

## 분자동역학법에 있어 인접분자 리스트의 영향

최현규\* · 김혜민\*\* · 최순열\*\*\* · 김경근\*\*\*\* · 최순호†

(원고접수일 : 2004년 11월 23일, 심사완료일 : 2004년 12월 21일)

### Effect by the application of the Verlet Neighboring list in a Molecular Dynamics Simulation

Hyun-Kue Choi\* · Hae-min Kim\*\* · Soon-Youl Choe\*\*\* · Kyung-Kun Kim\*\*\*\* · Soon-Ho Choi†

**Abstract** : Generally, in the molecular dynamics simulations, the Verlet neighboring list algorithm is used for the reduction of a simulation time. On the other hand, the application of the Verlet neighboring list forces the time evolution of a simulation system to follow an unrealistic path in a phase space. In equilibrium state, it does not matter with the simulation results because the individual molecule's motion is originally random and any effect due to a small deviation from a real time evolution can be completely ignored. However, if an unsteady state is involved, such a deviation may significantly affect to the results. That is, there is a possibility that the simulation results provide ones with any misleading data. In this study, we evaluated the effect due to the Verlet neighboring list in performing the simulation of a non-equilibrium state and suggested the method to avoid it.

**Key words** : Lennard-Johnson potential(레나드-존스 포텐셜), Molecular dynamics(분자동역학), Neighboring list(인접분자 리스트), Simulation(전산모사)

#### 기호설명

$a$ : 가속도 [m/sec <sup>2</sup> ]	$fs$ : 펨토초 [femto second, 10 <sup>-15</sup> s]
$DR$ : 인접분자 리스트 작성을 위한 임의분자의 이동거리에 대한 기준 [m or Å]	$k_B$ : 볼츠만상수 [1.3807x10 <sup>-23</sup> J/K]
$F$ : 분자간력 [N]	$m$ : 분자 1개의 질량 [kg]
	$N$ : 분자개수 [-]
	$ps$ : 피코초 [pico second, 10 <sup>-12</sup> s]
	$R_{out}$ : 인접분자리스트 작성범위 [m or Å]

† 책임저자(한국해양대학교 해사대학), E-mail: choi\_s\_h@naver.com, Tel: 051)410-4261

\* 한국해양대학교 대학원 기관시스템공학부

\*\* 한국해양대학교 기계공학과

\*\* 군산대학교 해양과학대학 동력시스템공학전공

\*\*\* 한국해양대학교 해사대학 기관시스템공학부

$R_{cut}$  : 분자간 상호작용의 절단거리 [m or Å]  
 $r$  : 변위 [m or Å]  
 $T$  : 온도 [K]  
 $t$  : 시간 [s]  
 $U$  : 포텐셜 에너지 [J]  
 $v$  : 속도 [m/sec]  
 $x$  : 거리 [m]

#### 그리스문자

$\epsilon$  : L-J 포텐셜 우물의 깊이 [J]  
 $\psi$  : L-J 포텐셜 [J]  
 $\sigma$  : 분자직경 [m or Å]

#### 하첨자

AR : 아르곤  
 ave : 평균  
 des : 설정치

## 1. 서 론

1811년 Avogadro의해 분자를 기체의 최소단 위라는 개념이 발표된 이후<sup>(1)</sup>, Van der Waals에 의해 분자의 개략적인 크기가 제시되었고<sup>(2)</sup>, Maxwell-Boltzmann의 법칙으로부터 기체분자의 평균속도를 구할 수 있게 되었다<sup>(3)</sup>. 이처럼 분자에 대한 개념은 19세기 초반부터 관심의 대상이었으며, 실제 실험을 대체하는 전산모의실험(Computer Simulation)에 의한 분자 운동의 해석은 제2차 세계대전 말기에 핵무기의 개발을 위해 사용된 컴퓨터가 종전 후 일반 연구자들의 연구를 위해 개방된 이후부터 시작되었다<sup>(4)</sup>. 1950년대 초반 확률론을 근거로 한 몬테카를로(Monte Carlo, MC)법<sup>(5),(6)</sup>으로 미시적 크기(Micro Scale)의 열역학적 계에 대하여 컴퓨터를 이용한 모의실험기법이 처음으로 소개되었으며, 몇 년 뒤 뉴턴역학의 결정론에 근거한 분자동역학(Molecular Dynamics, MD)법<sup>(7)-(9)</sup>을 이용한 2차원계에 대한 계산이 발표되었다. 이후 Alder, Wainwright, Verlet, Rahman,

Stillinger 등에 의해 체계화되기 시작하였으며, 1970년 이후의 컴퓨터의 성능향상과 W/S 및 PC의 대량 보급에 힘입어 1980년대부터 전산모의 실험기법은 전세계적으로 광범위하게 수행되기 시작하였다<sup>(9)</sup>.

전산모의 실험방법은 현재 실험환경을 구사하기 어려운 경우, 실제 실험을 대체하여 열역학적 물성연구, 전열현상, 재료의 파괴현상 및 물질의 상변화 등의 해석을 수행할 수 있는 대체 실험방법으로서 뿐만 아니라, 기존의 혹은 새로운 이론적인 모델의 적합성을 시험할 수 있는 강력한 수단으로 받아들여지고 있으며, 통계물리, 전산물리, 계산화학, 분자생물학 등의 다양한 분야에서 응용되고 있다<sup>(5)-(9)</sup>.

MD 계산에 있어서 분자의 수가 커질수록 계산 시간은 대폭 늘어나며, 이는 계산비용과 밀접한 관계를 갖고 있기 때문에 계산시간을 줄이기 위해 분자간 상호작용력의 절단거리(Cut off Length)와 인접분자리스트(Neighboring List, NBL)를 사용한다. 하지만 본 연구의 저자들은 NBL의 사용이 Algorithm의 특성상 NBL을 사용하지 않은 경우와 비교하여 위상공간내에서 다른 경로를 따르게 한다고 판단하고 있다. 이는 연구대상이 평형상태(Equilibrium Steady State)에서의 열역학적 물성을 파악하는 것이라면 위상공간내 체계적의 미소한 차이는 문제가 되지 않겠지만, 이에 반해 만일 초기상태에서 평형상태로 천이하는 비정상구간이 연구대상이라면 이는 잘못된 계산자료로부터 계를 해석하게 됨을 의미할 것이다. 따라서 본 연구는 이와 같이 비평형상태가 연구대상인 경우 NBL 적용의 영향이 어느 정도인지를 정량적으로 분석하기 위해 수행하였다.

## 2. 분자동역학법

MD는 앞에서 이미 기술한 결정론적인 뉴턴역학에 기초하고 있으며, 계의 초기상태가 결정되면, 이로부터 포텐셜에너지가 구해지고, 힘, 가속도, 속도가 차례로 일의적으로 계산되어진다. 계의 시간천이를 결정하는 분자간의 상호작용력은 전기적

으로 중성인 분자들의 접근에 의해 발생하는 순간적인 전자의 비평형상태, 즉 분극(Polarization)에 의한 반데르발스력에 기인한다.

본 연구는 아르곤(Argon)분자로 구성된 기액 혼합계를 대상으로 수행하였다. 이는 아르곤이 단원자분자로서 운동에너지가 병진운동에너지(Translational Kinetic Energy)만으로 표현되므로 해석이 쉽고, 특히 증기상태의 경우 이는 상태대응의 원리(Principle of Corresponding States)<sup>(10)</sup>에 의하여 공업적으로 널리 쓰이는 다른 종류의 기체에 대해서도 그 결과를 적용할 수 있기 때문이다.

## 2.1 레나드-존스 포텐셜(Lennard-Jones Potential)

아르곤과 같은 불활성 물질은(Inert material) 식(1)과 같은 경험적인 레나드-존스(Lennard-Jones)의 12-6 포텐셜로 주어진다<sup>(7)-(9)</sup>.

$$\phi(r) = 4 \cdot \epsilon \left\{ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (1)$$

$$F(r) = - \frac{d}{dr} \phi(r) \quad (2)$$

식(1)의  $r$ 는 분자간의 거리,  $\epsilon$ 는 포텐셜 0에서 최소치까지의 깊이(Depth of Potential Well), 그리고  $\sigma$ 는 분자의 직경이다.

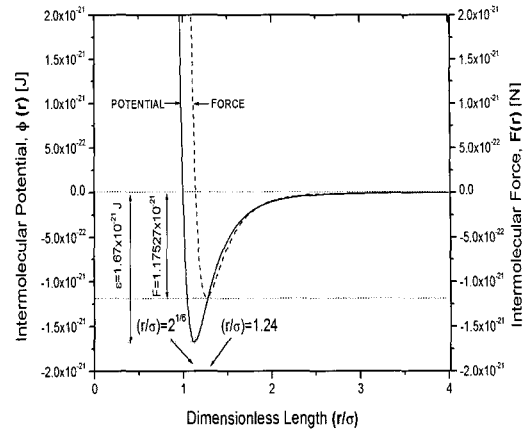
식(2)는 분자상호간 작용하는 힘으로서, 식(1)과 식(2)의 관계로부터 분자간력(Intermolecular Force)을 구하면 다음과 같다.

$$F(r) = 24 \cdot \epsilon \left\{ 2 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^7 \right\} \frac{1}{r} \quad (3)$$

Fig. 1은 분자간의 거리에 따라 두 분자간에 작용하는 포텐셜과 분자간력의 변화를 보이는데, 포텐셜과 분자간 상호작용력이 0이 되는 거리는 다음의 조건으로부터 구할 수 있다.

$$\frac{d}{dr} \phi(r) = 0 \quad (4a)$$

$$\frac{d}{dr} F(r) = 0 \quad (4b)$$



**Fig. 1 Intermolecular force by Lennard-Jones potential with the change of a distance between two molecules**

포텐셜에너지는 분자간거리  $r = 1.12\sigma$ 에서, 분자간 상호작용력은  $r = 1.14\sigma$ 에서 최소가 된다.<sup>(11)</sup>

## 2.2 인접분자 리스트(Neighboring List)

MD를 이용한 전산모의실험에서 특정분자 주위에 존재하는 인접분자들을 효율성있게 파악하는 방법으로는 Neighboring List(NBL)와 Cell-linked List의 두 가지의 Algorithm이 있으나<sup>(12),(13)</sup>, NBL이 보다 광범위하게 사용되고 있다. 이 경우 분자간 상호작용을 어디까지 고려해야 하는 것이 계산효율상 중요한 문제가 되고 있다. MD에서는 분자간 포텐셜을 계산하는 경우 식(5)와 같은 2체 포텐셜을 계산하고 이를 합하는 방법을 취하는데, 원리적으로는 모든 분자에 대해 고려해야만 하나, 이는 상당한 계산시간이 요구되므로 현실적이지 않다. 따라서 계산시 특정위치 이내에 존재하는 분자만을 고려하고, 그 특정분자를 중심으로 하여 일정거리이내에 위치하고 있는 분자들을 사전에 파악하는 NBL을 사용하는 것이 일반적이다<sup>(12),(13)</sup>.

$$U(r^N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \phi(r) \quad (5)$$

Fig. 2는 NBL의 방법을 도시한 것으로서 계산하고자 하는 특정분자 주위의 상호작용력을 고려

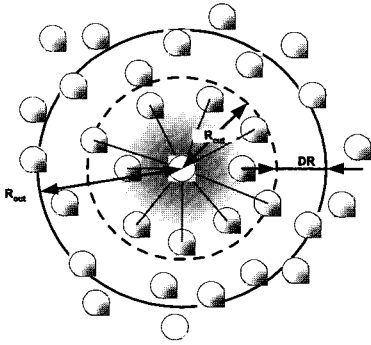


Fig. 2 Cut-off length of a system

하여  $R_{cut}$ 과  $R_{out}$ 을 두고, 두 거리사이를 DR로 표시하였다.  $R_{cut}$ 의 거리는 분자간력이 거의 0이 되는 위치로서 현재까지 약 2.5  $\sigma$ 를 사용하였으나, 비평형상태(Non Equilibrium Steady State)의 구현을 위해 본 연구에서는 3.5  $\sigma$ 의 거리를 적용하였다<sup>(14),(15)</sup>.

$R_{out}$ 은 MD의 전산모의 실험 중 NBL내에 포함된 분자들의 이동거리가 DR의 거리이상 벗어났을 때 계산 중 NBL을 재작성 해야 하는 분자변위의 기준을 나타낸다.

2.3 오일러 방법(Euler Method)

MD는 크게 2부분으로 나누어지는데, 먼저 분자들의 운동을 계산하여 위상공간(Phase Space)에서의 그 궤적을 저장하는 것이고, 이 후 저장된 운동궤적으로부터 연구대상인 물질 혹은 현상을 이해하기 위해 계산된 운동궤적의 해석을 수행하는 부분이다. MD는 뉴턴의 제2법칙인 식(6)의 미분방정식으로부터 매 시각마다 분자의 새로운 위치를 계산함으로써 분자의 운동궤적(Trajectory)을 구하는 것이 그 목적이며, 분자의 운동궤적을 컴퓨터로 모의계산하기 위해서는 식(6)의 미분방정식을 유한 차분방정식으로 변형시켜야 한다.<sup>(11)</sup>

$$F(r) = m \cdot \frac{dv}{dt} = m \cdot \frac{d^2r}{dt^2} \tag{6}$$

$$a(t) = \frac{F(t)}{m} \tag{7}$$

$$v(t+\Delta t) = v(t) + a(t) \cdot \Delta t \tag{8}$$

$$x(t+\Delta t) = x(t) + v(t) \cdot \Delta t \tag{9}$$

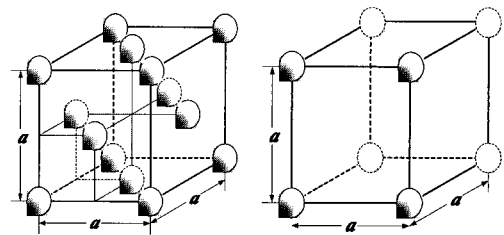
상기의 식들은 오일러법(Euler Method)<sup>(14),(15)</sup>이라 불리우는 가장 간단한 계산방법으로 분자들의 운동은 현재시간의 분자배치상태로부터 포텐셜, 힘, 가속도, 속도를 차례대로 구한 후, 이로부터 다음 시간에서의 새로운 분자들의 위치를 시간순서적으로 알 수 있게 된다.

3. 전산모의 실험 및 고찰

3.1 전산모의 실험 분자배치

MD를 수행하기 위해서는 모의실험 대상인 계를 구성하는 분자들을 배치하여 계산계(Simulation System)를 구성하며, 이때 유의해야 할 부분은 가능한 현실계와 동일한 크기의 계에 실제와 유사하도록 분자를 배치시켜야 한다는 점이다. 예를 들어, 기체상태가 연구대상이라면 분자를 계산계의 전 체적에 걸쳐 일정분포로 등간격의 배치를, 액체상태의 경우에는 불규칙적인 배치나 임의의 간격을 이용한 규칙적 배치를 하는 것이 일반적이다. 그리고 고체상태의 경우에는 단지 실험으로부터 알려진 인접분자간의 거리를 사용하는 것으로 충분하다.

본 연구에서는 아르곤을 대상으로 Fig. 3(a)와 같은 면심입방격자 (Face Centered Cubic Lattice, FCC)<sup>(16)</sup>를 배치하는 것이 고체상태의 경우 일반적이지만, 증기와 액체상태를 연구대상



(a) FCC Lattice (b) SC Lattice

Fig. 3 Lattice state of argon in simulation

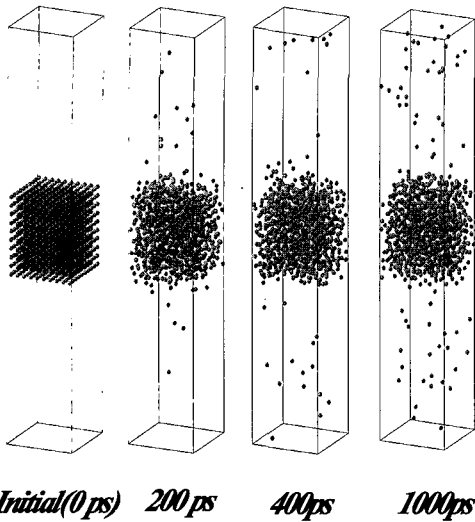


Fig. 4 Snapshots of a system during a simulation

으로 선정하였기 때문에, 액체상태의 분자구조인 (b)와 같은 단순입자구조(Simple Cubic Lattice)의 형태로 분자를 배치하였다.

Fig. 4는 본 연구에 적용된 분자배치구조로서 증기와 액체 혼합상태에서의 분자운동을 시간의 경과에 따라 보여주고 있다. 기액계면의 상태를 유지시키기 위해 분자간 거리는 계산을 수행하고자 하는 계의 상태에 대응하는 액체상태의 실제 분자간 거리를 구해서 Fig. 3(b)에서 보인 것과 같은 구조로 1,000개의 분자를  $10 \times 10 \times 10$ 으로 배치하였으며, 이와 같이 배치하면 액체의 표면에 위치하는 분자는 주위 분자들의 불규칙한 운동의 영향에 의해 순간적으로 증기영역으로 이탈할 수 있는 기회를 가지게 되며, 일단 수밀도(Number Density)가 낮은 증기영역으로 유입되면 주위에는 액체영역과 달리 분자들이 거의 존재하지 않으므로 분자들과의 상호작용이 상당히 약화되어 증기분자로서 거동하게 된다. 하지만 시간이 경과할수록 액체로부터 이탈된 증기분자의 수가 증가하게 되고, 일정수준 이상이 되면 증기영역에서 액체로 유입되는 분자수와 액체로부터 증기영역으로 유출되는 분자수가 동일하게 되어 평형상태의 기액계면이 형성되어 진다.

### 3.2 전산모의 실험

기액계면의 분자동역학 전산모의실험을 수행하기 위한 W/S의 재원으로는 HP, Workstaion-X4000, 2CPU, 512MB를 사용하였으며, 계산에 사용된 아르곤의 물성 및 전산모의실험에 사용된 변수들을 Table 1에 나타내었다. 전산모의실험 방법은 Fig. 4의 N(입자수), V(체적), E(에너지)일정의 계에 대하여 반복계산을 위한 시간간격을  $\Delta t = 5\text{fs}$ 로 하여 100번의 계산마다 식(12)를 이용하여 계의 온도제어(Temperature Control)를 수행하면서 초기 100,000번의 반복계산(500 ps에 해당)을 하였다.

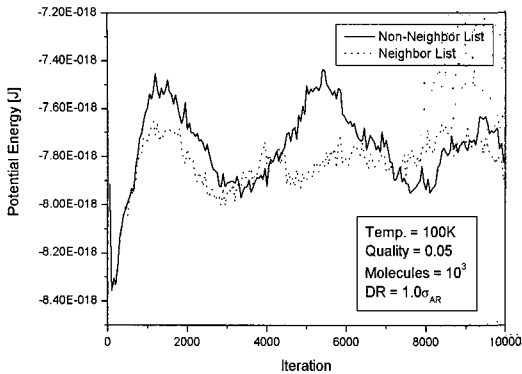
$$v = \sqrt{\frac{3k_B \cdot T_{des}}{m}} \quad (12)$$

모의실험의 초기조건으로서는 분자배치뿐만 아니라 분자의 초기 속도 역시 중요한 인자이며, 이는 실험대상인 계의 설정온도로부터 식(12)와 같이 계산하였다.  $v$ 는 아르곤 분자의 속도,  $k_B$ 는 볼츠만 상수( $1.3806 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ )를  $T_{des}$ 는 계내 분자의 설정온도를 나타낸다. 초기계산 후에는 동일한 500 ps의 시간동안 어떤 조작도 하지 않고 계를 그대로 방치하는 완화과정(Relaxation Process)을 거치도록하였으며, 이 완화과정을 통해 계는 완전히 평형상태에 도달하게 된다<sup>[11]</sup>.

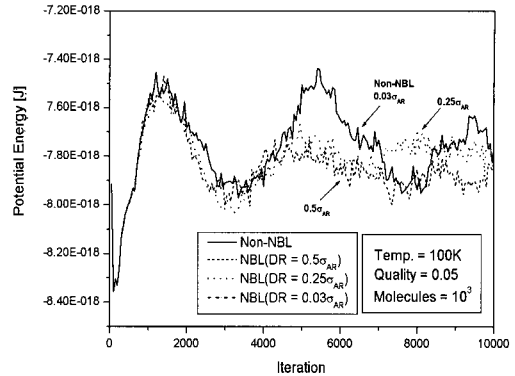
Table 1 Parameter of a Simulation

Mass of Argon, $m_{AR}$ (kg)	$6.634 \times 10^{-26}$
Diameter of Argon Molecule, $\sigma_{AR}$ (Å)	3.4
Depth of Potential Well, $\epsilon_{AR}$ (J)	$1.67 \times 10^{-21}$
Time Step, $\Delta t$ (fs)*	5.0
Cut-off Length, $R_{cut}$ ( $\sigma_{AR}$ )	3.5
Initial Arrangement of Molecules (x, y, z Directions)	$10 \times 10 \times 10$
Temperature, $T$ (K)	100
Quality, x	0.05

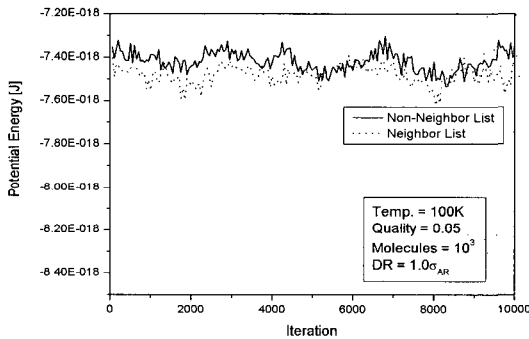
\* 1 fs (femto sec) =  $10^{-15}$ s



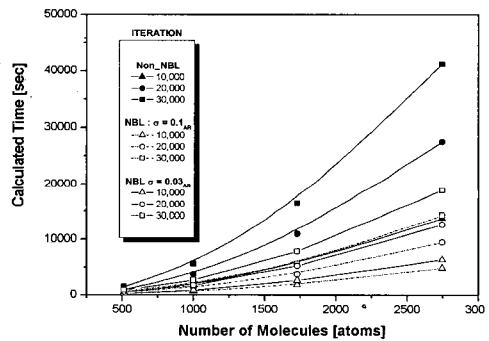
**Fig. 5** Comparison of the potential energy in initial simulation between the values obtained by using the neighbor list and not used.



**Fig. 7** Comparison of potential energy in the change of DR value between the values obtained by using the neighbor list and not used.



**Fig. 6** Comparison of the potential energy in continue simulation between the values obtained by using the neighbor list and not used.



**Fig. 8** Comparison of CPU time in the molecular dynamic simulation between the values obtained by using the changed neighbor list and old neighbor list and not used.

### 3.3 전산모의 실험 결과 및 고찰

전산모의 실험은 NBL의 적용 여부에 관하여 초기 조건 100,000번의 반복계산을 통해 에너지 준위의 변화를 비교하였다. Fig. 5는 최초 비평형 상태에서 평형상태로 이동하는 과정의 포텐셜에너지 준위변화를 나타내었으며, 초기상태에서 평형상태가 되기까지 포텐셜에너지 준위에 다소 차이가 있음을 볼 수 있다. Fig. 6은 Fig. 5와 동일한 조건에서 초기계산 이후 다시 100,000번의 계산을 수행하였으며, 계가 평형상태에 도달할 경우에는 NBL의 적용여부에 따른 포텐셜에너지 준위에 차이가 없음을 보이고 있다. 전산모의 실험에 의한 물질성치의 평가는 계가 충분히 평형상태로 도달되어진 후 계산되므로 이와 같은 미소한 차이는 분

제가 되지 않지만, 초기상태에서 평형상태로 천이하는 비정상구간인 비평형상태가 연구대상일 경우 Fig. 5의 계산결과는 적절하지 않은 값을 제시할 우려가 상당히 높다.

본 연구에서는 이와 같은 문제해결을 위하여 비평형상태에서 새로운 NBL작성의 기준을 제공하는 DR의 변화에 따른 계산결과와 NBL을 사용하지 않은 계산결과가 동일하게 되는 점을 찾고자 하였다. 그러나 DR의 범위를 아주 작게 하였을 경우 분자의 미소한 이동에도 다시 전체 분자에 대해 NBL을 재계산해야만하고 따라서 계산시간의 연장이 예상된다. NBL은 CPU의 계산시간을 단축시키기 위한 알고리즘이므로 비평형상태에서

도 포텐셜에너지의 변화가 없고, CPU의 계산시간을 줄일 수 있는 적절한 DR 값을 선정하는 것은 매우 중요한 사항임에 틀림없다.

Fig. 7에서는 DR의 값을  $0.5\sigma_{AR}$ ,  $0.25\sigma_{AR}$ ,  $0.03\sigma_{AR}$  으로 변화시켜가면서 구한 포텐셜에너지와 NBL을 제공하지 않은 경우의 포텐셜에너지와의 비교를 보이는 것이다.

Fig. 7에서 보는 바와 같이 DR 값을 점차 감소 시킴에 따라 NBL을 적용시키지 않은 경우에 접근하며, DR을  $0.03\sigma_{AR}$ 로 설정하는 경우 포텐셜에너지가 서로 일치함을 확인할 수 있었다. 따라서, 전산모사 실험에 있어서 비평형계를 연구대상으로 할 경우 NBL의 사용에 있어서 DR값의 선정에 충분한 주의가 필요함을 시사하고 있으나 계산상 효율의 관점에서는 NBL을 적용하지 않은 경우와 NBL을 적용한 경우와의 CPU 계산시간을 고려하지 않을 수 없다.

Fig. 8은 비평형상태 구간에서 NBL을 사용한 경우와 사용하지 않은 경우, 그리고 이 두 가지 경우가 동일한 값을 가지도록 DR을  $0.03\sigma_{AR}$ 로 한 경우에 대해서 계내의 분자수와 반복계산회수에 따른 CPU 계산시간을 보이는 것이다. 분자수 2,744개( $14 \times 14 \times 14$ )에 대해서 30,000회 반복계산시 NBL 사용( $DR=1.0\sigma_{AR}$ )에 따른 계산시간은 NBL을 사용하지 않을 때보다 전체 계산시간의 65.3%로 CPU 계산시간을 단축하였으며, DR의 값으로  $0.03\sigma_{AR}$ 를 사용했을 경우는 54.4%의 시간을 단축시키는 결과를 얻을 수 있었다.

#### 4. 계산결과

본 연구는 비평형상태 구간에서 NBL의 적용여부에 따른 포텐셜에너지의 변화를 파악하였고, 비평형상태가 연구대상이 되었을 때의 전산모의 실험시 고려되어야만 하는 사항에 관한 것으로서, 다음과 같은 결과를 얻었다.

(1) 분자동역학법을 이용하여 평형상태에 있는 계의 물성을 구하는 것이 연구목적인 경우, NBL의 적용여부는 그 결과에 영향을 미치지 않음을 알 수 있었다.

(2) 비평형상태의 계산에서는 NBL 적용여부에 따라 계의 상태를 나타내는 변수들이 다르게 구해지므로 이에 대해 충분한 주의가 필요하다.

(3) 프로그램 중에서 NBL을 재작성하기 위한 분자의 이동거리, DR을 변화시켜 포텐셜에너지의 변화를 평가한 결과,  $DR=0.03\sigma_{AR}$ 에서 NBL을 적용하지 않은 값과 일치함을 알 수 있었다.

(4) 분자수 2,744개( $14 \times 14 \times 14$ )에 대해서 30,000회 반복계산 결과 NBL을 적용하였을 때와 적용하지 않았을 때의 CPU 계산시간은 NBL 적용시( $DR=1.0\sigma_{AR}$ ) 65.3%로 단축하였으며, DR을  $0.03\sigma_{AR}$ 로 설정한 경우의 계산시간은 54.4%로 단축하였음을 알 수 있었다. 따라서, 비평형상태가 연구대상일 경우에는 반드시 이와 같은 결과를 고려해야만 한다.

#### 참고문헌

- [1] Amedeo Avogadro, "Essay on a Manner of Determining the Relative Masses of the Elementary Molecules of Bodies, and the Proportions in Which They Enter into These Compounds", J. de Phy. **73**, [Alembic Club Reprint No. 4], pp.58-76, 1811.
- [2] Arthur Beiser, "Concepts of Modern Physics sixth edition", McGraw-Hill, pp.335-386, 2003.
- [3] Eisberg, R. and Resnick, R., "Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles 2nd ed.", New York Wiley, pp.376-392, 1985.
- [4] 김상락, "분자동역학," 아카넷, pp.15-169, 2003.
- [5] M. E. J. Newman & G. T. Barkema, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", Oxford University Press, pp.31-44, 2002.
- [6] N. metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. N. Teller and E. Teller, "Equation of State Calculations

by Fast Computing machines", J. Chem. Phys., Vol.21, pp.299-322, 1953.

- [7] J. M. Haile, "Molecular Dynamics Simulation", John Wiley & Sons, INC., pp.188-199, 1997.
- [8] D. Frenkel and B. Smit, "Understanding Molecular Simulation", Academic Press, pp.19-95, 1996.
- [9] M. P. Allen, D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquid", Oxford Science Publications", pp.1-139, 1987.
- [10] 김경근, 오병주, 정한식, 김성규, "공업열역학", pp.326-342, 2002.
- [11] 최순호, "분자동역학법에 의한 기체분자의 속도 분포에 관한 연구", 한국박용기관학회, 제 28권 3호, pp.49-58, 2004.
- [12] Z. H. Yao, J. S. Wang, M. Cheng, "Improved O(N) neighbor list method using domain decomposition and data sorting", Technical Proceedings of the 2004 NSTI Nanotechnology Conference and Trade Show, Vol.2, pp.486-489, 2004.
- [13] Ole H. Nielsen, "Data-parallel molecular dynamics with neighbor-lists", Proceedings of Workshop on Applied Parallel Computing in Physics, Chemistry and Engineering Science (PARA95), ed. J. Wasniewski, Springer Lecture Notes in Computer Science, Vol.1041, pp.443, 1995.
- [14] 崔淳豪, "分子動力學法による薄膜の熱傳導に關する 研究", 東京大學教博士學位論文, pp.10-78, 2003.
- [15] S. H. Choi, S. Maruyama, K. K. Kim, J. H. Lee, "Evaluation of a phonon Mean Free Path in Solid Thin Films by the Classical Molecular Dynamics", J. Kor. Phys. Soc., Vol.43, No.5, pp.747-753, 2003.
- [16] Ch. Kittel, "Introduction to Solid State Physics", Wiley, pp.1-26, 1996.

저 자 소 개



**최현규 (崔顯奎)**

1975년 1월생, 1997년 군산대학교 기관공학과 졸업(공학사), 1999년 한국해양대학교(원) 기관공학과 졸업(공학석사), 2004년 한국해양대학교(원) 기관시스템공학과 박사과정 수료, 2002년~현재 (주)쓰리케이 엠아이텍 연구원, 2003년~현재 한국해양대학교 시간강사.



**김혜민 (金惠敏)**

1982년 2월생, 2004년 한국해양대학교 기계시스템공학과 졸업(공학사), 2004년 한국해양대학교 기계공학과 대학원(석사과정).



**최순열 (崔順烈)**

1947년 6월생, 1986년 서울산업대학교 기계공학과 졸업(공학사), 1992년 조선대학교 기계공학부 대학원 졸업(공학석사), 1999년 한국해양대학교 기관시스템공학부 대학원 졸업(공학박사), 1992~현재 군산대학교 동력기계시스템공학부 교수.



**김경근 (金京根)**

1952년 10월생, 1974년 한국해양대학교 해사대학 기관학과 졸업(공학사), 1976년 한국해양대학교(원) 기관공학과 졸업(공학석사), 1979년 일본 동경대학 대학원 기계공학부 졸업(공학석사), 1985년 일본 동경대학 대학원 기계공학부 졸업(공학박사), 1994년~1999년 조선·해양기자재 지역컨소시엄 사업단장, 2000년~2002년 한국해양대학교 해사산업연구소장, 1979년~현재 한국해양대학교 기관시스템공학부 교수, 2000년~현재 (주)쓰리케이엠아이텍 대표이사, 2004년~현재 한국해양대학교 해사대학 학장.



**최순호 (崔淳豪)**

1961년생, 1987년 한국해양대학교 선박기계공학과 졸업(공학사), 1989년 동대학원 선박기계공학과 수료(공학석사), 1989년 동의공업대학 시간강사, 1990년 (주)현대엔지니어링, 1992년 한국원자력연구소, 1997년 한국해양대학교 시간강사, 2003년 동경대학교 대학원 수료(공학박사), 2004년~현재 한국해양대학교 시간강사, 한국기계연구원 비상근연구원.