

## 전산 나노역학 (Computational Nanomechanics)



전 석 기\*

### 1. 서 론

특성 길이가 수 나노미터에서 수십 나노미터 정도인 여러 가지 나노구조 재료들(nanostructured materials)의 특성을 이해하고 이를 공학적으로 이용하려는 나노기술이 많은 관심을 모으고 있다. 나노구조 재료들의 종류는 매우 다양하고 또 계속 개발되고 있지만 지금까지 많은 주목을 받고 있는 재료라면 나노튜브, 나노선, 나노입자, 양자점, 양자선, 나노결정체, 나노자성체, 나노복합재료 등을 들 수 있을 것이다. 이러한 나노구조체들은 기존의 재료들이 보여주지 못하는 흥미로운 물리적 특성을 갖고 있기 때문에 많은 학문 분야에서 이들의 성질을 규명하고 활용하여 특정한 목적에 맞는 소자 및 시스템을 개발하려는 연구를 활발히 진행하고 있다. 기존의 재료역학을 연구하던 일부 학자들도 나노결정체나 나노복합재료는 물론이며, 더 나아가 변형이나 응력 등의 역학적 물성과 전기 전도성 혹은 광학적 특성과 같은 다른 물리적 성질과의 상관관계를 규명하는 복합물리적 방식으로 다양한 나노구조 재료에 관한 연구를 시작하고 있다.

나노스케일에서 여러 가지 물성을 실험적으로 연구하는데 있어서 어려움이려면 우선 장비들이 매우 가격이 비싸다는 것과, 같은 실험 결과도 재현하기가 더욱 어렵다는 것, 그리고 특히 작은 스케일이라는 어려움 때문에 결과를 눈으로 직접 볼 수 있도록 하는 가시성이 매우 떨어진다는 것을 들 수 있다. 따라서 기존의

역학분야에서 그러하였던 이상으로 나노스케일에서 역학적 특성을 연구하는데 있어서도 전산모사(Computer Simulation)는 중요한 도구로서 그 필요성이 절대적이라 할 수 있다. 1999년 9월에 발표되어 미국의 나노기술 연구 방향을 설정하는 나침반의 역할을 했던 IWGN workshop report에서도 전산모사를 실험과 더불어 중요한 기반기술로 보고하였고, 지금도 미국과학재단에 의해 선정되는 나노 관련 연구과제들 중 전산모사 분야가 적지 않은 비중을 차지하고 있다. 우리나라에서는 작년에 프런티어사업과 나노핵심기반기술사업을 통하여 전산모사기법의 연구에 관한 과제들이 다수 선정된 바 있다.

나노스케일에서의 전산모사 방법은 대상인 나노구조 재료를 인식하는 물리적 관점의 차이에 따라 먼저 양자적 전산모사(Quantum Simulation)와 원자스케일 전산모사(Atomistic Simulation)의 두 가지로 분류할 수 있다. 양자역학적 전산모사는 원자에서 전자(혹은 가전자)와 핵(혹은 이온)들의 존재를 인식하여 그들의 운동을 양자역학의 이론에 근거하여 다루는 방법이고 원자적 전산모사 방법은 원자를 전자나 핵으로 구분하지 않고 하나의 대상으로 취급하여 원자들 간의 상호작용에 의한 운동을 고전역학과 통계역학을 기반으로 해서 묘사하는 방법이다. 물론 이 둘이 항상 구분되어 사용되는 것만은 아니고 경우에 따라서는 이들 기법을 적당히 결합하여 사용하는 방법들도 있다. 또한 상대적으로 적은 수이지만 경우에 따라서는 기존의 연속체적

\* 한국과학기술원 기계공학과 연구부교수

관점에서 재료를 모델링하여 유한요소법이나 유한차분법으로 필요한 물성을 계산하기도 한다. 일괄적으로 말하기는 어렵지만 대략 40~50 나노미터가 양자역학적 효과를 무시할 수 없게 되는 스케일이기 때문에 나노스케일 전산모사를 위해 이렇게 양자역학적 관점과 고전역학적 관점이 필요에 따라 선택적으로 쓰이는 것이라고 생각된다. 이런 이유 때문에 최근에는 이들 세가지(양자, 원자, 연속체) 전산해석 방법들을 체계적으로 연계시킴으로써 보다 더 효율적으로 나노구조 시스템을 해석하고자 하는 멀티스케일 전산모사 기법이 주요 연구 분야로 떠오르고 있다.

이 글에서는 기존의 전산역학을 다루었던 연구자들에게는 비교적 생소한 원자스케일 전산모사와 양자역학적 전산모사 방법에 관하여 먼저 간략히 살펴본 후, 이 두 방법을 연속체적 전산해석 기법과 연결하려는 멀티스케일 전산모사법에 관하여 알아보고 그 응용 사례를 소개하고자 한다.

## 2. 원자론적 전산모사(Atomistic Simulation)

원자론적 전산모사 기법으로는 대표적으로 분자동역학(Molecular Dynamics)과 격자정역학(Lattice Statics 혹은 Molecular Mechanics)을 들 수 있다. 이들은 원자를 점 질량이나 혹은 구(sphere)로 생각하고 이 원자들 간의 상호작용을 경험적으로 정해진 포텐셜 함수에 의해 표현한다는 공통점을 갖고 있다. 분자동역학은 이 포텐셜로부터 원자가 받는 힘을 계산하고 이를 고전역학의 질점 운동방정식에 적용하는 비교적 간단한 방법으로 원자의 시간에 따른 궤적을 푸는 체계로 되어있다. 또한, 격자정역학은 동적 운동을 고려하지 않고 경험 포텐셜로부터 시스템의 전체 에너지를 계산하여 이를 최소화하도록 하는 원자들의 안정화된 배열을 구하는 방식이다. 따라서 격자정역학은 원자의 진동을 고려하지 않는, 즉, 온도의 효과를 고려하지 않는 절대 온도 0도에서의 에너지론적 방법(energetics)이다.

시간에 따른 원자들의 위치를 결정하는 계산만 수행한다면 분자동역학은 단지 운동학(kinetics)에 지나지 않고 물리적으로 큰 의미를 갖지 않는다. 본래 이 방법의 의의는 이런 운동학적 계산과 통계역학의 이론을 통해서 열역학적 물리량들을 도출하는데 있다. 즉, 해석하고자 하는 시스템에 가장 타당한 앙상블을 선택한 후 그에 따른 적합한 수치해석 알고리즘을 사용하여 원자들의 운동을 묘사하고 그 결과를 해당 앙상블의



그림 1 탄소나노튜브의 변형에 관한 분자동역학 해석 (<http://www.nas.nasa.gov>)

통계역학적 관계식에 이용함으로써 물리량을 계산하는 체계로 이루어진다. 예를 들어, 탄소나노튜브의 좌굴 거동을 상온에서 전산해석 하고자 한다면, 다음과 같은 단계로 정준 앙상블(Canonical or NVT Ensemble) 조건에서의 분자동역학 계산을 수행한다. 먼저 나노튜브의 각 탄소 원자들의 위치를 결정하고 이들간의 결합력을(경우에 따라서는 비결합력도 함께) 고려하는 포텐셜 함수(혹은 force field)를 도입한다. 적당한 경계조건과 초기조건을 부여한 후, 일정한 온도를 유지하도록 하는 알고리즘(예를 들면 Hoover Nose Thermostat)과 적당한 시간 적분법을 이용하여 시간에 따른 원자들의 위치를 계산해 나간다. 동시에 필요한 물리량(에너지 등)의 시간에 따른 변화는 정준앙상블의 Partition Function을 이용하여 계산할 수 있다. 이와 같은 예에서 알 수 있듯이 체계화된 분자동역학 해석을 수행하기 위해서는 고전 통계역학과 그에 따른 열역학 해석 방법에 지식이 있어야 한다. 그림 1은 나노튜브의 역학적 거동을 분자동역학으로 시뮬레이션 한 예이다.

분자동역학을 이용한 전산모사 기법의 가장 큰 문제점은 해석 가능한 시간 스케일이 너무 짧다는데 있다. 보통 하나의 시간스텝이  $10^{12}$ (pico) second 이하이고 전체 해석 가능시간이 아무리 길어도 현재의 해석기술로는  $10^6$ (micro) second를 초과하지 못하기 때문에 보다 더 긴 시간의 모사를 가능하도록 여러 가지 수치해석 상의 방법들이 다각도로 시도되고 있다. 그 예로 Hyperdynamics나 Action-Derived Molecular Dynamics 등이 있으며 rare event적 성격을 띠는 문제들에 대해서는 kinetic Monte Carlo 방법을 사용하여 한계를 극복

복하고 있다. 또 다른 원자스케일 해석기법인 Monte Carlo 방법은 지면 관계상 생략하기로 한다.

분자동역학 혹은 격자정역학 전산모사를 전문적으로 하는 프로그램은 기본 이론과 알고리즘이 상대적으로 간단하므로 오랜 시간을 들이지 않고도 직접 개발할 수 있으며, CAMPOS, MOLDY, NAMD, XMD, AL\_CMD, GULP 등과 같은 프로그램들은 인터넷에서 다운로드 받아 사용될 수 있다.

### 3. 양자론적 전산모사(Quantum Simulation)

양자역학적 수치해석 방법으로는 먼저 시스템을 기술하는 해밀토니안에 일정 부분 경험적 파라미터를 도입하고 분자 궤도함수로써 전자의 상태함수를 표현하는 Tight-Binding 방법이 있다. 이 방법은 근사적인 접근이라 정확도가 떨어지는 단점이 있지만 계산량을 줄여서 보다 많은 입자들의 운동을 계산하고자 할 때 많이 사용되고 있다. 한편 이와는 대조적으로 파라미터를 전혀 도입하지 않고 주기율표상의 원자 구조나 질량에 대한 정보만을 이용하여 계산을 수행하는 기법을 제일 원리적(First-Principles 혹은 *ab initio*) 방법이라 하는데 계속되는 컴퓨터의 성능 향상과 함께 날로 보편화 되고 있는 방법이다. 제일원리적 방법은 밀도 범함수 이론(Density Functional Theory)에 근거를 두고 있는데 이에 관해 좀 더 살펴보기로 하자.

기본적으로 양자역학에 근거한 전산모사 기법은 상호작용하는 많은 입자(원자핵과 전자)들의 운동을 한꺼번에 묘사하는 슈뢰딩거 방정식을 수치적으로 풀러는 것이다. 해석적인 접근 방법은 물론이며 컴퓨터를 이용하여 계산을 하더라도 입자 수가 많은 다체(many body) 문제를 정확히 푼다는 것은 불가능하다고 잘 알려져 있다. 따라서 제일원리적 전산모사 기법은 몇 단계의 근사 및 정리(theorem)를 도입하여 실제로 계산이 가능한 형태로 문제를 변환시키게 되는데 계산기법을 이해하기 위해서는 이러한 과정에 대한 이해가 전제되어야 한다. 가장 먼저 전자의 운동과 원자핵의 운동이 연동되지 않는다는 가정인 Born-Oppenheimer (혹은 Adiabatic) 근사를 도입함으로써 다체 문제를 전자와 원자핵의 문제로 각각 분리시킨다. 전자의 운동에 관여하는 핵은 고정된 위치에서의 쿨롱 힘의 source로서의 역할을 한다. 밀도 범함수 이론은 전자의 운동을 기술하는 문제에 대한 이론이며 이와는 별도로 Born-Oppenheimer 근사에 의해 분리되어진 원자핵에 관한

문제는 고체의 진동에너지를 표현하는 포논을 서술하는 문제가 된다. 따라서 Born-Oppenheimer 근사에 의한 오차는 포논과 전자의 상호작용을 무시함으로써 발생하는 것이고 그 크기는 원자핵과 전자의 질량비가 클수록 작아지는데 대부분의 경우 무시할 수 있는 것으로 생각된다.

1964년에 Hohenberg와 Kohn은 다체 전자계의 전체 에너지를 알아내는데 있어서 모든 전자들의 파동함수를 구하는 것과 공간 상에 분포된 전자밀도를 구하는 것이 동등하다는 이론을 발표하였다. 즉 수많은 전자들의 파동함수를 일일이 구하지 않고 결과적인 전자 밀도를 알 수만 있으면 그로부터 전체 시스템의 바닥상태 에너지를 구할 수 있고 다른 성질들도 그에 따라 결정할 수 있다는 것이다. 곧이어 Kohn과 Sham은 이 이론을 근거로 다체 전자계의 에너지 범함수를 하나의 가상 전자에 의한 밀도 함수로 표현할 수 있도록 하였는데 이것이 그 유명한 Kohn-Sham Equation이 되었고 이런 공로 때문에 Kohn은 1998년 노벨 화학상을 수상하였다. 구체적으로는 해밀토니안에서 전자들의 상호작용을 표현하는 Exchange-Correlation 항이 전자의 밀도 함수로 표현되는데 이 밀도 함수는 다시 계의 상태함수에 따라 결정된다. 따라서 자체충족적인(Self-consistent) 과정을 반복하면 밀도 함수를 구할 수 있고 그로부터 전자계의 전체 에너지를 얻게 된다. 이어서 국소밀도근사(Local Density Approximation)를 따라 Exchange-Correlation 항의 구체적인 함수 형태를 결정하고, 원자핵이나 구속된 원자로부터 받는 쿨롱 힘은 Pseudopotential Theory를 이용하면 해석하고자 하는 시스템의 전체적인 해밀토니안을 결정할 수 있고 결과적으로 풀고자 하는 고유방정식이 구성된다. 이 고유방정식을 수치적으로 풀기 위해서 전자의 파동함수인 고유함수를 평면파들의 Linear Combination으로 표현하는 방법인 평면파법이 가장 많이 사용되고 있다. 그러나 평면파법은 푸리에 변환을 거쳐야 하므로 병렬화의 걸림돌이 된다. 이를 극복하는 방법들 중에 최근에는 유한요소법이나 유한차분법의 기저함수를 사용하기도 한다. 이상 살펴본 것은 제일 원리 계산의 가장 전형적인 경우이고 각 단계마다 다른 선택이 가능하기 때문에 구체적으로는 여러 가지 알고리즘이나 수치기법이 산재해 있는 상태이다. 상태함수를 계산할 때 분자동역학의 계산 알고리즘을 접목한 제일원리적 분자동역학(*ab initio* Molecular Dynamics)이나 Tight-Binding 방법을 분자동역학과 접목한 Tight-Binding Molecular Dynamics 등이 그 예이다.

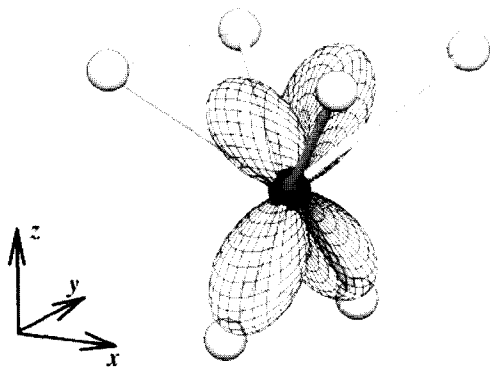


그림 2 제일원리적 방법에 의해 계산된 전위 중심부에서의 계도함수: Physical Review B 64, 134103-(2001)

제일원리적 계산법은 가장 근원적인 접근 방법이지만 그 반대 급부로 계산량이 가장 많은 방법이기도 하다. 현재까지는 대략 수백 개의 원자로 이루어진 시스템이 해석의 한계인 것으로 알려져 있다. 이 방법을 위해서도 다른 수치해석 방법들과 마찬가지로 계산 시간을 향상시키기 위해서 많은 노력이 집중되고 있다. 제일원리 계산을 위한 소프트웨어로는 CASTEP, DMOL3, SIESTA, CPMD, WIEN2k, PARATEC 등이 있다. 그림 2는 재료의 기계적 결합 중 하나인 전위의 중심부에서 전자의 확률밀도를 제일원리적 방법으로 계산한 결과이다.

#### 4. 멀티스케일 전산모사

나노기술 개발을 위한 전산모사 기법으로서 앞의 두 가지 방법은 계산량의 제한 때문에 매우 작은 시스템에 적용할 수 밖에 없으므로 경계를 묘사할 때 주로 주기적 경계조건으로 처리한다. 그러나 보다 실제적인 나노 구조 시스템의 해석을 위해 이들 방법을 유한요소법과 같은 연속체적 수치기법과 접목하고자 하는 시도가 현재 중요한 이슈로 떠오르고 있다. 가령, 현열의 선단 부와 같이 국소 부분은 양자적 혹은 원자적 계산 방법을 사용하고 균열 선단에서 비교적 멀리 떨어진 부분은 유한요소법으로 해석한다면 주기적 경계조건을 쓰지 않고 보다 큰 규모의 대상을 해석할 수 있다는 것이 기본 아이디어이다. 그림 3은 실제로 양자/원자/연속체 계산을 영역별로 따로 모델링하고 이들 간의 연계는 가중치를 분배하는 방식으로 연결하여 균열의 전파 과정을 해석한 예이다. 또 그림 4는 나노픽셀의 응력해석을 하기 위하여 분자동역학(MD)과 유한요소법을 연계한 모델을 보여준다. 이와 같이 영역별로 각각 모델링하고 연결 부위를 타당한 경계조건으로 이어주어

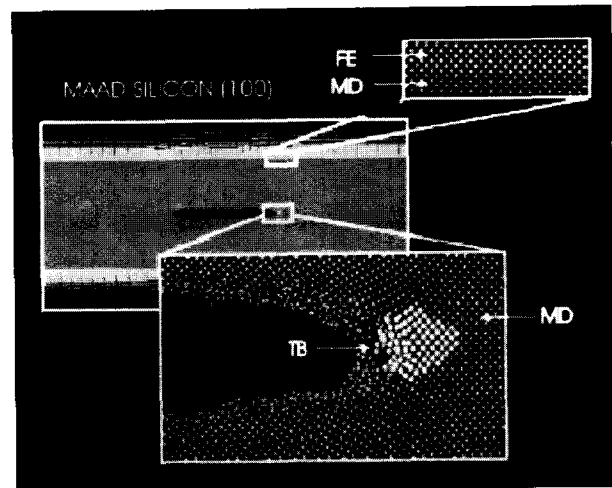


그림 3 균열 전전의 양자/원자/연속체 멀티스케일 계산: Physical Review B 60, 2391-(1999)

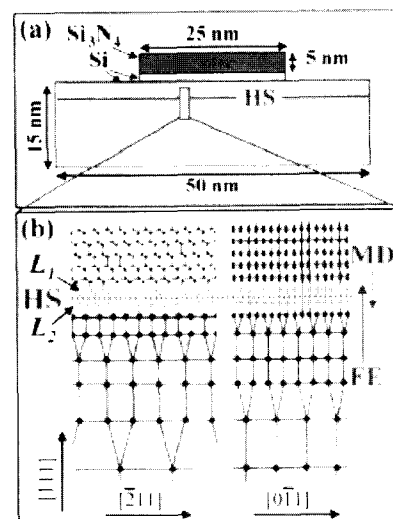


그림 4 나노픽셀의 응력해석을 위한 원자/연속체 멀티스케일 모델: Physical Review Letters 87, 86104-(2001)

서 한번에 계산을 수행하는 방식을 Handshaking Zone에 의한 Concurrent Multiscale 기법이라 부른다. 이런 방법 이외에, 유한요소법의 형상함수를 응용해 대표원자 개념을 도입하는 Quasicontinuum Method와 통계역학적인 분배함수를 일정하게 유지시키면서 가상원자를 도입하는 Coarse-graining Molecular Dynamics 등이 제안되었다. 그러나 현재의 멀티스케일 해석 기법들은 그 발전 단계 상 겨우 태동기에 있다고 말할 수 있기 때문에 보다 완전한 멀티스케일 해석과 폭 넓은 응용을 위해서는 해결해야 할 문제들이 매우 많다. 특히 온도효과를 고려한 동적 해석의 경우에는 세 모델의 해석 시간 스텝의 차이를 극복하는 것과 원자의 진동을 묘사하는 파장이 유한요소법의 요소 크기에 비해 너무

작아서 발생하는 문제 등이 해결하기 어려운 문제들로 인식되고 있다. 즉, 현재까지의 멀티스케일 해석기법은 공간 영역에서의 연계에만 약간의 성과만이 있었을 뿐 각 방법의 시간 영역을 넘나드는 자유로운 해석을 위해서는 획기적인 제안이 있어야 하는 형편이다. 바꾸어 말하면 아직 미개척 분야로 볼 수 있기 때문에 많은 연구자들이 도전하고 있는 것이다.

### 5. 결론 및 전망

지금까지 나노스케일에서의 전산해석에 많이 쓰이는

양자역학적, 원자적 전산모사 기법과 이들을 연동하는 멀티스케일 기법에 관하여 간단히 살펴보았다. 전산 나노역학은 새로이 생겨난 학문이기 보다는 물리, 화학, 재료공학, 기계공학 등 기존의 학문 분야 간에 장벽이 허물어지면서 자연스럽게 인식된 일종의 퓨전 분야라 할 수 있을 것이다. 그러므로 학제 간의 의사소통과 정보교환 등이 매우 필요하다 하겠다. 이를 위해서 기존의 고체 및 구조역학의 전산 해석 연구자들도 양자물리학, 통계역학 등에 관한 지식을 습득하고 전산역학의 경험을 접목시킨다면 전산 나노역학에서의 큰 활약을 기대할 수 있을 것이다. 