

그림 13 양자점들의 모양 변화에 관한 유한요소 해석 [Zhang, 2000]

되는 과정을 해석하는 등 몇 가지 사례가 있다.(그림 13)

맺음말

이상 양자 이종구조에 대하여 고체역학적 관점에서 간략히 살펴 보았다. 나노기술을 발전시키기 위해 넘어야 할 가장 큰 장벽 중 하나가 바로 나노스케일에서 재료의 표면에 발생하는 제반 물리현상들을 이해하여야 하는 것이라 할 때, 이와 같은 양자 이종 구조에 관한 연구가 나노기술에서 차지하는 비중은 실험뿐만 아니라 이론적 측면에서도 매우 크다 하겠다. 양자점의 기계적 특성이 전자/광학적 특성과 연계되어 있는 복합 물리적 현상뿐만 아니라, 여러가지 결정 인자들을 모두 고려하는 복잡한 양자점 형성 메커니즘 등에 관한 체계적인 연구가, 기계공학자들이 나노역학, 더 나아가서 나노기술 발전에 크게 공헌할 수 있는 분야라고 생각된다. 끝으로 두 개의 자료에 대해 인용문헌을 밝히지 못했는데, 저자가 오래 전에 자료를 모아둘 때 그 소스에 대한 기록을 제대로 해 두지 않은 불찰로 인한 것이며,

독자의 이해를 구한다.

[참고 문헌]

[1] K. Eberl et al., 2001, "Self-assembling quantum dots for optoelectronic devices on Si and GaAs," *Physica E* 9, 164.
 [2] J. A. Floro et al., 1999, "Evolution of coherent islands in Si_{1-x}Gex/Si(001)," *Phys. Rev. B*, 59, 1990.
 [3] V. Holy et al., 1999, "Strain induced vertical and lateral correlation in quantum dot superlattices," *Phys. Rev. Lett.* 83, 356.
 [4] T. I. Kamins et al., 1999, "Self-aligning of self-assembled Ge islands on Si(001)," *Nanotechnology*, 10, 117.
 [5] O. Leifeld et al., 1999, "In situ scanning tunneling microscopy study of C-induced Ge quantum dot formation on Si(001)," *App. Phys Lett.* 74, 994.
 [6] G. R. Liu and S. S. Quek Jerry, 2002, "A finite element study of the stress and strain fields of InAs quantum dots embedded in GaAs," *Semi-*

cond. Sci. Technol. 17, 630.

[7] A. E. Romanov et al., 2001, "Elastic fields of quantum dots in subsurface Layers," *J. Appl. Phys.* 89, 4523.

[8] V. A. Shchukin and D. Bimberg, 1999, "Spontaneous ordering of nanostructures on crystal surface," *Rev. Mod. Phys.* 71, 1125.

[9] Q. Shen and S. W. Kycia, 1996, "X-ray-diffraction study of size-dependent strain in quantum-wire structures," *Phys. Rev. B*, 54, 16381.

[10] O. Stier et al., 1999, "Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band $k \cdot p$ theory," *Phys. Rev. B*, 59, 5688.

[11] X. Su et al., 2001, "Millionatom molecular dynamics simulation of flat InAs overlayers with self-limiting thickness on GaAs square nanomesa," *Appl. Phys. Lett.* 78, 3717.

[12] D. Vanderbilt and L. K. Wickham, 1991, in *Evolution of Thin-Film and Surface Microstructure*, edited by C. V. Thompson, J. Y. Tsao, and D. J. Srolovitz, MRS Proceedings, 202 (MRS, Pittsburgh), 555.

[13] Y. W. Zhang, 2000, "Self-organization, shape transition, and stability of epitaxially strained islands," *Phys. Rev. B*, 61, 10388.

나노소재의 전산모사

- 장 현 주 | 한국화학연구원 화학소재연구부, 선임연구원
e-mail : hjchang@pado.krict.re.kr
- 엄 윤 용 | 한국과학기술원 기계공학과, 교수
e-mail : yyeammme@kaist.ac.kr

이 글에서는 나노소재 있어서 전산모사의 방법들을 소개하고 나노소재의 전산모사 방법으로서 multiscale simulation에 대하여 소개한다.

차세대 기술로 여겨지는 나노 기술의 기반을 이루는 나노소재는 그 특성이 기존의 소재와는 매우 달라, 그 응용의 범위가 정밀 화학 분야뿐만 아니라 재료과학, 기계공학 등의 광범위한 분야에 걸친다고 할 수 있다. 나노소재는 그 크기가 나노미터(10^9m) 스케일의 소재를 모두 일컬으며, 나노기공, 나노분말, 나노박막 소재 등을 포함한다. 이러한 나노소재의 경우 부피 대 면적비가 기존의 소재에 비해 매우 크기 때문에 그에 의한 새로운 여러 가지 특성을 나타낸다. 예를 들면 탄소 나노튜브의 경우 그 물성이 기존의 탄소 소재와 크게 다름을 알려졌으며 [1], 일반적으로 비활성 물질로 알려진 Au 금속의 경우, 나노사이즈의 분말 형태가 되면 CO 가스의 산화 과정의 촉매 역할을 할 수 있음이 최근에 밝혀지기도 했다[2].

한편 고체의 기계적 성질을 지배하는 결함(전위, 입계, 균열 등)을 관찰하는 실험도구의 발전

은, 종전의 연속체 역학에 근거한 결함 해석 방법의 한계를 극복하여, 원자 스케일에서의 해석에 근거한 결함 구조의 연구를 자극하였다[3]. 이러한 결함 구조의 정확한 이해는 나노소재의 기계적 특성 나아가서는 전기, 자기적 특성을 규명하는 데 중요한 역할을 하고 있으며, 이러한 이해에 근거한 나노소재의 개발은 중요한 공학적 의미를 갖는다.

새로운 기능을 갖는 나노소재의 개발을 위해서는 나노스케일, 즉 분자레벨의 기본 물성에 대한 정확한 정보가 필수적이지만 현재의 기술로는 나노소재의 기본적인 물성의 측정은 물론, 명확한 이해와 예측이 어렵다. 나노스케일의 물성에 대한 정확한 물성 값을 수치적 값으로 얻을 수 있다면 이들을 이용하여 새로운 나노소재를 설계 또는 디자인하여 실험적으로 구현함으로써 새로운 기능의 나노소재를 개발하는 시간과 노력을 현저히 줄일 수 있을 것이다. 이와 같은 요구를 만족시

킬 수 있는 새로운 기술로 전산모사가 주목받고 있다. 그 이유는 전산모사로 얻어지는 결과는 나노스케일의 물성에 대한 새로운 이해를 제공할 뿐만 아니라 실험적으로는 얻을 수 없는 물성의 수치적 값을 제공할 수 있기 때문이다. 이 글에서는 나노소재에 있어서 전산모사의 역할과 전산모사의 방법들을 소개하고 나노소재의 전산모사 방법으로서 multiscale simulation에 대하여 소개한다.

전산모사의 연구 동향

최근 20년간의 컴퓨터 계산능력의 급속한 발전은 많은 분야에 영향을 미치고 있으며, 무기재료, 고분자, 촉매, 신약 등의 분야에 컴퓨터를 이용한 계산과학의 적용이 급속히 진행되어 왔다. 특히 1994년에 NASA의 Goddard Space Center에서 PC를 병렬 연결한 Beowulf-class의 PC cluster가 등장한 이후, PC를 연결하여 기존의 슈퍼컴퓨터(super-

computer)의 성능을 구현할 수 있게 되었다. 이로서 계산 단가가 매우 저렴하게 되면서 대용량이 요구되는 분야의 계산이 가능하게 되었다[4].

소프트웨어(software) 분야에서는 양자역학적 계산방법의 소프트웨어들이 컴퓨터 그래픽(computer graphic)의 발전과 더불어 비전문가도 접근하기 쉽게 디자인된 상용 프로그램들이 많이 개발되고 있다. 이러한 프로그램들은 일반 PC 상에서도 동작하도록 개발되고 있으며, PC 성능의 급격한 발전으로 간단한 분자의 경우 PC 상에서도 계산이 가능하다. 한편 visualization program의 발전은 분자구조나 원자구조에 대한 이해를 쉽게 할 수 있도록 도와주고 있으며, 분자·원자 구조에 대한 정보는 데이터베이스(database)화되어 비전문가의 접근이 용이하게 되어 가고 있다. 이러한 소프트웨어의 이용 방법과 이해를 도모하는 computational chemistry는 이제 선진국 주요 대학의 화학과 학부와 대학원 과정의 주요 전공과목으로 자리잡아가고 있다.

그러나 실제 연구에 이용되는 소프트웨어는 상용과 아카데미용이 반반씩 정도이며, 아카데미용은 프로그램 개발과 응용 차원에서 지속적으로 개발되고 있으며, 그 응용성의 검증 단계를 거쳐 상용화되어 가는 추세이다.

전산모사 연구의 나노소재 개발에 있어서의 중요성은 나노기술에 대한 보고서의 여러 곳에 나타나 있다. 나노기술과 관련된 미

국의 국가과학기술위원회의 보고서에서 나노기술의 양대 연구도구(investigation tool)의 하나로 Theory, Modeling and Simulation을 제시하고 있다[5]. 또한 미국 National Nanotechnology Initiative(NNI) 보고서에 의하면 나노기술의 기반기술로서 modeling and simulation infrastructure의 중요성을 강조하고 있으며, 대부분의 연구기금 단체들이 전산모사 분야의 연구를 지원하고 있음을 보여주고 있다[6]. 이는 전산모사 방법이 나노소재 개발에 중요한 기반기술로서 인식되고 있음을 보여주는 예이다.

전산모사 방법의 체계

전산모사방법은 그 방법이 다루는 물질의 스케일에 따라 다양하게 개별적인 발전을 이루어 왔다. 그림 1에서는 여러 분야의 전산모사 방법을 다루는 물질의 스케일에 따라 양자(quantum), 원자(atomistic), 연속체(continuum) 모델링 등 세 가지로 도식화하였다. 이번 절에서는 각각의 방법에 대해 좀더 구체적으로 서술하고자 한다.

(1) 양자 모델링은 양자역학적 전자의 운동에 대한 전산모사를 통해 화학적, 물리적 물성을 예측하는 방법이다. 이

분야는 “*ab initio*” 또는 first principle 계산이라 불리는데, “*ab initio*”란 “from the beginning”이란 뜻의 라틴어로서, 외부에서 입력되는 파라미터(parameter)가 없다는 뜻으로 쓰인다. 즉, 계산을 하는데 있어서 원소의 atomic number와 위치에 대한 정보만 가지고 전자의 운동을 Schrödinger 방정식을 이용해 풀게 된다. 이 방법에는 대표적으로 분자궤도함수를 이용한 Hartree-Fock(HF) 방법, Density Functional Theory(DFT) 방법(범밀도 함수 방법)이 있다. 또한 *ab initio* 방법은 아니지만 계산을 좀더 빨리 하기 위해 실험으로부터 parameter를 도입하는 semi-empirical method인 Tight-Binding(TB) method와 semi-empirical molecular orbital 방법 등이 여기에 포함된다고 할 수 있겠다.

(2) 원자 모델링은 원자의 운동과 위치에 관한 전산모사라 할 수

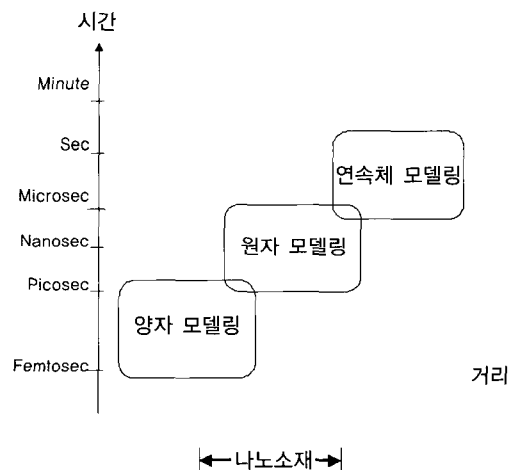


그림 1 전산모사 체계도 각각의 전산모사 방법이 기술할 수 있는 거리의 범위와 시간

있다. 이는 크게 분자 동역학 (MD : Molecular Dynamics)과 Lattice Simulation(LS 혹은 Lattice Statics)으로 나눌 수 있다. MD는 Newton의 운동방정식에 의해 원자의 위치를 결정하게 되고, LS의 경우는 운동은 고려하지 않고 interatomic potential에 의해 시스템의 전체 에너지를 최소화하는 구조를 찾아 원자의 위치를 결정한다.

(3) 연속체 모델링은 phase diagram, continuum mechanics, macrokinetic modeling, transport modeling 계산을 포함하며, 수치해석법으로는 유한차분법 (finite difference method), 유한부피법(finite volume method), 유한요소법 (finite element method) 등이 주로 쓰인다. 이 단계의 모델링은 실제 engineering material을 다룰 수 있는 반면, 실험적 정보에 의존한 macroscopic 모델링이기 때문에 microscopic한 물성 예측이 어려운 측면이 있다

양자모델링

Ab initio 방법으로 분류되는 전산모사 방법은 크게 Hartree-Fock(HF) 방법과 Density Functional Theory(DFT) 방법으로 나눌 수 있다. 두 방법의 차이는, 기술하고자 하는 계의 energy에서 electron correlation의 포함 여부이다. HF의 경우 quantum exchange에 대한 것은 정확하게 계산에 포함되지만, electron correlation은 포함되지 않는다. 그러나 DFT의 경우

Kohn-Sham theory[7]에 의하면 electron correlation은 포함하지 않지만, exchange term과 합쳐져서 exchange-correlation term으로 표현되며, 이 term이 electron density의 함수로 나타내진다. 한편 HF 계산에 correlation을 포함하기 위해서는 configuration interaction(CI)이라는 방법이나 perturbation 방법이 도입되는데, 이 방법은 방대한 계산량을 요구하기 때문에, 작은 분자 단위의 계산에서만 유용하다.

역사적으로 볼 때, 분자궤도 함수에 HF 이론을 적용하면서 분자 단위의 전자구조에 대한 양자역학적 전산모사가 시작되었다고 할 수 있다. 이를 전산모사 방법으로 정착시킨 공로로 Gaussian program[8]을 만든 Pople은 DFT의 Kohn과 함께 '98년 노벨 화학상을 받기도 하였다. HF 방법은 분자의 전자 배치 및 상태 변화에 대한 계산 등으로 컴퓨터의 발전과 함께 계산화학의 주류를 이루어왔다. 한편 DFT 방법은 bulk의 periodicity를 기술할 수 있는 평면파 방법과 접목되면서 고체 상태의 물성, 밴드 구조 등에 대한 기술을 가능하게 하면서 주로 물리학자들에 의해 발전되어 왔다.

대표적인 프로그램들을 보면, HF 또는 CI 방법에는 Gaussian program[8], GAMESS[9], Spartan[10] 등이 있으며, periodic HF 방법인 Crystal[11]이 있다. DFT 방법에는 local density approximation을 비롯하여 non-local 방법에 이르기까지,

여러가지 functional을 이용한 방법들이 개발되어 있으며, 대표적인 프로그램으로는 CASTEP (CAmbridge Sequential Total Energy Package)[12], DMol3 [13], DV-X [14], VASP[15] 등이 있다.

Semi-empirical 방법으로 분류되는 Tight-Binding(TB) 방법과 semi-empirical molecular orbital 방법 등은, 위의 ab initio 방법에서는 일일이 계산하여야 하는 에너지 값을 실험치에서 얻는 파라미터로 대치함으로써 ab initio 방법에 비해 계산 시간을 크게 줄일 수 있을 뿐 아니라, 다룰 수 있는 원자의 개수도 크게 증가시켜주는 장점이 있다. 이러한 방법은 파라미터를 적절하게 택할 경우, ab initio 방법의 정확성을 유지하면서도, 많은 원자를 포함하는 시스템의 물성에 대한 계산을 할 수 있어, semiconductor를 비롯한 여러 분야에 널리 쓰여지고 있다.

위와 같은 양자역학적 계산으로부터 band structure, electron density, spin density, energy levels, density of states 등 국지적인 전자구조를 알 수 있고, 그로부터 bond의 성격, reaction path, adsorption의 성질, dielectric constant, vibrational frequency 등과 같은 물성을 예측할 수 있다. 그러나 양자역학만으로 설명될 수 있는 물성은 시간적 또는 공간적으로 매우 제한적이며 (size~10⁹m, time 10⁻¹²sec), 이를 실제적으로 이용되는 물질의 물성으로 해석하기 위해서는 여

러 단계의 재해석이 필요하다.

원자 모델링

분자 동역학은 결정이나 액체 등 어떤 시스템을 이루고 있는 원자들의 운동 궤적에 대한 전산모사라 할 수 있다. 이러한 전산모사는 결정이나 액체의 **equilibrium** 상태뿐 아니라, **melting, crystallization, diffusion, phase transition** 등에 대한 계산을 하여, 물질의 특성을 예측할 수 있게 한다. 그러나 MD 방법으로 다룰 수 있는 원자의 개수가 $10^2 \sim 10^6$ 개 정도로 한계가 있고, 원자들의 운동 궤적은 10^{-9} sec 이내에서만 예측할 수 있다. 또한 원자/분자 상호간에 작용하는 힘의 파라미터 값(force constant, charge, van der Waals parameter 등)의 정확성에 의해 계산의 정확성도 크게 좌우된다. MD를 위한 파라미터들을 통칭하여 force field라 부르기도 하는데, force field를 실험으로부터 empirical하게 결정하기도 하지만, 최근에는 *ab initio* 계산에서 얻은 값을 이용하기도 한다. Force field를 얻는 방법에 따라 *ab initio* MD, semi-empirical MD, tight-binding MD, classical MD 등으로 구분하기도 한다. 한편 원자의 운동 궤적에 통계학적 개념을 도입하여 계산하는 Monte Carlo MD 방법도 널리 쓰인다.

Lattice Simulation(LS)은 MD와는 달리 원자의 운동궤적이 아니라 원자들의 최적화된 구조(에너지적으로 가장 안정된 구조)를 찾는 전산모사 방법이다.

LS는 **atomistic simulation**이라 불리기도 하는데, 원자들간의 상호작용을 **interatomic potential**로 기술하여 전체 시스템의 에너지를 최적화하는 방법을 쓴다. LS에서 다룰 수 있는 원자의 개수는 MD에 비해 두 배 이상 크기 때문에, 실험 결과를 직접 비교해 볼 수 있는 dimension까지 계산하는 것이 가능하다. 대개의 전산모사가 그러하듯이, 여기에서도 다루는 시스템에 따라 **interatomic potential**을 적절히 선택하는 것이 중요하다. potential의 적절함은 전산모사의 정확성을 좌우하며, potential이 복잡해지면 막대한 계산량이 요구된다.

대표적인 **interatomic potential**로는 **Finnis-Sinclair type potential**[16], **metallic material**에 많이 적용되는 **embedded atom method** [17], 그리고 세라믹에 많이 적용되는 **shell model** [18] 등이 있다.

연속체 모델링

연속체 모델링은 기계공학자들에게는 비교적 익숙한 개념으로서, 재료의 각 **material point**가 많은 원자를 포함하고 있다고 생각한다. 이로부터 얻어진 양들(예를 들면 응력, 변형률,...)은 모두 **field variable**로서 이 **field variable**들은 그 **material point**에서의 많은 원자들의 평균화된 값으로 간주된다. 이러한 **field variable**들은 수학적으로는 적절한 경계조건을 가진 지배방정식을 만족하게 된다. 이 해의 과정은 근사화를 필요로 하며, 가장

대표적인 방법이, 유한 요소법 [19]과 경계요소법이다. 보편적으로 쓰이는 유한 요소법에서는 대상인 물체를 유한한 크기의 요소로 나누고 각 요소 내에서의 **field variable**은 적절한 내삽함수를 도입하여, 요소 절점에서의 값으로 표현한다. 각 요소의 절점에서의 **field variable**들을 미지수로 한 지배방정식(경계조건을 가진)을 풀어냄으로써 근사해가 주어진다. 이 연속체 모델링은 비교적 큰 크기의 공학 구조물 해석에서 지난 40여 년간 비약적인 발전이 있었으며, 많은 구조물의 해석에 필수적인 도구가 되었다. 이 방법에서 재료의 거동(예를 들어 응력과 변형률 관계)은 현상학적인 파라메타(예를 들어 영계수)에 의해 기술되며, 재료의 거동을 나타내는 식을 구성방정식이라 부른다. 이 연속체 모델링은 따라서 위에서 언급한 양자 모델링 및 원자 모델링과 달리 재료의 구성방정식이 주어져 있다고 가정하며, 이 구성방정식과 원자 스케일(혹은 더 작은 스케일)에서의 힘-변위 관계와의 연관성은 정성적으로는 많은 이해가 있었으나, 정량적으로는 아직도 이해를 넓혀가고 있는(특히 재료가 결함을 가진 경우 혹은 재료의 미세구조와의 연관성 문제에서) 발전 단계에 있다.

Multiscale Simulation

나노소재의 물성은 나노사이즈의 특성상 양자역학의 원리에 의

한 전자의 운동에 의해 결정된다고 할 수 있다. 그러나 나노소재는 양자역학적으로 기술하기에는 원자의 개수가 너무 많고, 통계적인 방법으로 기술하기에는 개수가 너무 적어, 현재의 전산모사 방법으로 기술하기에는 한계가 있다. 이러한 한계를 극복하기 위해서 나노스케일의 전산모사를 위한 새로운 소프트웨어의 개발과 함께, 여러 전산모사 방법을 유기적으로 결합시키는 multiscale simulation 방법을 적용할 수 있겠다. 다시 말해 multiscale simulation 방법은 위에서 언급한 기존의 scale별 simulation 방법들을 연계하여 나노소재의 물성을 양자역학적 계산의 정확성으로 기술하고자 하는 것이다. 그림 2에서와 같이 QM, AM, CM이 서로 파라미터를 교환하면서 유기적으로 연결될 때, full scale에 걸친 물성 예측이 가능하게 되어 효과적인 재료설계를 할 수 있을 것이다. 따라서 이러한 연결

고리를 확보하는 multiscale simulation interfacing model의 개발이 새로운 관심 분야로 등장하고 있다.

이러한 multiscale simulation은 이제 재료공학 및 기계공학의 새로운 computational methodology로 자리 잡아가고 있다. 2000년 미국재료학회 MRS Fall meeting에는 “Multiscale Materials Modeling” technical symposium에서도 100여 편의 논문이 발표되었으며, 2001년 Fall Meeting에서는 “Fundamental methods of Multiscale Modeling”의 독립적인 tutorial session도 열렸었다.

Multiscale simulation의 중요한 한 부분인 원자 모델링과 연속체 모델링을 연계하려는 많은 연구가 진행되어 왔으며, 아직도 활발한 연구가 진행되고 있다. 이 multiscale simulation은 전위, 입계경계, 균열과 같은 결합의 구조 및 결합간의 상호작용을 규명

하는 데 큰 기여를 하고 있다. 여기에 놓인 최대의 장애는 다룰 수 있는 원자의 수가 현재의 컴퓨터 용량 및 post-processing 능력으로 약 10^6 개 정도이며, 이를 2차원 문제로 단순히 생각하여 한쪽길이가 약 10^4 개 정도의 원자가 있다고 가정하면(그리고 lattice parameter를 Å의 전형적 크기로 가정하

면) 금속의 경우 약 1m의 크기가 된다. 따라서 현재의 많은 연구는 원자스케일의 정보(예를 들어 전위의 core 구조)를 유지하면서 continuum scale의 유한요소법의 해석을 동시에 수행할 수 있는 방법에 집중되어 있다. 최근에는 quasi continuum[20] 방법이 각광을 받고 있는데 이 방법은 lattice simulation과 유한요소법을 결합하여 더 큰 컴퓨터의 용량의 확장 없이 원자 스케일의 정보를 얻어내고 있다. 이 방법으로 Lomer 전위, 균열 선단에서의 전위 생성과 절단(cleavage)의 결합 문제 및 균열과 입계와의 상호작용들에 관한 해석이 가능하게 되었다.[3] 이 방법은 대체적으로 유한요소법이 각 절점에서의 discretized field variable을 구하는 것이므로 원자 모델링에서의 각 원자의 위치를 구하는 것과 유사성에 착안하고 있다. 즉, 변형이 심한 결합 부근에서는 각 개 원자의 자유도를 유지하고 결합에 멀리 떨어진 곳에서는 deformation gradient가 거의 변하지 않으므로(원자 스케일에서) 유한요소법의 각 절점이 그 부근의 많은 원자를 대표한다고 생각하여 에너지 최소화를 수행하는 것이다. 이 방법이 이와 비슷한 연구[21]와 구별되는 것은 변형이 진행되거나 결합이 움직일 때 remeshing이 자동적으로 수행되는 점으로서 현재 많은 연구 결과가 보고되었고 앞으로도 많은 결과가 기대된다.

그러나 나노소재의 물성을 더 정확히 예측하기 위해서는 양자

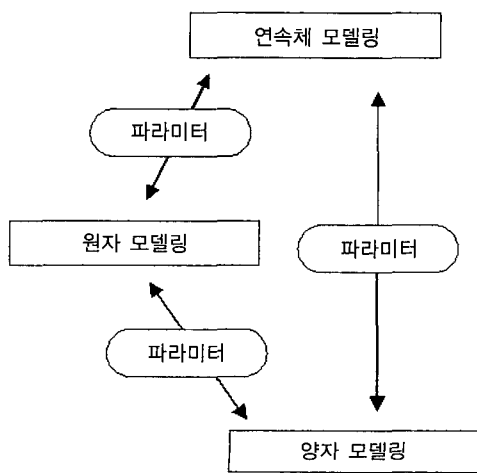


그림 2 Multiscale Simulation 체계도

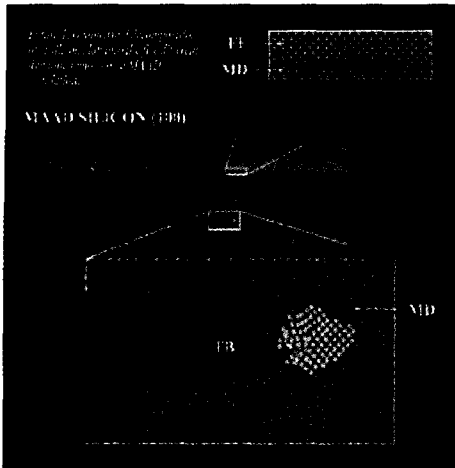


그림 3 FE/MD/TB Multiscale Simulation의 예
Study on the rapid brittle fracture of a
silicon slab flowed by a microcrack
(참고문헌 22)

모델링과 원자 모델링 또는 양자 모델링과 통계학적 모델링 statistical modeling을 연계하는 multiscale simulation의 적용이 필요하다. 미국의 “National Nanotechnology Initiative” 보고서에도[6], 나노소재 전산모사의 중요 도구로서 multiscale simulation을 들고 있는데, 이는 현재의 하드웨어 기술로서도 나노소재의 물성에 대한 예측이 가능한 소프트웨어적 breakthrough로 여겨지고 있기 때문이다. 따라서 이에 대한 기술 개발은 선진국에서도 새로이 시도되고 있는 전산모사 방법으로, 나노소재 개발의 가이드라인을 제시하여 물성을 예측하고 디자인하는 방법으로서의 전산모사의 새로운 패러다임이 될 수 있으리라 기대된다.

Multiscale simulation의 예 [22]로서 silicon slab의 microcrack의 propagation에 대한 연구를 그림 3에서 보여 주고 있다.

Silicon slab 전체의 기계적 물성에 대한 계산은 Finite Element (FE) method로 계산하고, crack이 일어난 부근은 slab의 일부분으로 Molecular Dynamics (MD)로서 원자구조의 변형을 계산하고, crack의 tip 부근은 Tight Binding(TB)로서 계산하는 방법으로 microcrack의 형성을 양자 역학적으로 접근하는 방법을 쓰고 있다.

맺음말

이 글에서는 나노소재의 개발에 있어서의 전산모사의 중요성과 연구 동향에 대해 논의하였다. 전산모사 방법의 체계에 대한 소개를 하였으며, 그 중 나노소재와 밀접한 관련이 있는 양자 모델링과 원자 모델링 및 연속체 모델링을 간략히 소개하였다. 한편 나노소재 전산모사의 새로운 방법으로 각 스케일별 전산모사 방법을 연계하는 multiscale simulation에 대해 소개하고 나노소재에서의 적용의 예를 보여 주었다.

컴퓨터의 발전과 함께 전산모사가 다룰 수 있는 범위가 넓어지고, 좀 더 복잡한 구성체에 대해서도 양자역학적 정확성으로 전산모사가 가능하게 되어가고 있다. 이와 같은 추세라면, 나노스케일의 engineering material에 대한 전산모사가 촉매, 세라믹, 금속 등 여러 분야에 실용화되어 “computational alchemy”가 조

만간 가능하게 될 것이다.

그러나 현재의 나노소재의 전산모사는, 양자 모델링과 원자 모델링에서 얻어지는 물성을 실험값과 비교하면서, 각 모델링에 쓰인 방법론이나 파라미터를 검증하고, 이를 연계하는 multiscale simulation의 개발 단계라 할 수 있다. 전산 모사 방법도 어느 실험과 마찬가지로 각 방법에 대한 충분한 이해와 경험이 바탕이 되어야 적절한 사용과 해석이 가능하다. 또한 전산모사 자체도 여러 가지 모델에 대한 계산을 수행하는 실험적 과정을 거쳐 데이터화하는 작업이 필요하다. 이러한 검증의 단계를 거치면서 다양한 방법론이 지속적으로 발전된다며, 전산모사를 이용한 “물성 예측 합성”의 소재 개발이 기존의 “합성 물성 측정”의 기존방식을 대체하는 새로운 효율적 나노소재 개발 방법이 될 것으로 기대되고 있다.

Multiscale 전산모사는 또한 광소자나 양자점과 같은 여러 디바이스는 물론 MEMS/NEMS 구조물을 포함한 나노구조물 및 다양한 나노스케일 공정의 해석 및 설계에 유용한 도구(tool)로서 활용될 수 있을 것이다.

[참고문헌]

[1] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and P. C. Eklund, 1996, “Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes,” Academic Press.

[2] M. Haruta, 1997, Catal. Today 36, p. 153.

- [3] M. Ortiz, A.M. Cuiti o, J. Knap and M. Koslowski, 2001, "Mixed Atomistic-Continuum Models of Material Behavior : The Art of Transcending Atomistics and Informing Continua," MRS Bulletin 26, p. 216.
- [4] William W. Hargrove, Forrest M. Hoffman, 2001, Thomas Sterling, Scientific American, August.
- [5] "Nanotechnology Research Directions : Vision for Nanotechnology R & D in Next Decade," 1999, IWGN Workshop Report, National Science and Technology Council, Interagency Working Group on Nanoscience, Engineering and Technology(IWGN), U. S. A., September.
- [6] " National Nanotechnology Initiative, The Initiative and its Implementation Plan," National Science and Technology Council, Subcommittee on Nanoscience, Engineering and Technology, U. S. A., July, 2000, <http://www.nano.gov/nni2.htm>
- [7] W. Kohn and L. J. Sham., 1965, Phys. Rev. 140, A1133.
- [8] Gaussian, <http://www.gaussian.com>
- [9] GAMESS, <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>
- [10] Spartan, <http://www.wavefun.com>
- [11] CRYSTAL, <http://www.dl.ac.uk/TCS/Software/CRYSTAL/>
- [12] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias and J. D. Joannopoulos, 1992, Rev. Mod. Phys 64, p. 1045. <http://www.cse.clrc.ac.uk/Activity/UKCP+996>, <http://www.accelrys.com/materials/>
- [13] B. Delley, 1995, Theoretical and Computational Chemistry, Vol. 2, p. 221, J. M. Seminario and P. Polizter Ed., Elsevier Science, <http://www.msi.com>.
- [14] A. Rosen, D. E. Ellis, H. Adachi and F. W. Averill, 1976, J. Chem. Phys. 65, p. 3629, <http://www.sci.hyogou.ac.jp/ykowada/index-e.html>.
- [15] VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>
- [16] M. W. Finnis and J. E. 1984, Sinclair, Philos. Mag. A50, p. 45.
- [17] S. M. Foiles, 1996, MRS Bulletin, Vol. 21(No. 2), p. 24.
- [18] M. Stoneham, J. Harding and T. Harker, 1996, MRS Bulletin, Vol. 21(No. 2), p. 29.
- [19] T. J. R. Hughes, 1987, "The Finite Element Methods," Prentice-Hall.
- [20] E. B. Tadmor, M. Ortiz and R. Phillips, 1996, "Quasi-continuum Analysis of Defects in Solids," Philos. Mag. A73, p. 1529.
- [21] S. Kohlhoff, P. Gumbusch and H. F. Fischmeister, 1991, "Crack Propagation in bcc crystals studied with a combined finite-element method and atomistic model," Philos. Mag. A64, p. 851.
- [22] F. F. Abraham, J. Q. Broughton, N. Bernstein, and E. Kaxiras, 1998, Computers in Physics, Vol. 12, p. (1987)538.

기어 동역학

동력순환형, 동력분류형(Power Circulation Mode, Power Split Model)

무단변속기는 내부의 동력흐름에 따라 동력순환형과 동력분류형으로 나뉜다. 동력순환형은 출력동력의 일부가 변속기 내부를 순환하는 형태로서 무단변속기를 기준으로 출력축 방향으로 순환하는 정

방향 순환형(positive circulation)과 이와 반대로 순환하는 부방향 순환형(negative circulation)이 있다. 또한 동력분류형은 전체 입력동력을 무단변속기구와 차동기어장치가 일정 비율로 분담하여 전달하는 동력흐름이다.