

OCTA 를 이용한 폴리머 재료의 다중 스케일 해석

김재현[†] · 최병익* · 김정엽*

Multi-scale analysis of polymeric materials using OCTA

Jae Hyun Kim, Byung-ik Choi and Jung-yup Kim

Key Words : OCTA, polymer(폴리머), Multi-scale analysis(다중 스케일 해석)

Abstract

Nanometer-sized structures are being applied to many fields including micro/nano electronics, optoelectronics, quantum computing, biosensors, etc. Multi-scale analysis technology is required for designing the reliable nanometer-sized structures and predicting their mechanical, chemical and electronic behaviors. In this paper, some techniques for multi-scale analysis are reviewed and their applicability and limitation are discussed. Research activity of nano process analysis team in KIMM is outlined. Especially, we concentrate on OCTA of Nagoya University in Japan for the analysis of polymeric materials. Detailed structure of OCTA is described and some examples are presented.

1. 서 론

전자 공학 분야에서의 급격한 발전으로 인해 점점 작은 구조물을 제작할 필요성이 계속적으로 발생하고 있다. 지난 수십 년간 전자 공학 분야에 적용되어온 Moore's law 에 의하면, 수년 내에 나노미터 크기의 특성길이를 가지는 구조물을 이용하여 소자가 제작될 것이 예견되고 있다[1]. 나노 기술은 이러한 나노 구조물을 생성, 조작, 응용하는 기술로 요약될 수 있는데, 전자 공학 분야뿐만 아니라 광전자공학(optoelectronics) 분야, 양자 계산(quantum computing) 분야, 바이오 센서(biosensor) 분야 등에 다양한 응용성을 가질 것으로 예견되고 있다[2]. 이러한 나노 기술의 발전과 영향력 증대를 위해서는 나노 구조물에 대한 해석 기술이 필수적이다. 나노 구조물은 기존에 사용되어온 재료 거동 해석 기술을 그대로 적용할 수 없고, 여러 길이/시간 스케일에서의 해석 기술을 연계하여 적용해야 할 필요성이 있다[3]. 이는 나노 구조물에, 원자 나 분자 레벨의 계산이 필요한 부분과 연속

체 계산이 필요한 부분이 공존하기 때문이다.

나노 구조물의 다중 스케일 해석 기술은 여러 분야의 전문가가 협력하여, 서로 다른 분야에서 개발되어 온 해석 기술들을 통합/연계하는 작업이 매우 중요하다. 특히, 기계, 물리, 화학, 수학, 전산, 재료 등의 전문가가 함께 협력할 필요성이 있으며, 길이 스케일에 따라 발생하는 다양한 물리 현상의 모델링과 길이 스케일 간의 연관을 위한 수학적 접근법 개발, 방대한 계산 작업 수행을 위한 병렬화 작업과 보다 빠른 계산 알고리즘의 개발 등의 연구가 필요한 상황이다[3]. 이러한 상황에서 2002년 가을부터 시작된 21세기 프론티어 사업 “나노 메카트로닉스 기술 개발 사업”에서 나노 구조물의 다중 스케일 해석 기법을 다루게 된 것은 매우 고무적인 일이다. 현재 나노 메카트로닉스 기술의 중요한 타겟 중에 하나는 폴리머 재료를 이용한 나노 imprint 기술을 개발하는 것이다. 나노 imprint 기술은 기존의 리소그래피(lithography)로는 제작할 수 없는 나노 구조물을 imprint 기술을 응용하여 제작하는 것으로서, 이러한 기술 개발에는 폴리머 나노 구조물의 해석 기술 개발이 절실하다.

[†] 한국기계연구원 구조연구부 마이크로응용역학그룹
E-mail : jaehkim@kimm.re.kr
TEL : (042)868-7550 FAX : (042)868-7884

* 한국기계연구원 구조연구부 마이크로응용역학그룹

본 논문의 목적은 나노 구조물의 다중 스케일 해석 기술에 대한 전반적인 검토를 통하여, 나노 imprint 기술 개발에서 요구되는 폴리머 나노 구조물에 적절한 해석 기법을 선정하고, 그 한계와 앞

으로의 발전 방향을 제시하는 것이다. 특히 OCTA 를 이용한 한국기계연구원의 나노 해석 기술 팀의 연구 내용과 앞으로의 연구 방향을 소개한다.

본 논문은 먼저 문헌 상에 나타난 몇 가지 다중 스케일 해석 기술에 대한 검토 내용을 제시하고, 폴리머 나노 구조물의 다중 스케일 해석에 적절한 도구로서 일본 나고야 대학의 OCTA 를 소개한다. OCTA 를 이용한 해석 예를 제시하고, OCTA 의 한계와 앞으로의 연구방향을 검토한다.

2. 다중 스케일 해석 기술

2.1 다중 스케일 해석 기술의 개요

기존의 재료 거동 해석 기술은 고유한 해석 스케일을 가진다. 예를 들어 유한 요소 해석법과 같은 연속체 해석 기법은 구조물의 크기가 수 밀리미터 이상인 대상에 주로 적용되며, 연속체 가정에 근거한 구성 방정식을 이용하여 재료의 거동을 모사한다. 반면에 물리나 화학 분야에서 많이 사용되는 DFT (Density Functional Theory) 방법은 양자역학에 기초하여 재료의 전자 구조나 접착 에너지 등을 계산하는 방법으로서 수 나노미터 이하의 대상에 적용이 가능하다[4].

현재 많은 관심의 대상이 되고 있는 나노 기술은 나노 미터 크기의 구조물을 조작하여 새로운 제품을 제조하는 기술이다. 나노 기술을 이용하여 제품을 설계, 제작, 평가하기 위해서는 나노 구조물에 대한 해석 기술이 필요하지만, 기존의 재료 거동 해석 기술은 이러한 영역에서 더 이상 적용되기가 어렵다. 나노 구조물에서는 연속체 가정이 성립하지 않기 때문에, 연속체 가정에 근거한 유한 요소법이나 유한 차분법 등의 방법은 적용될 수가 없다. DFT 나 MD (Molecular dynamics), MC (Monte Carlo) 등의 방법은 나노 구조물에 적용하기에는 너무 많은 계산량을 필요로 한다. 따라서, 서로 다른 길이 영역에서 각각 적용되어온 재료 거동 해석 기법들을 연관시켜서 나노 구조물에 적용하는 다중 스케일 해석 기법이 요구된다.

2.2 다중 스케일 해석 기술의 종류와 적용범위

여기서는 문헌상에서 발견할 수 있는 몇 가지 다중 스케일 해석 방법을 살펴보고, 각각의 원리와 적용 범위 등을 기술한다. 먼저 *ab initio* 방법과 분자동역학 방법을 연계한 Car-Parrinello 방법을 살펴본다. 그 다음, Quasi-continuum 방법, Coarse grained dynamics 방법, Lattice Boltzmann 방법, Dissipative particle dynamics 방법을 차례대로 살펴본다.

Car-Parrinello 방법[5]은 *ab initio* 분자동역학의 대표적인 방법으로서, *ab initio* 방법과 분자동역학 사이에 길이/시간 스케일 차이를 연결하는 방법이다. 일반적인 분자동역학에서는 실험적인 원자 포텐셜을 이용하여 분자 또는 원자간의 동역학 문제를 해결하지만, 이 방법은 실험적인 원자 포텐셜 대신 *ab initio* 방법으로 전자의 파동함수를 계산하고, 이로부터 Hellmann-Feynman Theorem 을 이용하여 원자 간에 작용하는 힘을 구하여 원자의 운동을 계산한다.

Tadmor, Ortiz, Phillips 의 Quasi-Continuum 방법[6]은 원자 단위 해석 영역과 연속체 단위 해석 영역 사이의 길이 차원을 자연스럽게 연결해주는 (seamless bridging) 계산 기법 중 하나이다. 이 기법은 원자 단위로 조밀하게 묘사된 재료의 거동을 운동학적인 제한 조건 (kinematic constraint)을 사용하여 점차 덜 조밀한 묘사방법으로 체계적으로 대체해 가는 과정을 포함한다. 격자 결함(lattice defect)과 같이 조밀하게 기술해야 할 부분에서는 원자 단위의 조밀한 묘사 방법이 유지되도록 하고, 변형장이 거의 변화하지 않는 영역에서는 많은 수의 원자들을 묶어서 다룬다.

분자동역학(Molecular Dynamics)은 재료 시스템의 미세 구조나 거동을 연구하는 데에 강력한 도구이지만, 폴리머와 같이 분자량이 크고 복잡한 구조를 가지는 분자를 다루기에는 적합하지 않다. 이러한 복잡한 분자들에 대한 특성 시간 단위 (characteristic length scale)는 분자동역학으로 다룰 수 있는 작은 분자들의 시간 단위보다 매우 크다. Coarse Grained Dynamics 는 분자동역학이 가지는 이러한 시간 단위의 한계를 극복하는 데에 유용하다[7-9]. 일반적인 분자동역학에서는 각각의 질점 (mass point)이 하나의 원자를 나타내지만, 이 방법에서는 원자들의 집합(group)을 나타낸다. Coarse Grained Dynamics 에서도 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.

Lattice Boltzmann 방법[10,11]은 Boltzmann 방정식에 기초한 수치 계산 기법이며, 복잡한 형상 속에서 단일상(single phase) 또는 다중상(multi phase)의 유체에 관련된 여러 가지 유동문제를 해결하는 방법이다. 이 방법은 유체를 particle 의 집합으로 다루며, 각 grid 점에서 유체의 속도 분포 함수를 이용하여 particle 들을 표현한다. 유체 particle 들은 가해진 외력하에서 운동하면서 서로 충돌할 수 있고, 충돌하는 particle 들의 시간 평균 운동은 Navier-Stokes 방정식을 만족하도록 구속을 가한다. 이 방법은 원자 포텐셜을 이용하여 원자나 분자의

운동방정식을 다루는 분자 동역학과 편미분형태의 지배방정식을 다루는 연속체역학 사이에 존재하는 방법으로 이해할 수 있다.

3. OCTA 의 개요 및 구조

3.1 OCTA 프로젝트

OCTA 는 “Open Computational Tool for Advanced material technology”의 약자로서, 폴리머와 같은 soft material 에 대한 다중 스케일 해석 환경이다. 1997 년에 제안되었으며, 1998 년부터 2002 년까지 일본의 나고야 대학을 중심으로, 산업계, 학계, 정부가 참여하여 개발하였다. 이 OCTA 프로젝트의 목적은 재료의 분자 레벨 특성과 재료의 거시적인 특성 사이를 연관시키는 컴퓨터 시뮬레이션 시스템의 구축하는 것이고, 폴리머, 콜로이드(colloid), 겔(gel) 등과 같은 연질 재료(soft material)에 초점을 맞추었다[12].

3.2 OCTA 의 구조

OCTA 는 몇 가지 시뮬레이션 엔진(simulation engine)과 사용자 인터페이스(user interface), UDF(User Definable Format) 파일로 이루어져 있다.

시뮬레이션 엔진에는 COGNAC, PASTA, SUSHI, MUFFIN 의 4 가지가 있다[12]. COGNAC 은 폴리머 모델에 대한 분자동역학 계산을 수행한다. PASTA 는 reptation dynamics 와 dual slip-link 모델을 이용하여 폴리머의 rheology 특성을 모사한다. SUSHI 는 Edwards 의 self-consistent field 방정식을 해결하여 상분리(phase separation)나 표면 효과에 의한 폴리머 구조를 계산한다. MUFFIN 은 폴리머에서 나타나는 편미분방정식을 해결하는 엔진으로서, 상분리, electrolyte dynamics, 전기장 하에서 micro-fluidics, 고체의 탄성 변형, 겔의 변형을 다루는 5 개의 프로그램으로 구성된다.

사용자 인터페이스는 앞에서 나열한 4 개의 시뮬레이션 엔진을 동일한 환경으로 지원할 수 있도록 설계되었으며, 각 엔진들이 다루는 다양한 개념들과 물리량을 조작할 수 있는 Python 프로그래밍 환경을 포함하였다. 이 사용자 인터페이스는 GOURMET (Graphical Open User interface for Material design EnvironmenT)으로 불리우며, 시뮬레이션 엔진들이 사용하는 입력 파일을 조작하거나 계산 결과를 도시할 수 있는 편집 및 그래픽 기능이 있다.

마지막으로 UDF(User Definable Format) 파일은 시뮬레이션 엔진을 구동하는 데이터가 들어있는 입력 파일로서, 한 파일에 데이터와 그 데이터의

정의가 함께 들어가는 구조로 되어있다. 이 파일을 사용하여, 사용자가 자신만의 형식으로 데이터를 정의하고 사용하는 것이 가능해진다.

3.3 OCTA 를 이용한 다중 스케일 해석

OCTA 의 개발자들은 프로그램 개발 초기부터 다중 스케일 해석에 대한 필요성을 이해하고, OCTA 가 이러한 다중 스케일 해석에 유용한 도구가 되도록 노력하였다. 이들은 각각의 적용 스케일을 가지는 시뮬레이션 엔진들을 개발하면서, 몇 가지 스케일 간의 연결을 가능케 하는 알고리즘을 제안하고 있다. 이들이 제안하는 알고리즘은 대부분 하나의 시뮬레이션 엔진에서 계산된 결과를 이용하여 그 다음 스케일에 적용이 가능한 시뮬레이션 엔진을 구동하는 방법으로서, Tadmor 등[6]이 제안한 Quasi-continuum 방법에 비하여 덜 정교한 방법으로 볼 수 있다. 앞으로 OCTA 를 이용한 보다 정교한 다중 스케일 해석 방법에 대한 연구가 필요할 것이다.

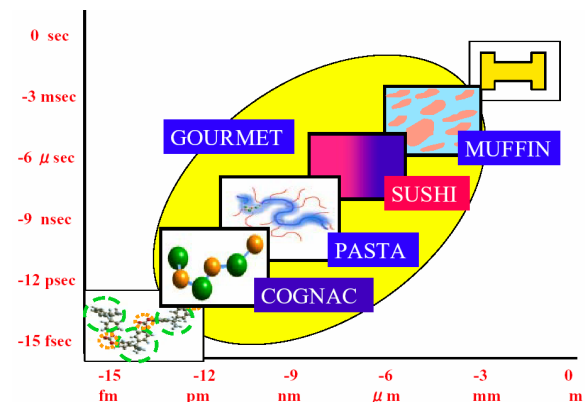


Fig. 1 Length and time scales of simulation engines[12]

4. 폴리머의 분자동역학 해석

OCTA 를 이용한 폴리머 재료의 거동 해석 예로서, 두 종류의 homopolymer 의 blend 에 대한 분자동역학 해석을 살펴본다. 폴리머 blend 에는 일정한 두께로 서로 다른 폴리머와 중첩되는 영역이 존재한다. 이 계면 영역은 폴리머의 분자량, miscibility, 분자량 분포 등과 같은 여러 가지 요인들에 따라 변화하게 되며, 폴리머 혼합물의 응력-변형을 곡선과 같은 재료의 기계적 특성에 큰 영향을 미친다. 여기서는 두 종류의 폴리머로 이루어진 폴리머 blend 에 대하여 분자동역학 해석을 수행하고, 계면 영역과 폴리머 blend 의 특성 사이의 관계를 살펴본다.

4.1 폴리머 모델

폴리머의 분자동역학 해석[12-16]을 위하여 Grest 와 Kremer 의 bead-spring 모델을 사용한다. 수식의 편의를 위하여 길이, 질량, 에너지에 대한 단위량을 σ , m , ε 으로 표현한다. 이러한 양들은 폴리머의 종류에 따라 다른 값으로 표현된다. 두 종류의 homopolymer 로 이루어진 폴리머 혼합물에서 서로 다른 bead 간의 상호 작용 퍼텐셜은 다음과 같은 Lennard-Jones 형태를 사용한다. 두 bead 사이의 거리 r 이 r_{cut} 보다 큰 경우에, 상호작용 퍼텐셜은 0 이고, r_{cut} 보다 작은 경우에는 다음과 같다.

$$U_{ij} = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{cut}} \right)^{12} + \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{cut}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

여기서 i 와 j 는 bead type (A 와 B)를 나타내고, ε_{ij} 와 σ_{ij} 는 Lennard-Jones 매개변수, r_{cut} 는 cutoff 거리이다. r_{cut} 는 bead 간의 상호 작용 종류에 따라 다르게 설정할 수 있다. 여기서는 서로 연결된 bead 간에는 $r_{cut} = 2^{1/6}\sigma$ 으로, 연결되지 않은 bead 간에는 $r_{cut} = 2.5\sigma$ 으로 가정하였다. σ_{ij} 는 bead 종류에 상관없이 $\sigma_{AA} = \sigma_{BB} = \sigma_{AB} = 1.0\sigma$ 로 가정하였다. 에너지 상수 ε_{ij} 는 동일 bead 에서는 $\varepsilon_{AA} = \varepsilon_{BB} = 1.0\varepsilon$, 다른 bead 사이에서는 $\varepsilon_{AB} = \varepsilon + \delta\varepsilon$ 으로 가정하였다. $\delta\varepsilon$ 의 절대값이 커지면, bead A 와 bead B 사이의 miscibility 는 감소하고 계면 영역의 두께는 더 얇아진다.

같은 폴리머 체인 내에 있는 bead 간에는 다음과 같은 상호작용 에너지를 가정한다.

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{1}{2}kR_0^2 \ln \left[1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^2 \right], & r \leq R_0 \\ \infty, & r > R_0 \end{cases} \quad (2)$$

여기서 $k = 30.0\varepsilon/\sigma^2$ 는 스프링 상수이고 $R_0 = 1.5\sigma$ 는 스프링의 최대 신장 거리이다.

4.2 계산 기법

계산에는 NVT ensemble 을 사용하였으며, 운동 방정식으로는 다음과 같은 Langevin 방정식을 사용하였다.

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_n}{dt^2} = \mathbf{F}_n - \Gamma \frac{d\mathbf{r}_n}{dt} + \mathbf{W}_n(t) \quad (3)$$

여기서 m 은 bead 의 질량, \mathbf{r}_n 과 \mathbf{F}_n 은 각각 n 번째 bead 의 위치와 그에 작용하는 힘, Γ 는 마찰 상수, $\mathbf{W}_n(t)$ 는 Gaussian white noise 항이다. 이 운

동방정식은 velocity Verlet 알고리즘을 이용하여 시간에 대한 적분을 수행함으로써 해결된다. 경계조건은 경계면(interface)에 수직인 방향(z 방향)으로는 밀려진 반사(staggered reflective) 조건[12]을, 경계면에 평행한 두 방향 (x, y 방향)으로는 주기(periodic) 조건을 주었다.

폴리머 blend 의 기계적 거동을 모사하기 위하여 폴리머 체인으로 구성된 unit cell 은 일정 속도로 인장 또는 수축된다. 변형 시에는 unit cell 속에 포함된 모든 bead 를 정해진 양만큼 affine 변환을 수행하고, 10 번의 time step 동안 운동 방정식을 적분함으로써 평형상태에 도달하도록 한다.

모든 계산은 나고야 대학에서 개발한 OCTA 의 시뮬레이션 엔진 중에서 COGNAC 을 이용하여 수행되었다.

4.3 초기 구조의 생성

계면에서 폴리머 체인의 초기 구조는 DBMC (Density Biased Monte Carlo)를 이용하여 생성되었다. DBMC 는 SUSHI 를 이용하여 계산된 체인 내의 segment 의 공간적인 분포와 Monte Carlo 기법을 통해 폴리머 체인의 초기 구조를 생성하는 방법으로써, COGNAC 내에 구현되어있다[12,13]. SUSHI 해석 결과를 이용하여 폴리머 체인의 초기 구조를 생성하고, 이를 이용하여 분자동역학 계산을 수행하는 과정은 다중 스케일 해석의 한 예로 볼 수 있다. 다음 장에서는 이에 대한 자세한 기술이 이루어진다.

5. 다중 스케일 문제의 해석

5.1 문제의 정의

다중 스케일 해석이 필요한 문제는 여러 종류가 있지만, 재료의 미시 구조와 미시적 특성으로부터 재료의 거시적 거동을 예측하는 문제, 미시적인 구조물과 거시적인 구조물이 동시에 존재하는 문제의 해석, 거시적인 구조물에 존재하는 미시적인 결함 거동 분석 문제 등이 대표적인 예가 된다. 여기서는 나노 패턴 제조 공정 중의 하나인 나노 imprint 공정에서 사용되는 폴리머 blend 를 대상으로, 미시적인 특성을 이용하여 거시적인 변형 거동을 해석하고자 한다.

나노 imprint 공정은 수정(quartz)이나 실리콘, 실리콘 옥사이드로 만들어진 마스터(master)를 이용하여 폴리머 틀(mold)를 제작하고 이로부터 나노 패턴은 원하는 대상에 전사하는 방법이다. 이 때에 사용되는 폴리머 재료의 기계적인 특성에 따라 형성되는 나노 패턴의 해상도(resolution)와 신뢰성

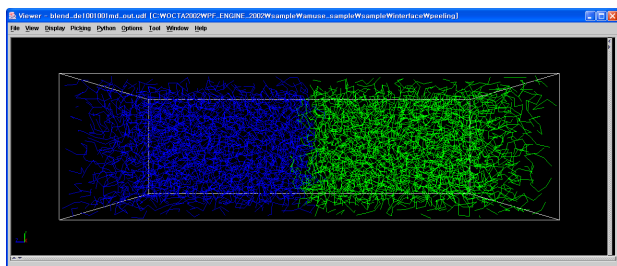
(reliability)이 결정된다.

여기서는 두 종류의 폴리머(A 와 B 타입)로 이루어진 폴리머 blend 에 대하여 상호작용 패러미터에 따라 폴리머 blend 의 응력-변형을 관계를 모사한다. 앞 장에서 설명된 Lennard-Jones 포텐셜의 상호작용 에너지 패러미터 ($\epsilon_{AB} = \epsilon + \delta\epsilon$)의 $\delta\epsilon$ 이 -0.1ϵ 일 때와 -0.2ϵ 일 때를 분자동역학을 이용하여 해석한다. 단위 셀(cell)은 OCTA 의 예제를 이용하였으며, 직육면체 형태로 $14\sigma \times 14\sigma \times 48\sigma$ 의 크기이고, $0.01\sigma/\tau$ 의 속도로 인장된다[12].

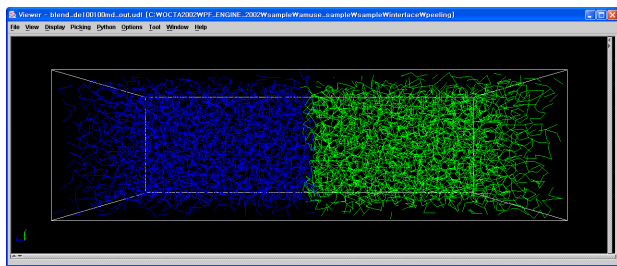
5.2 초기 구조 형성을 위한 다중 스케일 해석

두 종류의 폴리머가 blend 를 형성하는 경우에 분자동역학 해석의 난제는 계면(interface)에서의 초기 구조 형성이 어렵다는 점이다. OCTA 에서는 mean field theory 를 이용하여, 계면에서 두 종류의 폴리머 segment 의 density 분포를 계산하고 이것을 이용하여 분자동역학 해석을 위한 초기 구조를 형성하는 방법을 제안하였다[12,13].

SUSHI 를 이용한 mean field theory 계산에서는, 조밀한 폴리머 시스템에서의 다물체(many body) 상호작용문제가 평균 포텐셜 내에 존재하는 독립적인 폴리머의 문제로 간략화된다. 따라서 SUSHI 를 이용하여 계면을 포함하는 폴리머 blend 에 대하여, 자유 에너지(free energy)가 최소화되는 폴리머의 밀도 분포를 계산할 수 있다. 이 밀도 분포를 이용하여 DBMC(Density Biased Monte Carlo) 기법을 적용하면, 계면을 포함하는 폴리머 blend 의 체인 구조가 형성되며 이는 COGNAC 계산의 초기 구조로 사용될 수 있다.



a) $\delta\epsilon = -0.1\epsilon$



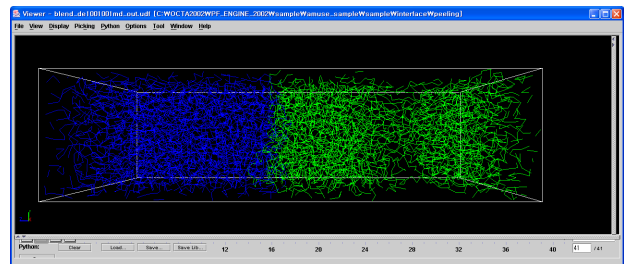
b) $\delta\epsilon = -0.2\epsilon$

Fig. 2 Initial structures of polymer blend

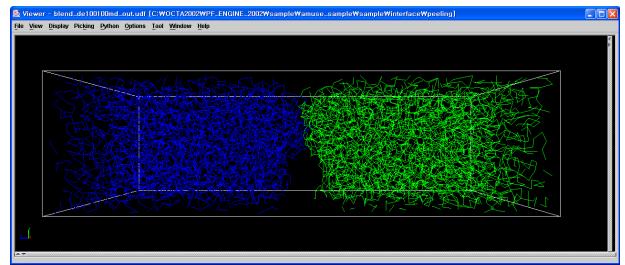
Figure 2 에 제시된 그래프를 자세히 비교해 보면, (a) 그래프의 계면 영역보다 (b) 그래프의 계면 영역이 더 얇은 것을 알 수 있다. 이는 상호작용 에너지의 절대값이 더 클수록 두 폴리머 사이의 miscibility 가 작아져서, 계면 영역이 더 얇아진다는 물리적인 이해와 일치하는 결과이다.

5.3 해석 결과

COGNAC 을 이용하여 두 가지 시스템의 폴리머 blend 에 대한 NEMD (Non Equilibrium Molecular Dynamics) 해석을 수행하면, Fig. 3 과 같은 최종 변형 형상을 얻을 수 있다. 계면 영역이 더 두꺼운 (a) 폴리머 blend 의 경우는 계면에서 박리가 일어나지 않고, 한쪽 폴리머의 내부에서 일어나는 것을 볼 수 있다. (b) 폴리머 blend 의 경우처럼 계면 영역이 얇은 경우에는 계면에서 박리가 일어나는 것을 알 수 있다.



a) $\delta\epsilon = -0.1\epsilon$ (When the strain is 0.08)



b) $\delta\epsilon = -0.2\epsilon$ (When the strain is 0.04)

Fig. 3 Deformed structures of polymer blend

폴리프로필렌(polypropylene)의 Lennard-Jones 포텐셜 패러미터로부터 $\sigma = 0.4678\text{ nm}$, $m = 71.423 \times 10^{-27}\text{ kg}$, $\epsilon = 2.003\text{ kJ/mol}$ 을 얻을 수 있다[16]. 이로부터 계산결과를 실제 물리량으로 환산하여 응력-변형을 곡선을 그리면, Fig. 4 와 같은 그래프를 얻을 수 있다. 두 그래프를 비교해 보면, 계면에서 박리가 일어나는 (b) 그래프의 최대 응력이 계면 박리가 일어나지 않는 (a) 그래프의 최대 응력보다 작은 것을 알 수 있다. (a) 그래프에 나타난 최대응력은 28.6MPa 이며, (b) 그래프에서 나타난 최대응력은 23.4MPa 이다.

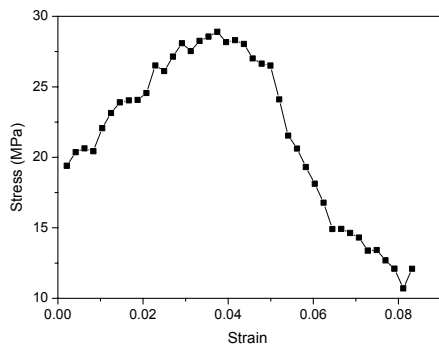
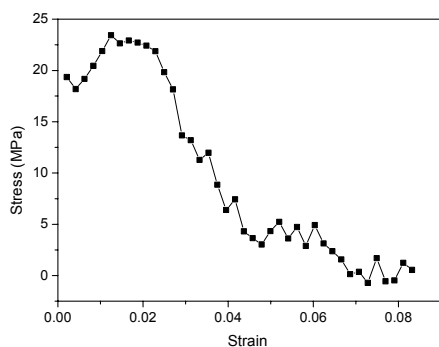
a) $\delta\epsilon = -0.1\epsilon$ b) $\delta\epsilon = -0.2\epsilon$

Fig. 4 Stress vs. strain curves of polymer blend

6. 요약 및 결론

본 논문에서는 나노 메카트로닉스 기술 개발 사업에서 나노 공정 해석 기술을 담당하고 있는 한국기계연구원의 연구 활동을 소개하였다. 나노 구조물 해석에 필요한 다중 스케일 해석 기술에 대한 동향을 분석하고, 현재까지 개발된 여러 가지 다중 스케일 해석 기술의 개요와 적용성을 살펴보았다. 특히 폴리머 재료의 다중 스케일 해석에 초점을 맞추어, 일본 나고야 대학에서 개발하고 있는 OCTA 프로그램을 소개하였다. OCTA 를 이용한 예제로서 나노 imprint 공정에 사용될 폴리머 재료의 기계적 물성을 모사하는 다중 스케일 해석 결과를 제시하였다. 해석 결과로부터 폴리머 blend 에 있어서 상호 작용 에너지와 계면 영역, 그리고 기계적 물성간의 상관 관계를 확인할 수 있었다. Tadmor 등[6]이 사용한 방법과 비교할 때 OCTA 의 다중 스케일 연결 기법은 아직도 보완될 부분이 많이 있는 것으로 보이며, 이에 대한 추가 연구가 필요할 것이다.

후 기

본 연구는 21 세기 프론티어연구개발사업인 나노메카트로닉스기술개발사업단의 연구비 지원(02-K14-01-012-3-0)에 의해 수행되었습니다.

참고문헌

- (1) NSTC, 2000, "National nanotechnology initiative".
- (2) 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.
- (3) McCurdy, C.W., Stechel, E., Cummings, P., Hendrickson, B. and Keyes, D., 2002, "Theory and modeling in nanoscience," Report of the workshop.
- (4) 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.
- (5) Car, R. and Parrinello, M., 1985, "Unified approach for molecular dynamics and density functional theory," Physical Review Letters 55, pp. 2471-2474.
- (6) Tadmor, E.B., Ortiz, M., and Phillips, R., 1996, "Quasicontinuum analysis of defects in solids," Philosophical Magazine A Vol. 73, pp. 1529-1563.
- (7) Rudd, R.E. and Broughton, J.Q., 1998, "Coarse-grained molecular dynamics and the atomic limit of finite elements," Physical Review B Vol. 58, pp. 5893-5896.
- (8) 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.
- (9) Curtarolo, S. and Ceder, G., 2002, "Dynamics of an inhomogeneously coarse grained multiscale system," Physical Review Letters Vol. 88, 255504.
- (10) Succi, S., 1997, "Lattice Boltzmann equation: failure or success?," Physica A Vol. 240, pp. 221-228.
- (11) 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 Vol. 230, pp. 263-269.
- (12) <http://OCTA.jp>
- (13) Aoyagi, T., Honda, T., and Doi, M., 2002, "Microstructural study of mechanical properties of the ABA triblock copolymer using self-consistent field and molecular dynamics," Journal of chemical physics Vol. 117, No. 17, pp. 8153-8161.
- (14) Gao, J., and Weiner, J.H., 1994, "Monomer-level description of stress and birefringence relaxation in polymer melts," Macromolecules Vol. 27, pp. 1201-1209.
- (15) Gao, J. and Weiner, J.H., 1995, "Simulated polymer melt stress relaxation. I. plateau behavior," Journal of chemical physics Vol. 103, No. 4, pp. 1614-1620.
- (16) Soule, A.D., Smith, C.A., Yang, X. and Lira, C.T., 2001, "Adsorption modeling with the ESD equation of state," Langmuir Vol. 17, pp. 2950-2957.