을 이용한 의미있는 결과를 도출하는 것이 필요하다고 생각한다. 이것이 아마 전산구조역학 전공자로서 우리가 바라보는 나노 기술, 멀티스케일 기술이 될 것이고 전산구조 역학자의 자리에서 의미를 가지는 것이 아닌가 생각한다

이러한 분야 중 하나가 구조재료 분야이다. 구조분야와 가장 밀접하게 연결되는 분야이며 연속체의 구성방정식을 이론적으로 제공해 줄 수 있는 창구 역할을 해 줄 수 있는 분야이다. 현재 대부분 연속체의 구성방정식은 현상학적인 단순 시험(주로 인장 시험)에 의해서 물성은 기본적으로 원자의 거동과 관계가 있지만, 연속체 역학에서 나노 스케일 메커니즘을파해가는 수단은 현상학적인 재료 거동의 시험을 통해 구성방정식을구축하는 것이다

분자동역학과 연속체 유한요소법의 결합에 의해 damage,

fracture, dislocation, decohesion, phase transform 등 다양한 재료 거동이 원자 수준에서부터 시뮬레이션이 될 것이며, 멀티스케일 해석을 통해 연속체 구성방정식이 보다 세밀하게 구성될 것이라 기대한다. 재료와 구조를 연결하는 이러한 노력은 궁극적으로 재료 설계와 구조 설계가 한 틀 안에서 어우러질 수 있도록 관점을 변화시켜 줄 것이다. 이런 관점에서 저자와 연구실의 대학원생들은 분자 동역학과 연속체 역학을 연결하려는 시도와 나노에서 연속체까지의 스케일을 순차적으로 연결하여 재료의 거동을 규명하려는 연구를 진행하고 있다.

이미 나노, 멀티스케일 분야에 대한 review 논문들은 다양하게 발표되었으므로,^{1)~4)} 본 기사에서는 전체 분야에 대한 개요는 생략하고 저자와 저자의 연구실에서 수행하고 있는 연구 내용을 중심으로 나노 해석 기법, 멀티스케일 해석 기법을 소개한다.

2. 분자동역학 시뮬레이션 기법

최근 수십 년에 걸친 나노 취성파괴 등과 같은 나노 스케일에서의 역학적 특성을 해석함에 한계를 드러낸다. 따라서 나노 스케일에서의 미소 크기 나노 구조물의 역학적 특성을 해석하기 위해서는 원자간 상호작용을 이산화된 기법으로 모델링하고 개별원자의 운동을 기술할 수 있는 새로운 전산모사 기법이 요구된다. 원자 수준의 전산모사 기법에는 몬테카를로(MC)법과 분자동역학(MD)이 있다. 몬테카를로법이 통계적이고 확률적인 방식을 통해 재료의 특성을 해석하는 접근방법이라 한다면 분자동역학은 결정론적(deterministic)방법으로서 분자 간의 상호작용 포텐셜로 인한 분자의 동역학적인 거동을 예측하여 전 시스템에 대한 특성을 파악하는 접근방법이다.⁵⁾ 하지만 물질을 이루는 전체 원자개수에 대한 전산모사는 현재 컴퓨터 성능상 불가능하며 컴퓨터 전산모사로 수행 할 수 있는 원자 개수에는 제한이 있다. 이에 동일한 거시적 성질을 공유하는 수많은 시스템의 집합체인 앙상블에 대해 전산모사를 수행한다. 앙상블 전산모사는 거시계의 성질을 예측함에 있어 앙상블을 이루는 하나의 시스템에 대한 충분히 긴 시간 동안의 시간 평균이 앙상블의 평균이 된다는 에르고딕(ergodic)가설을 가정한다. 이를 통해 수백 내지는 수천 개의 원자에 대해 전산모사를 수행하여 전체 시스템에 대한 거시적 성질을 예측 할 수 있다.

2.1 앙상블 시뮬레이션

분자동역학은 원자간의 운동이 상호작용 포텐셜에 의해 영향을 받을 때, 뉴턴역학으로 정의되는 원자의 운동방정식을 시간적분을 수행하여 시스템의 특성을 파악하는 원자 수준의 전산모사 기법이다. 이 기법은 1950년 후반 Adler와 Wainwright에 의해 처음 제안된 이래 현재까지 다양한 기법으로 발전해 오고 있으며, Nosé, Nosé-Hoover,^{6)~8)} Nosé-Poincare의 정온법,⁹⁾ Anderson,¹⁰⁾ Parrinello와 Rahman의 정압법^{11),12)} 및 Souza and Martins,¹³⁾ Hernandez의 정응력법¹⁴⁾ 등이 개발되었다.

한편 원자간의 상호작용 포텐셜은 분자동역학 전산모사에 사용되는 원자 결합에 따라 달리 사용 되어진다. 불활성 기체에는 Lennard-Jones포텐셜, 금속결합을 이루는 원자에는 EAM(Embedded Atomic Method) 포텐셜, 공유결합을 이루는 원자에는 Tersoff 포텐셜을 사용한다. 또한 폴리머 재료에 대해서는 bond 포텐셜과 non-bond 포텐셜을 결합한 형태의 포텐셜이 사용된다.

분자동역학 전산모사를 통한 연구들은 다양한 분야에서 진행되고 있다. 그림 1은 K. Eric Drexler에 의해 설계된 나노 스케일의 나노 기계들이다. 이들 기계류는 분자모터, 분자펌프, 기어, 베어링에 관한 것으로 이러한 나노 기계들에 의해 나노 스케일에서의 동력전달을 수행할 수 있다.¹⁵⁾

재료 균열의 전진에 따른 파괴 현상을 해석하는 문제는 연속체 역학에서도 연구대상이지만 균열이 발생하는 지점에서의 응력분포와 그에 따른 원자간의 결합과 파괴 현상은 연속체 역학만으로 해석하기에는 어려움이 있다. 분자동역학을 통해 이에 대한 해석을 수행하는 많은 연구가 진행되고 있다. 그림 2와 그림 3과 같이 재료의 균열에 따른 거동 특성 파악을 위해 분자 동역학을 이용하였다. 균열이 전파되

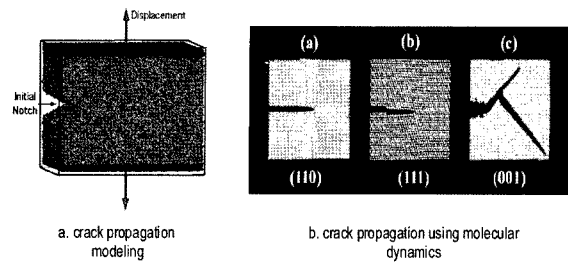


그림 2 분자동역학을 통한 노치에서의 균열 전진해석¹⁶⁾

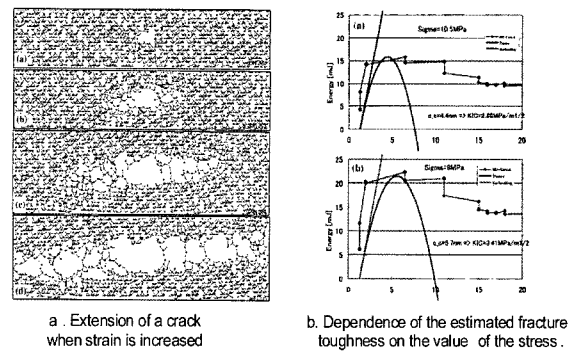


그림 3 분자동역학을 통한 사파이어 재료의 파괴 거칠기¹⁷⁾

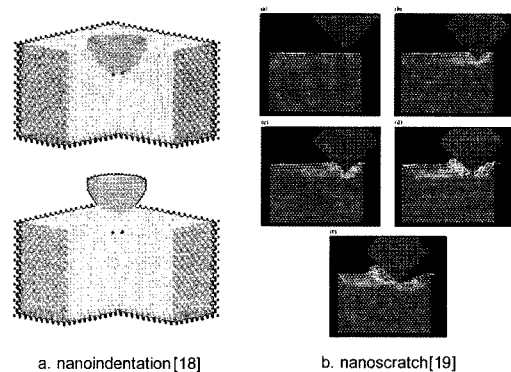


그림 4 나노 압입 및 나노 끌기

는 과정에서의 응력이 집중되는 영역 및 소성변형이 일어나는 부분 및 균열의 전파 속도 등의 결과를 얻어 낼 수 있다.

나노재료의 역학적 특성을 파악하기 위한 방법으로 분자동역학을 이용한 나노 압입과 나노 끌기가 이용된다(그림 4). 이러한 전산모사는 재료 내 결합 발생 및 거동을 가시화 할 수 있으며, 단결정내의 초기 소성 변형의 발생을 좀더 구체적으로 이해하는데 도움이 된다.

한편 분자동역학을 통해 재료의 역학적 특성(열팽창계수, 탄성계수, 포아송비 등)를 파악하는 연구가 진행되고 있다. 그림 5는 나노 와이어에 대한 응력/변위곡선 산출을 통한 재료의 역학적 특성을 파악하기 위해 분자동역학을 수행한 내용이다.

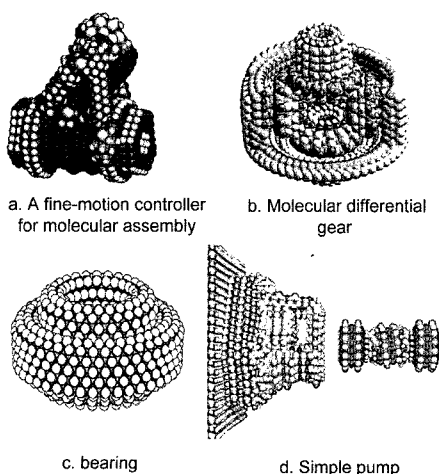


그림 1 분자동역학을 이용한 나노 기계

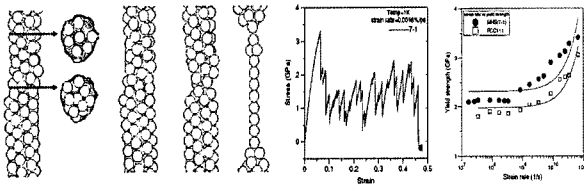


그림 5 분자동역학을 통한 나노 와이어의 응력/변위 곡선 및 항복응력 곡선²⁰⁾

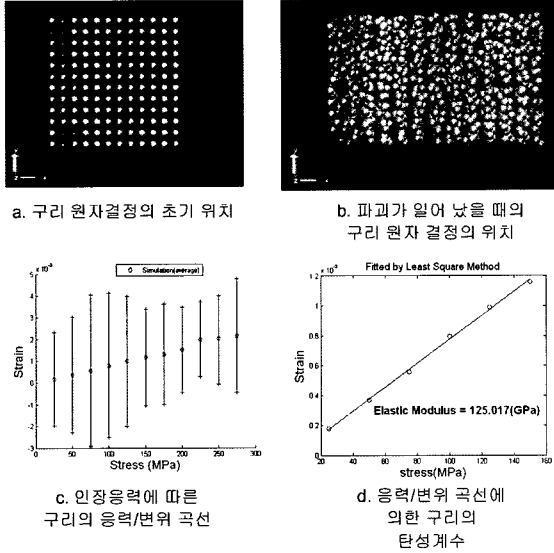


그림 6 Fully flexible cell 전산모사 기법을 이용한 구리의 인장응력 실험

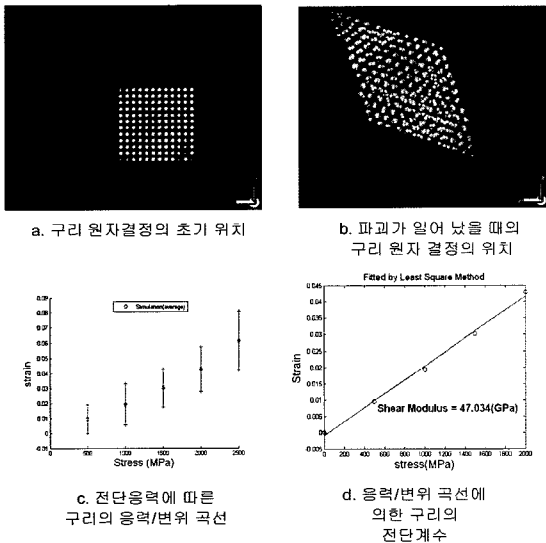


그림 7 Fully flexible cell 전산모사 기법을 이용한 구리의 전단응력 실험

또한, 본 연구실에서는 나노 스케일에서의 일반적인 환경에 적용 가능한 Fully flexible cell 분자동역학 전산모사

기법을 구축하였다. 이는 일정 온도와 일정 압력 하에서 진행되는 기체 및 액체의 NPT 앙상블 시뮬레이션뿐만 아니라, 고체 결정에 대한 앙상블 전산모사가 가능한 기법이다. 특히 외부의 일정 온도 조건에서 응력이 가해지는 경우에 있어서 고체 결정구조의 변형 형상을 관찰할 수 있다는 장점이 있다. 이는 나노 스케일에서의 결정구조의 변화 및 재료의 물성치를 해석할 수 있는 시뮬레이션 기법이다. 본 분자동역학 전산모사를 통해 구리의 물성치를 파악하였다. 그림 6과 그림 7은 Fully flexible cell 시뮬레이션의 한 예로서 그림 6은 [100] 방향의 인장 응력에 따른 각 방향의 격자 길이 변화 및 응력/변위 곡선을 보여주며, 이를 통해 탄성계수를 구하였다. 그림 7은 전단응력에 대한 격자 각 변화 및 응력/변위 곡선을 보여준다. 구리원자에 대해 Fully flexible cell 시뮬레이션을 수행한 결과는 표 1과 같다. 또한 박막 구조물의 경우 탄성계수가 줄어드는 것이 일반적인 경향이며, 이때의 박막구조물에 대한 역학적 특성에 대한 연구 또한 진행되고 있다.

표 1 Fully flexible cell 전산모사 기법을 이용한 구리의 물성치

Failure stress (MPa)	Poisson's ratio	Young's modulus (GPa)	Shear modulus (GPa)	Thermal expansion coefficient ($10^{-5} K^{-1}$)
275	0.294	125.017	47.034	8.11

2.2 시간 적분 기법

분자동역학 문제는 상미분방정식의 형태로 주어진다. 따라서 분자 동역학 전산모사에 대한 해의 정확성과 신뢰도는 상미분방정식을 해석하기 위한 수치적분 방법에 따라 결정된다. 해밀토니안 방정식으로 주어지는 분자동역학 문제는 적분방법의 선택에 있어서 심플렉틱(symplectic) 조건을 만족 하는가 판단해 봐야 한다. 심플렉틱 조건은 수치 적분 방법이 해밀토니안 값을 유지하도록 하는 조건이며, 이러한 수치 적분법으로는 Verlet, leap frog 등이 분자동역학 해석을 위해 주로 사용 되어지고 있다. 위의 두 방법들은 해의 정확성이 떨어지는 방법이기 때문에 작은 시간 간격에서 적분을 수행할 때 그 해의 신뢰성이 보장된다. 이는 결과를 도출해내기 위하여 많은 시간이 필요하다는 것을 의미하며, 뿐만 아니라 멀티 스케일 해석분야에서도 MD영역과 FE영역간의 시간 스케일을 크게 함으로서 해석에 큰 걸림돌이 되고 있다. 이러한 문제를 해결하기 위하여 다소 큰 시간 간격에서도 높은 정확성을 유지하는 적분법을 필요로 하게 되었으며, 높은 정확도를 가지는

Runge-Kutta(RK)계열의 적분법에 대한 연구가 활발하게 이루어졌다.²¹⁾ 오실레이션 문제에 대한 해의 정확도를 높이고자 지수근사에 대한 연구가 이루어졌으며,^{22,23)} 헤밀토니안 값을 유지시키기 위하여 심플렉틱 조건을 부여하는 연구가 진행 되었다.^{24,25)} 이러한 연구들 중 T. E. Simos는 심플렉틱 조건과 지수 근사 조건을 동시에 만족하도록 하는 2차의 Runge-Kutta-Nyström방법을 소개하여 헤밀토니안 문제를 낮은 차수에서도 비교적 정확하고, 안정성을 가지는 적분법을 소개하였다.²⁶⁾

본 연구실에서는 4차의 심플렉틱 지수근사 Runge-Kutta-Nyström적분법을 구축하였으며, 다음 세가지 적분법으로 NVE 앙상블에 대하여 연구를 진행 중에 있다.

- RKN : Runge-Kutta-Nyström방법
- EFRKN : 지수 근사 Runge-Kutta-Nyström (FSAL) 방법²⁷⁾
- SEFRKN4 : 4차 심플렉틱 지수근사 Runge-Kutta-Nyström 방법

423개의 아르곤 원자를 초기 온도 70K와 100K 두 조건에서 전산모사 하였으며, 아르곤 원자 사이의 포텐셜은 LJ 포텐셜을 사용하였다. 적분 시간간격 h 는 $2^i fs (i=0,1,...,6)$ 로 총 7개의 고정된 시간에 대하여 0ps부터 128ps까지 수행하였다.

그림 8에서 보여지듯이 적분시간 간격이 1fs로 작은 경우에는 RKN 방법과 EFRKN, SEFRKN4 방법들이 헤밀

토니안 값을 비슷하게 제공한다. 그러나 시간 간격이 2fs가 되면, RKN은 헤밀토니안의 평균값에서 오차가 나타나기 시작하며, RKN과 EFRKN의 헤밀토니안의 요동의 주기와 진폭이 점점 크게 나타나는 것을 알 수 있다. 적분시간 간격이 8fs로 커지면, EFRKN은 헤밀토니안의 평균값은 SEFRKN4 방법과 비슷하나 요동이 매우 심하게 나타나서 해의 정확도가 급격히 떨어지는 것을 알 수 있다. 적분시간 간격이 32fs초로 매우 크게 되면, SEFRKN4만 헤밀토니안의 앙상블 평균값과 요동을 적절히 나타냄을 알 수 있다. 예제에서 확인하였듯이 지수함수 근사를 수행한 수치 기법이 그렇지 않은 방법보다 비교적 큰 시간적분에 대해서도 안정적이며, 시간적분 간격이 큰 경우에도 심플렉틱 조건을 만족하고 지수근사를 동시에 만족하면 다른 방법에 비해 훨씬 안정적인 결과를 제공한다. 큰 시간간격으로 적분을 수행함에 있어서 분자의 진동수를 고려해야 하는 제약이 있지만, 헤밀토니안을 만족하는 범위에서의 적분은 해석에 필요한 시간을 줄이고, 멀티스케일 분야에서의 시간 스케일을 줄일 수 있을 것이다.

3. 멀티스케일 해석 기법

나노 전산모사 영역은 현재의 컴퓨터 성능과 용량에 의해 크게 제약받고 있다. 또한 나노 시스템을 지지하거나 나노 시스템과 연결되어 있는 연속체를 적절히 모델링

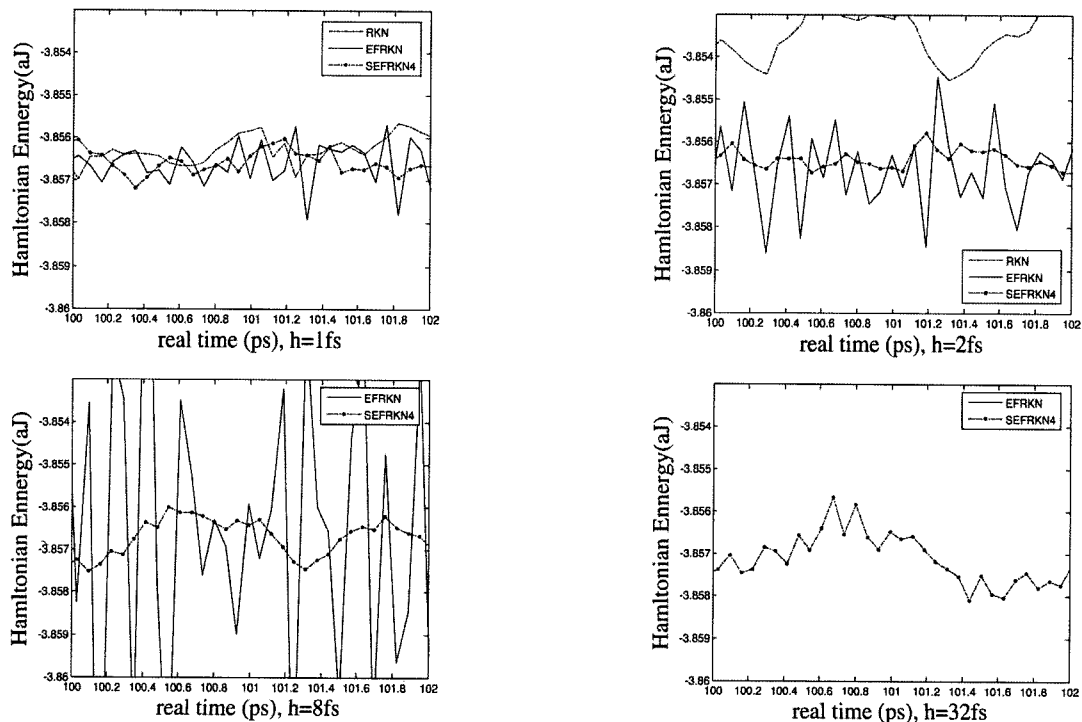


그림 8 적분 시간간격 1fs, 2fs, 8fs, 32fs 에서의 헤밀토니안 에너지, $100ps \leq t \leq 102ps$

해야만 정확한 전산모사가 가능한 경우도 드물지 않다. 하지만, 기존의 연속체 모델링만으로는 정확한 나노 전산모사가 보장되지 않기 때문에, 이러한 문제점을 체계적으로 극복할 수 있는 방법으로 제시된 것이 멀티스케일 해석 기법이다. 멀티스케일 해석 모델을 개발하는 데 있어 중요하게 다루어지고 있는 문제 중 하나가 MD영역과 FE영역 사이의 경계면에서의 원하지 않는 wave반사이다. MD영역에서 전파되어 오는 wave에 대해 연속체 모델은 rigid body와 같은 역할을 하기 때문에, 높은 주파수의 wave들은 반사되어 MD영역으로 다시 전파되어 MD영역에서 local heat을 발생시키게 되고, 이는 전체 시뮬레이션 결과를 망가트리는 결과를 낳게 된다. 또 다른 중요한 문제는 MD시뮬레이션에 적합하도록 시간 스케일을 확장하는 문제이다. 전체 계산 영역에서 극히 일부분만을 MD 영역으로 제한함으로써 이 문제를 해결하고자 하는 시도들이 있으나, 여전히 이 문제는 멀티스케일 해석 기법 개발에 있어 걸림돌이 되고 있다. 이러한 문제를 해결하기 위한 다양한 연구들이 진행 중이다. 대표적인 연구의 예를 A. F. Voter 등이 제안한 연구에서 찾아볼 수 있다.^{28),29)}

멀티스케일 해석 모델링에서의 선구적인 연구가 F. F. Abraham에 의해 제시되었다. Abraham은 FE(finite element)/MD(molecular dynamics)/TB(tight binding)를 동시적으로(concurrently) 연결한 MAAD(macroscopic, atomistic, ab initio dynamics) 방법을 제시하였다.³⁰⁾ 동시적으로 연결하였다는 말은, 각 스케일 모델에서의 정보가 양방향으로 전달된다는 것을 의미하기도 한다. 이 연구에서는 FE 격자가 MD시뮬레이션으로 다루어지는 영역에서의 원자 간격의 order 수준까지 줄여진다. 마지막으로 물리적으로 중요한 영역인 균열 끝단(crack tip)에서는 원자간 결합의 파단 과정을 시뮬레이션하기 위해 TB모델이 사용되었다. FE격자를 원자 간격 order 수준까지 줄이는 시도는 MD/FE 경계면에서 발생하는 원하지 않는 wave반사 문제를 없애기 위한 최초의 시도이다. 점차적으로 증가하는 FE격자 크기가 MD영역으로 되반사되는 wave의 양을 줄인다는 원리이다. 하지만, 격자 크기가 줄어들수록 생기는 수치적인 문제와 물리적인 문제가 발생하였다. 수치적인 문제는, FE시뮬레이션에서의 시간 간격이 가장 작은 격자 크기에 의해 결정된다는 것이다. 따라서, 너무나 많은 시간이 소모되는 문제점을 보였다. 또한 연속체 영역에서 관심이 있는 변수들이 원자 시뮬레이션 변수들과 같은 시간 스케일로 변해간다는 것은 매우 물리적 개념과 맞지 않아 보인다.

Abraham의 MAAD방법론과 관련이 있는 연구가 R. E. Rudd와 J.Q. Broughton에 의해 제시된 coarse-grained 분자동역학(CGMD)이다.³¹⁾ 이 방법론은 MAAD 방법론에서 TB방법을 없애고, 대신 FE와 MD를 커플링(coupling)한 방법이다. CGMD에서의 기본적인 개념은, 정확한 원자 에너지로 수렴하는 coarse graining된 에너지 근사가 운동의 지배방정식을 유도하는 데에 사용된다는 것이다. Coarse graining된 에너지는 다음과 같이 정의된다.

$$E(\vec{u}_k, \dot{\vec{u}}_k) = U_{int} + \frac{1}{2} \sum_{j,k} (M_{jk} \dot{\vec{u}}_j \cdot \dot{\vec{u}}_k + \vec{u}_j \cdot K_{jk} \cdot \vec{u}_k) \quad (1)$$

윗 식에서, U_{int} 는 내부에너지로서, $3(N-N_{node})kT$ 로 정의되며, 합 기호(\sum) 안의 첫 번째 항은 운동에너지이고, 두 번째 항은 포텐셜 에너지를 나타낸다. \vec{u} 는 변위 자유도이며, $\dot{\vec{u}}$ 는 그 속도를 의미한다. 내부에너지는 전체 시스템에서 제거된 자유도들의 열에너지를 나타낸다. 절점의 개수가 원자의 개수에 접근함에 따라 이 항은 사라지게 되고 전체 원자 에너지가 복원됨을 알 수 있다. 강성 행렬 K_{jk} 와 질량 행렬 M_{jk} 는 유한요소법에서의 형상함수와 비슷한 가중 함수를 사용하여 계산된다. 따라서, CGMD는 관심있는 영역에서 MD원자 간격 수준까지 줄여진 FE 격자의 거동을 모사하고, 그 영역에서 멀리 떨어진 영역에서 흡성된 격자가 짜여진다. 즉, CGMD 또한 MAAD방법과 같은 문제점을 안고 있다.

R.E. Rudd의 또 다른 논문³²⁾에서는 CGMD 정식화 과정에 dissipative Langevin dynamics³³⁾가 도입되었다. 그 운동 방정식은 다음과 같다.

$$M_{ij} \ddot{u}_j = -G_{ik}^{-1} u_k + \int_{-\infty}^t \eta_{ik}(t-\tau) \dot{u}_k(\tau) d\tau + F_i(t) \quad (2)$$

여기서, G_{ik} 는 강성과 비슷한 물리량이며, η_{ik} 는 time history 혹은 memory function이고, $F_i(t)$ 는 랜덤한 힘이다. 두 번째 항의 추가는 확실히, CGMD방법론에서는 격자의 coarse graining에 따라 원하지 않는 wave반사가 일어난다는 것을 의미한다.

잘 알려진 준정적(quasistatic) 멀티스케일 방법으로서, E.B. Tadmor 및 그의 공동연구자들에 의해 제안된 준연속체 방법(quasicontinuum method)이 있다.³⁴⁾ 준연속체 방법을 개선한 연구들이 R.E. Miller 등³⁵⁾과 Knap과 M. Ortiz³⁶⁾에 의해 제안되었고, 이 방법론의 개발 과정 및 최

근 연구 동향에 초점을 맞춘 review 논문이 Miller와 Tadmor에 의해 제공되었다.³⁷⁾ 준연속체 방법은 본질적으로 적응(adaptive) 유한요소법이며,³⁸⁾ 원자 모델링과 연속체 모델링 사이의 연결 고리가 되는 것이 Cauchy-Born법칙이다. Cauchy-born법칙은 연속체 에너지 밀도 함수 W 가 변형 구배(deformation gradient)에 의해 원자 포텐셜로부터 직접 계산할 수 있다는 것을 가정한다. Cauchy-Born 법칙의 주요한 제약 조건 중 하나가 그 변형장이 균질(homogeneous)해야 한다는 것이다. 이러한 제약은 원자 시스템의 격자 벡터가 연속체에서 정의되는 변형 구배에 의해 변형되기 때문이다.

적응도(adaptivity)의 기준으로는, 변형 구배가 큰 일부 영역은 원자 스케일의 분해능에 의해 모델링되고, 변형 구배가 크지 않은 대부분의 영역에서는 큰 격자에 의해 모델링한다는 것이다. 이러한 준연속체 방법은 주로 나노인덴테이션(nanoindentation), 원자 스케일 파단(fracture), 입자 경계(grain boundary) 상호작용 등과 같은 준정적인 문제에 주로 적용되어 왔다.^{39~42)} 최근에는 Vivek Shenoy 등에 의해 온도 효과를 고려한 준연속체 몬테카를로 및 준연속체 자유 에너지 최소화법이 제안되었다.⁴³⁾

최근에는, 새로운 준정적 결합 모델 기법으로서 CADD (coupled atomistic and discrete dislocation) 방법이 L. E. Shilkrot 등^{44,45)}과 W. A. Curtin과 R.E. Miller²⁾에 의해 제안되었다. 원자 스케일에서 발생하는 전위(dislocation)을 포함한 결합들은 원자 영역과 연속체 영역의 경계면을 통해 연속체 영역으로 전달되기 때문에 이러한 현상을 이산 전위 역학(discrete dislocation mechanics)에 의해 표현해야 한다는 것이 주요한 연구 동기이다. 이산 전위 역학은 전위로부터 발산되는 탄성 응력장을 연속체 응력과 계수(modulus) 표현식에 결합시키기 때문에, 결합들이 연속체 영역으로 진행되는 것을 추적할 수 있고, 미리 정의된 evolution 법칙에 의해 연속체에서 그 현상이 모사될 수 있다.

T. Belytschko 등은 bridging domain 방법에 기초하여 분자적 모델(절대온도 0K)과 연속체 모델을 연계한 방법론을 제시하였으며,⁴⁶⁾ 이를 온도를 고려하여 연속체 모델과 분자동역학 모델을 결합한 동역학적 멀티스케일 해석 방법을 제안하였다.⁴⁷⁾ 이 방법론은 문제가 되는 국부적 영역에서는 분자동역학을 적용하고, 이 원자 영역을 둘러싸는 연속체 모델링과 연계한다. 연속체 영역과 원자 영역은 그 경계 근처에서 겹치게 되는데, 이를 브릿징(bridging)영역이라고 한다. 이 브릿징 영역 내에서 연계된 시스템의 해밀토니언(Hamiltonian)은 각 해밀토니언의 선형 조합으로 표현된다.

$$H = (1-\alpha)H^M + \alpha H^C \quad (0 \leq \alpha \leq 1) \quad (3)$$

여기서, H^M 은 분자동역학 영역에서의 해밀토니언이고, H^C 는 연속체 영역에서의 해밀토니언이다. α 는 각 영역의 전체 해밀토니언에 미치는 기여도를 나타내는 가중치에 해당한다. 위 식에서 알 수 있듯이, 브릿징 영역에서의 에너지는 한쪽 끝에서는 완전히 원자 모델에 의한 에너지가 되고, 다른 한쪽 끝에서는 완전히 연속체 에너지가 된다. 이러한 에너지 추이 과정에 의해, 높은 진동수의 원자 스케일 에너지가 공간적으로 필터링되고 이를 통해 높은 진동수의 wave들이 효과적으로 사라지게 되어 원자 영역으로 되반사되지 않게 된다.

브릿징 영역에서 분자 모델과 연속체 모델 사이의 변위를 일치시키기 위한 구속 조건은 라그랑지 승수법(Lagrange multiplier method)을 적용하여 부가한다. 따라서 브릿징 영역에서의 운동 방정식은 라그랑지 승수에 의한 힘이 추가되어 나타난다. 이 방법론의 또 다른 장점은 MD와 FE 시뮬레이션을 위한 시간 간격을 서로 다르게 사용할 수 있다는 것이다. 위 논문에서는, bridging domain 방법을 2차원 wave 및 균열 전파 문제에 대해 적용하여 그 신뢰도를 검증하였다. W. K. Liu 등이 제안한 bridging scale decomposition에 기초한 멀티스케일 해석 기법에서는 Langevin 방정식을 이용하여 경계면에서 발생하는 반사파 문제를 해결하였다.⁴⁸⁾ 이 외에도, 나노 영역과 연속체 영역의 경계면에서의 반사파 문제를 해결하기 위해, Green 함수를 사용한 W.Cai 등의 연구⁴⁹⁾ 및 W.E 등에 의한 연구⁵⁰⁾가 있었다.

기존의 연구들은 반사파를 없애기 위해 나노 영역에서 발생하는 고주파를 경계면에서 인위적으로 없애버리는 방식으로 인해 그에 대한 정보를 서브 마이크로 스케일 정도의 중간 영역에서 얻을 수 없게 되는 단점이 있다. 이러한 중간 스케일의 고주파 영역에서의 거동은 나노 스케일의 결합을 판별할 수 있는 유용한 정보가 되며 따라서 나노 영역 모델에서 발생한 적절한 수준의 고주파 거동을 연속체 모델에 반영하는 것이 필요하다. 본 연구실에서는, 이러한 점에 착안하여 고차(2차, 3차, 4차) Cauchy-Born법칙을 이용하여 원자스케일 포텐셜과 등가인 고차 연속체 모델을 구성하였다. 이러한 등가 연속체 모델은 고차 변형 구배를 포함하기 때문에, 지수 함수 형태의 가중 함수(weighting function)를 사용하는 무요소 갤러킨법을 적용하여 형상함수의 고차 미분을 보다 정확하게 구할 수 있도록 하였다. 브릿징 모델에서 분자역학 모델과 연속체 모델의 결합은 라그랑지 승수법을 적용하였다.

정적 분포하중을 받는 1차원 원자 고리(atomic chain)

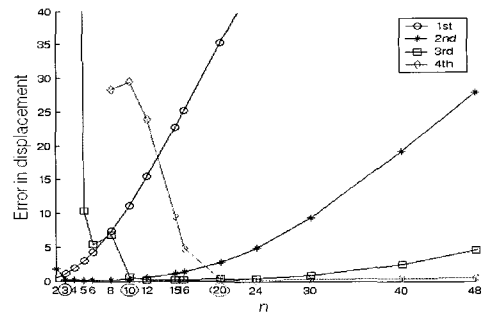
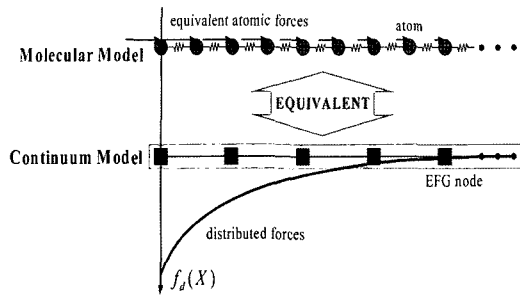


그림 9 (a) 등가 연속체 모델의 구성 (b) 다양한 절점 간격에 대한 변위해의 오차 (L-J 포텐셜)

에 대해 구성된 등가 연속체 모델의 해석 결과와 분자역학 모델과 비교한 그림이 아래에 주어졌다. 그림 9(a)에 주어진 모델에서 오른쪽 끝단은 고정된 것으로 간주한다. 그림 9(b)에서, n 은 절점 간격의 원자 간격에 대한 비를 나타내며, legend에 주어졌 있는 차수는 Cauchy-Born 법칙의 차수를 의미한다. 최소 간격 이상의 절점 간격을 갖는 고차 코사-본 법칙에 의한 모델이, 절점 간격이 커질수록 1차 코사-본 법칙에 의한 모델보다 훨씬 좋은 결과를 보임을 알 수 있다.

또한, 등가 연속체 모델과 분자 역학 모델을 연계한 브릿징 모델의 해석 결과가 아래 그림에 주어졌다. Harmonic 포텐셜에 대해 지속적으로 감소하는 분포 하중을 가한 문제에 대하여 해석하였다 전체 영역 중 왼쪽 영역은 분자역학 영역(M), 가운데 영역은 고차 연속체 영역(C1), 오른쪽 영역은 저차 연속체 영역(C2)의 세 영역으로 나누어 연결한 모델로 해석하였다. 고차 연속체 모델과 저차 연속체 모델은 각각 3차와 1차 코사-본 법칙에 의해 정식화하였다. C1 영역에서는 절점 간격이 원자 간격의 5배이며, C2 영역은 10배로 설정하였다. 이러한 방식으로 절점 간격을 점차 늘어가며 기존의 연속체 모델과 매끄럽게 연계할 수 있을 것이다. 그림에서 변위해가 분자역학 모델의 해와 거의 일치하는 것을 알 수 있다.

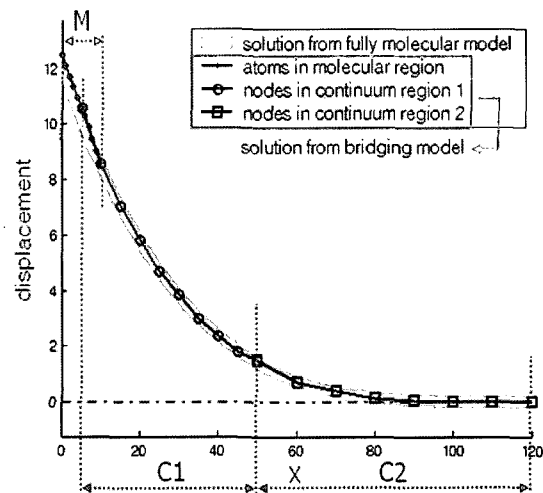


그림 10 브릿징 모델과 분자역학 모델의 변위해 비교

참고 문헌

1. W. K. Liu, E. G. Karpov, S. Zhang and H. S. Park, "An introduction to computational nanomechanics and materials," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 193, 2004, pp. 1529-1578.
2. W. A. Curtin and R. E. Miller, "Atomistic/continuum coupling in computational materials science," *Modelling*

and Simulation in Materials Science and Engineering, vol. 11, 2003, R33-R68.

3. R. E. Rudd, "Concurrent multiscale modeling of embedded nanomechanics," *Materials Research Society Symposium-Proceedings*, vol. 677, 2001, pp. AA1.6.1 AA1.-6.12.
4. N. M. Ghoniem, E. P. Busso and N. Kioussis, H. Huang, "Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an overview," *Philosophical Magazine*, vol. 83, 2003, pp. 3475-3528.
5. D. Frenkel and B. Smit, "Understanding computer simulation: from algorithms to application," *Academic*, New York, 1996.
6. S. Nosé, "A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble," *Molecular Physics*, vol. 10, no.1, 2002, pp. 191-198.
7. S. Nosé, "A unified formulation of the constant

- temperature molecular-dynamics methods," *Journal of Chemical Physics*, vol. 81, 1984, pp. 511-519.
8. W. G. Hoover, "Canonical dynamics: equilibrium phase-space distributions," *Physical Review A*, vol. 31, 1985, pp. 1695-1697
 9. S. D. Bond, B. J. Leimkuhler and B. B. Laird, "The Nosé Poincaré method for constant temperature molecular dynamics," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 151, 1999, pp. 114-134.
 10. H. C. Andersen, "Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature." *Journal of Chemical Physics*, vol. 72, 1980, pp. 2384-2393.
 11. M. Parrinello and A. Rahman, "Crystal structure and pair potentials: a molecular dynamics study," *Physical Review Letters*, vol. 45, 1980, pp. 1196-1199.
 12. M. Parrinello and A. Rahman, "Polymorphic transitions in single crystals: A new molecular dynamics method," *Journal of Applied Physics*, vol. 52, 1981, pp. 7182-7190.
 13. I. Souza and J. L. Martins, "Metric tensor as the dynamical variable for variable-cell-shape molecular dynamics," *Physical Review B*, vol. 55, 1997, pp. 8733-8742.
 14. E. Hernandez, "Metric tensor flexible cell algorithm for isothermal isobaric molecular dynamics simulation," *Journal of Chemical Physics*, vol. 115, no. 22, 2001, pp. 10282-10290.
 15. IMM, www.imm.org.
 16. C. L. Rountree, R. K. Kalia, E. Lidorikis, A. Nakano, L. V. Brutzel and P. Vashishta, "Atomistic of aspects of crack propagation in brittle materials: multimillion atom molecular dynamics simulations," *Annual Review of Materials Research*, vol. 32, 2002, pp. 377-400.
 17. W. Wunderlich and H. Awaji, "Molecular dynamics simulations of the fracture toughness of sapphire," *Materials and Design*, vol. 22, 2001, pp. 53-59.
 18. K. Mylvaganam and L. C. Zhang, "Effect of oxygen penetration in silicon due to nano-indentation," *Nanotechnology*, vol. 13, 2002, pp. 623-626.
 19. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff, "MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum," *Wear*, vol. 240, 2000, pp. 113-143.
 20. S. P. Ju, J. S. Lin and W. J. Lee, "A molecular dynamics study of the tensile behaviour of ultra thin gold nanowires," *Nanotechnology*, vol. 15, 2004, pp. 1221-1225.
 21. J. C. Butcher and G. Wanner, "Runge Kutta methods: some historical notes," *Applied Numerical Mathematics*, vol. 22, 1996, pp. 113-151.
 22. T. E. Simos, "Exponentially fitted Runge Kutta methods for the numerical solution of the Schrödinger equation and related problems," *Computational Materials science*, vol. 18, 2000, pp. 315-332.
 23. J. M. Franco, "Exponentially fitted explicit Runge-Kutta Nyström methods," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 167, 2004, pp. 1-19.
 24. M. Z. Qin and M. Q. Zhang, "Symplectic Runge-Kutta schemes for Hamiltonian system," *preprint*, 1989.
 25. D. Okunbor and R. D. Skeel, "An explicit Runge Kutta Nyström method is canonical if and only if its adjoint is explicit," *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 29, no. 2, 1992, pp. 521-527.
 26. T. E. Simos Jesus and Vigo Aguiar, "Exponentially fitted symplectic integrator," *Physical Review E*, vol. 67, 2003, pp. 016701.
 27. J. R. Dormand, M. E. A. E-Mikkawy and P. J. Prince, "Families of Runge-Kutta-nystrom formulae," *IMA Journal of Numerical Analysis*, vol. 7, 1987, pp. 235-250.
 28. A. F. Voter, "Hyperdynamics: accelerated molecular dynamics of infrequent events," *Physical Review Letters*, vol. 78, no. 20, 1997, pp. 3908-3911.
 29. A. F. Voter, F. Montalenti and T. C. Germann, "Extending the time scale in atomistic simulation of materials," *Annual Review of Materials Research*, vol. 32, 2002, pp. 321-346.
 30. F. F. Abraham, J. Broughton, N. Bernstein and E. Kaxiras, "Spanning the continuum to quantum length scales in a dynamic simulation of brittle fracture," *Europhysics Letters*, vol. 44, 1998, pp. 783-787.
 31. R. E. Rudd and J. Q. Broughton, "Coarse grained

- molecular dynamics and the atomic limit of finite elements," *Physical Review B*, vol. 58, 1998, pp. 5893-5896.
32. R. E. Rudd, "Coarse-grained molecular dynamics: dissipation due to internal modes," *Materials Research Society Symposium Proceedings*, Fall 2001 (Symposium T).
 33. S. A. Adelman and J. D. Doll, "Generalized Langevin equation approach for atom/solid surface scattering: General formulation for classical scattering off harmonic solids," *Journal of Chemical Physics*, vol. 64, 1976, pp. 2375-2388.
 34. E. B. Tadmor, M. Ortiz and R. Phillips, "Quasicontinuum analysis of defects in solids," *Philosophical Magazine A*, vol. 73, 1996, pp. 1529-1563.
 35. R. E. Miller, E. B. Tadmor, R. Phillips and M. Ortiz, "Quasicontinuum simulation of fracture at the atomic scale," *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 6, no. 5, 1998, pp. 607-638.
 36. J. Knap and M. Ortiz, "An analysis of the quasicontinuum method," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 49, no. 9, 2001, pp. 1899-1923.
 37. R. E. Miller, E. B. Tadmor, "The quasicontinuum method: Overview, applications and current directions," *Journal of Computer Aided Materials Design*, vol. 9, 2003, pp. 203-239.
 38. V. B. Shenoy, R. Miller, E. B. Tadmor, D. Rodney, R. Phillips and M. Ortiz, "An adaptive finite element approach to atomic-scale mechanics—the quasicontinuum method," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 47, 1999, pp. 611-642.
 39. E. B. Tadmor, R. Phillips and M. Ortiz, "Mixed atomistic and continuum models of deformation in solids," *Langmuir*, vol. 12, 1996, pp. 4529-4534.
 40. G. S. Smith, E. B. Tadmor, N. Bernstein and E. Kaxiras, "Multiscale simulations of silicon nanoindentation," *Acta Materialia*, vol. 49, 2001, pp. 4089-4101.
 41. R. E. Miller, M. Ortiz, R. Phillips, V. Shenoy and E. B. Tadmor, "Quasicontinuum models of fracture and plasticity," *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 61, 1998, pp. 427-444.
 42. V. B. Shenoy, R. Miller, E. B. Tadmor, R. Phillips and M. Ortiz, "Quasicontinuum models of interfacial structure and deformation," *Physical Review Letters*, vol. 80, no. 4, 1998, pp. 742-745.
 43. Vivek Shenoy, Vijay Shenoy and Rob Phillips, "Finite temperature quasicontinuum methods," *Materials Research Society Symposium-Proceedings*, vol. 538, 1999, pp. 465-471.
 44. L. E. Shilkrot, W. A. Curtin and R. E. Miller, "A coupled atomistic/continuum model of defects in solids," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 50, 2002, pp. 2085-2106.
 45. L. E. Shilkrot, R. E. Miller and W. A. Curtin, "Multiscale plasticity modeling: coupled atomistics and discrete dislocation mechanics," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 52, 2004, pp. 755-787.
 46. T. Belytschko and S. P. Xiao, "Coupling methods for continuum model with molecular model," *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, vol. 1, 2003, pp. 115-126.
 47. S. P. Xiao and T. Belytschko, "A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 193, 2004, pp. 1645-1669.
 48. G. J. Wagner and W. K. Liu, "Coupling of atomic and continuum simulations using a bridging scale decomposition," *Journal of Computational Physics*, vol. 190, 2003, pp. 249-274.
 49. W. Cai, M. de Koning, V. V. Bulatov and S. Yip, "Minimizing boundary reflections in coupled domain simulations," *Physical Review Letters*, vol. 85, 2000, pp. 3213-3216.
 50. W. E and Z. Huang, "A dynamic atomistic continuum method for the simulation of crystalline materials," *Journal of Computational Physics*, vol. 182, 2002, pp. 234-261. 