



THEME 01

다중스케일 모델링의 배경과 현황

송지환 | 서강대학교 기계공학과, 박사과정 | e-mail : pennyhard@sogang.ac.kr

김동철 | 서강대학교 기계공학과, 교수 | e-mail : dckim@sogang.ac.kr

최근 광범위한 응용 잠재력으로 인해 큰 관심을 받아온 나노스케일에 대한 다양한 연구는 복합적인 스케일에서 발생하는 물리적 현상으로 인해 그 메커니즘을 체계적으로 적립하는 데 큰 어려움이 따르고 있다. 이러한 어려움을 극복하기 위해 다중스케일의 시스템을 모델링하는 기술의 필요성이 크게 대두되고 있으며, 많은 연구가 시도되고 있다. 이 글에서는 이러한 다중스케일 모델링 연구의 배경과 현황에 대해 소개하고자 한다.

지난 30여 년 간, 우리는 나노스케일의 물질들을 합성하는 새로운 방법들과 이 물질들의 독특하고 놀라운 물성들을 발견해 냈다. 최근의 고해상도 전자 현미경을 통해 단일 원자 수준까지 관찰하는 것이 가능해졌으며, 스캐닝 프로브(scanning probe) 기술을 이용하여 이러한 단일 수준의 원자를 조작 및 처리하는 것이 가능하게 되었다. 현재의 기술 수준은 단일 분자, 박테리아 또는 바이러스 입자를 관찰할 수 있는 정도로 발전했다. 또한 다이아몬드보다 더욱 강한 보호 코팅을 만들 수 있으며, 기존 재료보다 더욱 강화된 합금 또는 복합재를 제작하는 것이 가능해졌다. 나노스케일 재료 합성 기술의 발전은 사람들이 추구하는 작은 크기, 낮은 밀도, 높은 강성, 높은 강도 그리고 우수한 전기적 성질을 갖는 구조적 합성에 많은 성과를 이루고 있다. 그리고 이러한 발전은 이학과 공학 분야에서 그 응용분야에 대한 활발한 연구가 진행되는 데 촉진제 역할을 하였다. 그 결과 나노스케일의 재료들은 강화재료, 전계 방출 표시 소자(Field Emission panel Display), 화학적 센싱, 약물 전달, 나노-전자 디바이스 등에 폭넓게 응용되어 사용되고 있으며, 특히 나노스케일의 장치들은 센서, 의학적 진단장치, 물질 전달 시스템과 같은 분야에 큰 잠재력을 지니고 있다. 이러한 나노기술에 대한 관심과 함께, 다양한 스케일의 시스템을 모델링하기 위한 연속체/분자/양자 역학이 결합된 전산 기법들이 널리 연구되면서 원자 단위와 매

크로 단위 사이의 역학적, 재료적 차이를 설명할 수 있게 되었다. 이러한 발전은 나노기술에 대한 교육과 연구 분야에서 새로운 기회들을 하나하나 열어주고 있다.

나노스케일 공학의 잠재력

나노공학은 현재 사회 발전에 핵심적인 영역에 많은 영향을 주고 있으며 앞으로도 큰 영향을 미칠 것으로 보인다. 최근 활발히 진행 중인 연구인 신경생물학과 암세포 연구를 위한 세포역학 응용 분야는 이러한 영역 중 중요한 한 예이다. 최근 세포의 무수히 많은 구조적 특징, 상호작용 그리고 표면의 흡착능력 등을 이해하는 데 어려움이 제기되고 있으나 이들에 대한 방법론적 이해가 적립된다면, 암세포 전이의 방지와 같은 암치료 방법의 발전에 유용하게 사용될 수 있을 것이다. 또한, 나노공학 및 생명공학에 있어 DNA의 응용은 원자스케일로부터 매크로스케일까지의 재료를 설계 및 생산하고자 하는 목표를 눈에 띄게 현실화 시켰다. DNA의 일반적인 상호작용을 예측할 수 있게 되면서, 각각의 DNA 구조를 벽돌처럼 취급·처리하여 고체 재료를 설계하는 연구가 수행되고 있다. 이러한 DNA의 응용은 새로운 기계적·화학적·광학적 성질을 가지며, 제어 가능한 기본 스케일 구조를 가지는 새로운 재료의 설계로 이어질 수 있다. 나노공학은

무기와 군사력을 개선시켜 테러를 방지하고, 국가 안보를 향상시키는 데 큰 잠재력을 지니고 있다. 예를 들어 나노스케일의 센서는 유해한 불법 화학물질의 비행 운반을 막는 데 사용될 수 있으며, 나노 재료에 기반을 둔 에너지 흡수 폴리머는 방탄성질을 가지고 있으며 매우 가벼워 군인들의 활용에 있어서 매우 큰 장점을 가지고 있다. 이러한 의미 있는 연구들은 MIT Institute for Soldier Nanotechnologies에서 이루어지고 있다. 보호 코팅 역시 나노공학으로부터 많은 발전을 이룬 분야 중 하나이다. 나노 보호코팅은 자동차 산업에서의 기어, 베어링 그리고 군사분야에서 해군 함정 등과 같이 넓은 분야에서 응용될 수 있다. 나노 세라믹 타입의 코팅을 표면에 처리하여 매우 강한 재료인 다이아몬드처럼 그 성능을 향상시켜 마찰 및 마모를 줄인다. 이러한 보호 코팅은 부품의 수명을 크게 향상시키며, 유지비용을 크게 감소시킨다. 나노공학의 또 다른 중요한 분야는 전자, MEMS 그리고 NEMS 분야이다. 예를 들어, 나노미터 스케일의 두께를 갖는 자기성 물질을 이용하여 컴퓨터 하드디스크의 저장 용량을 크게 증가시켰으며, 의약품 분야 역시 NEMS, MEMS 장치들의 다양한 수혜를 받고 있다. 또한 나노공학을 통해 살아있는 생명체 시스템을 동적으로 묘사할 수 있게 되어 박테리아나 질병에 대한 실시간 연구 수행이 가능하게 되었다.

다중스케일 모델링의 배경

현재 공학 분야에서 진행되고 있는 연구는 분자 스케일의 역학이나 재료에 영향을 주기 위한 시작 단계에 있으며, 이러한 연구는 기초과학과의 교류를 통해 많은 이로움을 가져다 줄 수 있다. 실제로 고체 분야의 소성과 충격에 관한 연구에서 마이크로스케일 구조 설계를 통해 성공적으로 그 성과를 이루어낸 바 있으며, 탄소나노튜브의 개발 역시 나노스케일의 연구가 중요한 역할을 하는 분야 중 하나이다. 유체의 경우, 나노스케일에서의 복합적인 물리현상이 마이크로스케일에서의 구조 설계를 함에 있어 매우 중요한 부분을 차지한

다. 유체 내에서의 전자 이동 및 전자의 삼투성 흐름을 미소 입자 운동과 연계하는 것은 중요한 연구 분야이며 이는 국가 안보분야에 큰 영향을 미칠 수 있다. 마이크로 유체 장치들은 종종 화학, 심지어는 전기화학을 유체의 움직임과 연관지어 구성하게 된다. 일단 고체나 유체에 대한 물리-기반 모델이 정립된다면, 이와 다중의 물리현상을 모사하기 위한 전산 기법들의 개발이나 발전이 필요하게 될 것이다.

공학적 응용 측면에서 마이크로 및 나노스케일의 구조화 및 공정에 대해서는 실현가능성이 매우 높아졌으나, 이러한 미소구조의 거동에 대한 지식 및 모델링 기법에 있어서는 여전히 제한적인 상태이다. 연속체 기반의 전산 해석은 이러한 미소구조의 장치들을 모두 아우르는 데 어려움이 있는 것이 사실이다. 나노튜브의 심한 변형, 이온 침착과정, 기체의 동적 전달 그리고 마이크로 스케일에서의 재료 역학과 같은 분야에서는 비연속체적인 거동이 나타나며 나노 스케일의 장치에서는 열 효과와의 상호작용과 기계적 반응이 더욱더 중요해진다. 더욱이, 나노스케일의 구성체들은 더 크고, 다른 시간 단위를 갖는 구성체들과 복합적으로 결합되어 사용되며 이러한 하이브리드 시스템의 경우, 서로 다른 단위의 시간 및 길이가 완성된 시스템 내에서 중요한 역할을 하게 된다. Ab initio 방법이나 분자동역학(MD)과 같이 단일 스케일을 적용하는 방법들은 광범위한 시간스케일 및 길이스케일을 갖는 하이브리드 구조물을 분석하는 데 있어 어려움이 있는 것이 사실이다. 마이크로스케일 시스템 내에서 나노스케일의 재료 및 장치들을 설계하고 연구하는 경우, 그 모델은 반드시 길이 단위를 정의하는 데 있어서 나노미터로부터 수백 마이크로에 이르는 정도로 확장해야 한다. 무어의 법칙에 따르면 컴퓨터 성능은 약 18개월마다 두 배에 가깝게 향상되었고 현재 데스크탑 컴퓨터를 이용하여 수백만의 원자들을 해석할 수 있음에도 불구하고, 실제 원자구조를 정확하게 해석 하는 데에는 적어도 100억 개 정도의 원자가 필요한 것이 사실이다. 간단히 말해, 너무나도 작은, 또 분자들로 나타내기엔 너무 큰 이와 같은 시스템은 기존의 연속체 방법으로 모

사하기가 불가능하다 할 수 있다. 따라서 이러한 종류의 문제점을 해결하기 위해 다중스케일 방법이 시급하게 필요한 것이다.

다중스케일 모델링의 현황

다중스케일 방법은 일반적으로 한 스케일에서의 길이 더 큰 길이 스케일을 갖는 재료에 적용시켜 사용하는 것을 의미하며 이러한 방법은 '계층' 과 '공존' 두 가지 범주로 나눌 수 있다. '계층적 다중스케일 방법' 은 직접적으로 작은 길이 스케일의 정보를 약간의 평균화 작업을 통해 더 큰 스케일을 갖는 모델에 적용하는 것이다. 탄소계수가 이러한 다중스케일 방법의 좋은 예이다: 구조적 재료의 강성은 구조 내의 모든 결함(defect) 및 마이크로·나노스케일의 구조적 특징이 어우러져 하나의 수치로 도출되게 된다. 한편 '공존적 다중스케일 방법' 에서는 이러한 다중스케일 현상 해석을 동시에 수행할 수 있다. 이 방법에서는 작은 스케일에서의 정보들이 계산된 후 다른 큰 스케일로 즉시 대

입된다. 여기서 우리는 지난 10년 간 많은 관심을 받아 온 공존적 다중스케일 방법에 대해 살펴보고자 한다.

미소스케일의 CAE가 유한요소 해석방법으로 가능해진 것과 같이 다중스케일 해석은 설계에 효과적으로 사용될 수 있다. 다중스케일 해석에 대한 가능성은 새로운 나노스케일의 장치를 개발하는 데 큰 도움이 될 것이라 기대하고 있다. 좀 더 구체적으로 이야기하자면, 다음 세대의 CAE 소프트웨어는 설계 및 공정을 위한 CAE의 기본적인 라인업에 나노 및 마이크로 구조에 대한 고려가 포함될 것이라 믿고 있다. 이러한 목표를 위해서는 재료 설계를 가상의 공정 과정으로 통합하는 예측적인 다중스케일 모델의 개발이 반드시 필요하다 할 수 있다. 이러한 다중스케일 모델들을 완벽히 고려하기 위해서는 재료 내 결함의 자연적인 통계적 가능성을 포함해야 하고, 공정 및 모델링 과정에서의 불규칙성에 대한 분석이 동반 되어야 한다.

그림 1은 실생활에서 마이크로 구조의 강화성을 보여주는 예로, 철은 서로 다른 단위 스케일의 복잡한 변형을 통한 기계적 특성을 보이게 된다. 이러한 구조적

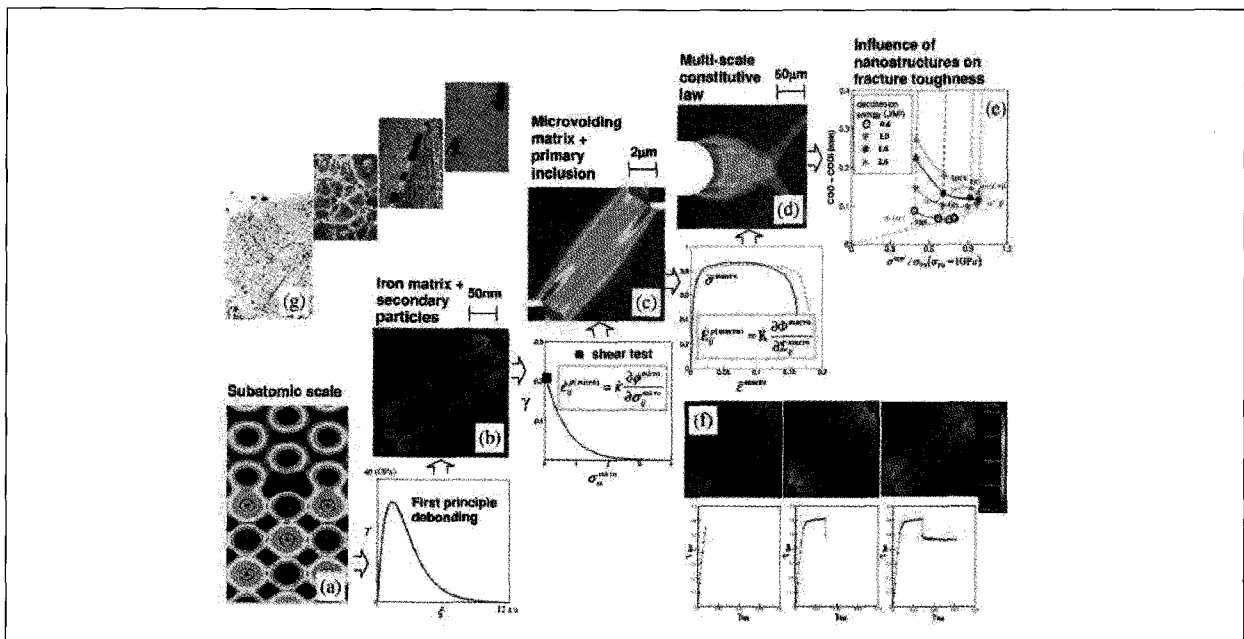


그림 1 철의 계층적 모델링. 나노스케일에서 마이크로스케일에 이르기까지 다양한 상호작용에 의해 철의 기계적 특성이 결정된다. (W.K. Liu, E.G. Karpov, S. Zhang, H.S. Park, "An introduction to computational nanomechanics and materials", Comput. MethodsAppl. Mech. Engrg., 193, 1529-1578, 2004)

인 특성은 이물질, 2차 상의 입자들, 결정 사의 상호작용에 의해 나타난다. 이러한 이물질들의 상호작용은 나노 사이즈부터 마이크로 사이즈에 이르며 이물질은 계면부리 등에 의해 응집 및 결합을 제거하려 하거나 계면을 조절함으로써 항복이 일어난 이후에 강도를 증가시킨다. 따라서, 철의 기계적 성질은 서로 다른 스케일 영역에서 각각 지배하는 강도 및 인성들간의 경쟁에 의해 결정되게 된다. 지금까지 철의 거시적인 기계적 성질을 표현하기 위해 다중스케일 모델링 기법에서는 매우 작은 단위 스케일로부터의 평균적인 성질을 사용하여 계층적으로 모델 된다는 것을 강조하였다. 그러나 이는 원자단위부터 연속체단위에 이르는 큰 스케일의 격차를 메조 스케일 정도로 심각하게 생략하는 과정 없이는 현재까지 불가능하다. 따라서 재료설계 및 고체역학 분야에 있어 이러한 원자단위로부터 연속체단위에 이르는 다중스케일 모델링은 엄청난 도전이 수반되는 분야라 할 수 있다.

나노-바이오 시스템에서도 역시 다중스케일 메커니즘을 확인할 수 있다. 심장과 관련된 동맥들, 정맥들, 판막들과 피는 연속체 베이스의 고체 및 유체역학에서 가장 작은 스케일로서 심장을 탄성체로 나타내는데 이용할 수 있다. 두 번째 스케일은 혈관 스케일로, 혈관벽의 특성과 혈관 벽에서의 혈관 침작 현상은 서로간의 상호작용에 의한 결과로 나타난다. 세 번째 스케일은 세포 단위의 스케일로, 적혈구, 백혈구, 혈소판뿐만 아니라 이러한 세포들의 상호작용까지 고려하게 된다. 이러한 작은 스케일에서, 혈액은 non-Newtonian 모델로 해석되어야 한다. 이러한 생체 내 시스템에서 생체 섬유, 초점 접착(focal adhesion) 복합체들은 가장 작은 스케일로 세포 이하의 스케일로서 분자동역학이나 다른 복합적인 방법들을 이용하여 연구되고 있다. 나노-바이오 시스템 분야에서 다중스케일 모델링의 목표는 세포 조작력(cellular force) 및 세포의 흡착과 같은 세포 거동 및 역학의 이해를 통해 혈관 내의 혈류, 혈관 내에서 세포와 단백질 간의 침작으로 인해 생기는 심장마비와 같은 현상을 보다 명확하게 이해하는 것이다. 이러한 세포간의 상호작용에 대한 이해는 전산 모

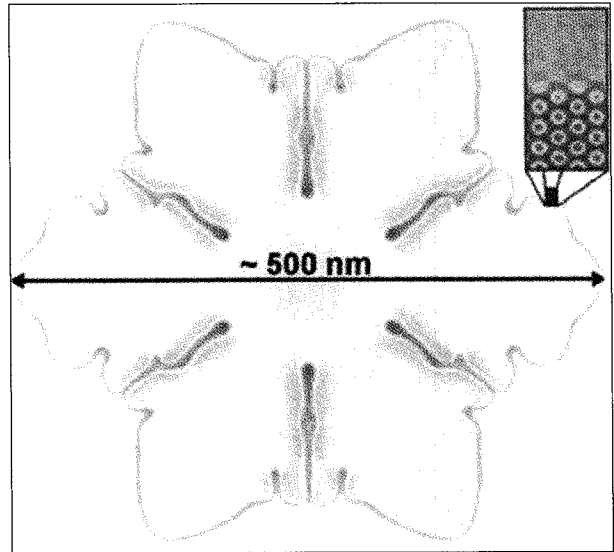


그림 2 6각 수지결정상의 등은 응결 결정 모습. 우측상단의 사진은 결정 끝단에서 원자 확률 밀도가 경계영역을 구분하고 있음을 보여준다. (N. Provatas, K.R. Elder et. al, "Using the phase field crystal method in the multi-scale modeling of microstructure evolution", J.O.M., 59(7), 83-90, 2007)

델링 기법의 발전을 야기할 수 있으며 이를 통해 암세포의 전이를 늦추는 정확한 처방을 제시하는 것과 같은 역할을 할 수도 있다.

한편, 최근 개발된 Phase Field Crystal (PFC) 모델은 기존 메조 스케일에 머물던 Phase Field 기법에서 벗어나 원자스케일까지 고려할 수 있으며 분자동역학에 비해 상당히 큰 시간 단위를 고려할 수 있어 많은 주목을 받고 있다. 그림 2는 PFC 모델을 통해 등온으로 응결된 6각 수지결정상 해석 양상을 보여주고 있으며, 이는 이상(binary)의 합금성형의 대칭적인 공용 혼합물 상변화 과정과 상응한다. 그림 내의 작은 그림은 결정상 끝단에서 원자확률 밀도(atomic probability density)를 보여준다. 그림 내의 삽도에서 보여주는 바와 같이 밀도 변동의 감되는 원자스케일의 고체-액체간의 경계영역을 정의하게 된다.