

분자동력학을 이용한 나노 재료의 변형거동 전산모사

김찬일 · 양승한 · 김영석

(경북대학교 기계공학부)

Computer Simulation of Nano Material Behavior using Molecular Dynamics

C. I. Kim, S. H. Yang and Y. S. Kim

1. 서 론

최근에 컴퓨터 계산속도의 고속화, 대용량화에 따라 여러 공학분야에서 컴퓨터를 이용한 전산모사 해석(computational simulation)이 왕성하게 행해지고 있다. 이런 추세에서 지금까지는 대상으로 하는 물체를 거시적인(macroscopic) 입장에서 연속체로 다루었던 것으로부터 탈피하여, 물체를 원자 레벨의 미시적인(microscopic) 입자로 이루어진 계로 간주하여 다수의 입자를 포함하고 있는 계에 대해서 물체의 미시적 거동을 해석하는 수법들이 최근 제안되어 활발한 연구가 이루어지고 있다.

이들 수법으로 대표적인 것은 분자동력학(molecular dynamic, 이하 MD), 제일원리에 의한 분자동력학(first principle MD 또는 ab-initio MD), 몬테카를로법(monte carlo, MC), 분자역학법 등이 있다.⁽¹⁻²⁾ 고체 재료의 미시적 거동의 해석에는 주로 분자동력학이 이용되고 있다. 이 방법에 의해 개개 원자들의 움직임을 추적하는 것에 의해 재료의 물리적, 열역학적인 성질, 분광학적 성질 등을 파악할 수 있다. 또한 MD는 원자레벨의 미시적 변형 및 파괴거동의 시뮬레이션(균열 및 크랙발생 위치의 예측과 전파 거동)등에 자주 사용되고 있으며, 최근에는 나노 스케일의 마찰과 절삭, 인덴테이션 등과 같이 실제적인 소성변형 공정에서 일어나는 현상들을 해석하는 데도 널리 이용되고 있다.

이러한 분자동력학법은 1950년대 후반에 Alder와 Wainwright⁽³⁾에 의해 제안된 이후, 원자레벨에서 재

료의 크랙발생 거동을 해석에 처음 적용되었다. Chang⁽⁴⁾은 금속 결정체의 크랙발생 전파거동을 처음 해석한 바 있고, Paskin⁽⁵⁾ 등은 Lennard-Jones의 원자간 상호작용으로 특징 지워지는 3각형 격자의 해석을 수행하여 Griffith의 파괴조건, Rice-Thomson의 전위발생의 평가기준과 비교하였다. Yip⁽⁶⁾ 등은 모드 I 부하를 받는 단결정에 있어서 균열선단에서의 취성, 연성천이에 의한 파괴거동을 해석하였고, Nakatani⁽⁷⁾는 모드 I, II, III의 부하를 받는 균열에 대해서 해석하여 미시적인 결정의 구조변화를 규명하였다.

한편 원자레벨의 경면가공과 같은 극 초정밀 가공기술과 관련한 분야의 연구에서도 MD가 활발히 적용되고 있다. Mackawa⁽⁸⁾ 등은 다이아몬드 공구를 이용하여 Cu 결정을 (111)면에 직각방향으로 나노 절삭가공 공정을 해석하여 나노 스케일의 칩 형성에 미치는 마찰의 역할과 공구마모에 대해서 연구하였으며, Kim⁽⁹⁾등은 원자레벨의 마찰해석을 수행하여 원자 단위의 마찰특성을 규명하였으며, 마찰력이 인력작용이 없어도 발생하는 것과 모재의 온도상승에 따라 마찰력이 증가함을 보였다.

이들 해석의 경우에는 지금까지의 컴퓨터의 용량 및 계산처리 능력의 부족으로 인하여 최대 수십만 개의 원자를 다루는 것이 MD 계산의 한계였으나, 최근에는 컴퓨터의 발전과 대규모의 병렬화 처리 기술의 발달에 의해 수 억 개의 원자들을 다룰 수 있는 대용량의 MD 계산이 수행되고 있다.⁽¹⁰⁾

본 해설에서는 재료 설계 및 재료의 원자·분자 레벨에서의 미시적 변형거동 해석에 널리 이용되고 있는 MD에서 분자들의 움직임을 표현하는데 기초가 되는 다양한 포텐셜 이론과, 시뮬레이션 과정에서 필요한 여러 가지 계산 수법을 설명하고, 현재 여러 분야에서 적용되고 있는 실례를 통해 MD에 대한 독자들의 이해를 돕고자 하였다.

2. 연구방법 및 이론

2.1 분자동력학의 개요

분자동력학(MD)은 원자 또는 분자 등의 다수의 입자로 구성되는 가상적인 계(ensemble, 앙상블)를 고려하여 계 내부의 입자간에 상호작용 하는 포텐셜을 이용해 각 입자의 운동을 다루는 학문이다.

원칙적으로 재료를 구성하는 기본인 원자 레벨에서 시스템 내의 원자들의 운동은 양자 법칙들(특히, Schrödinger's equation)을 따르지만, 식 (1)과 같이 표현되는 Broglie thermal wavelength(Λ)⁽¹⁾가 가장 가까운 이웃 원자의 평균거리(a)보다 지극히 작을 경우에는($\Lambda \ll a$) 원자들의 운동 시스템은 Newton역학(식 (2))에 의해 기술될 수 있다고 가정한다. 그러나 전자 또는 수소와 같이 입자 질량이 작아 $\Lambda > a$ 인 경우에는 입자성보다는 파동성이 크므로 Newton 방정식으로는 해석이 불가능하다.

$$\Lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{Mk_b T}} \quad (1)$$

예를 들어, 실리콘 원자의 경우는 $\Lambda = 0.05\text{\AA}$ 이고 $a = 2.37\text{\AA}$ 이다.

MD에서는 각 입자의 운동방정식을 수치 적분함으로써 각 시간마다의 각 입자의 위치벡터 $r_i(t)$ 와 속도벡터 $v_i(t)$ 를 구하고, 이것으로부터 각종 데이터 해석을 통한 각 물리량을 구한다.

$$\vec{F}_i = m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2)$$

여기서 F_i 는 입자 i 에 작용하는 힘 벡터이고, m_i 는 입자 i 의 질량이고, r_i 는 입자 i 의 위치벡터이다.

Fig. 1은 MD의 알고리즘을 flow-chart로 나타낸 것이다. 먼저 위치좌표(금속의 경우는 결정격자 구조로 원자들의 위치가 격자정수에 의해 결정

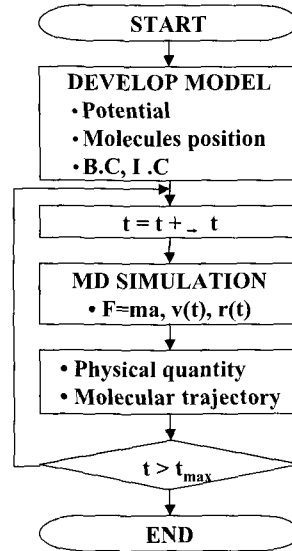


Fig. 1 Molecular dynamics program algorithm

됨)와 속도의 초기 값을 설정(초기조건)한 후, 시간 갱신 루프로 들어간다. 시간 갱신 루프 중에서는 위치 좌표를 사용하여 원자에 작용하는 힘(F_i)을 구하는 부분, 위치좌표와 속도를 변경시키는 부분, 그리고 물리량을 계산하는 부분이 소정의 시간이 될 때까지 반복 계산한다.

MD에서는 각 입자간에 작용하는 힘을 구하기 위해서 입자간 상호작용 포텐셜 에너지 Φ 가 필요하다. 고려하고 있는 계의 전체 입자수를 N 이라고 하면 계의 전체 포텐셜 에너지는 일반적인 형태로 다음과 같이 표시된다.

$$\Phi = \sum_i^N \Phi(r_i) + \sum_i^N \sum_{j>i}^N \Phi(r_{ij}) + \sum_i^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j>i}^N \Phi(r_{ijk}) + \dots \quad (3)$$

여기서 r_{ij} 는 입자 i 와 입자 j 사이의 거리를 나타내고 r_{ijk} 는 입자 i, j, k 사이의 거리를 나타낸다. 우변 첫번째 항은 외부장에 의한 포텐셜을 나타내는데 입자들이 중력장이나 전기장 하에 존재하는 경우에 작용하는 포텐셜의 크기를 나타낸다. 그러나 고체재료의 변형을 다루는 많은 문제의 경우에 이 포텐셜은 무시될 수 있다. 한편 우변 두번째 항은 쌍으로 이루어진 입자들 사이에 상호 작용하는 포텐셜로 두 입자간

포텐셜(two-body potential)을 의미하고, 세번째 항은 세계의 입자가 한 쌍을 이룰 때 작용하는 세 입자간 포텐셜(three-body potential)을 나타낸다. 일반적으로 식 (3)에서 두 입자간 포텐셜과 그 이상의 항들은 두 입자간 포텐셜에 비하면 전체 계에 미치는 영향이 미비하기 때문에 고전 분자동력학에서는 무시한다. 따라서 고전 MD에서는 계 전체의 포텐셜 에너지는 두 입자간 포텐셜의 합만으로 나타낼 수 있다.

$$\Phi = \sum_i \sum_{j>i} \Phi(r_{ij}) \quad (4)$$

또한, 보존계에서 두 입자 i 와 j 사이에 작용하는 힘 F_{ij} 는 Hellmann-Feynman 법칙에 의해 두 입자간의 포텐셜 에너지 $\Phi(r_{ij})$ 의 도함수로 $F_{ij} = -\nabla\Phi = -\partial\Phi(r_{ij})/\partial r_{ij}$ 로 주어지므로 입자 i 에 작용하는 힘은 다음 식으로 주어진다.

$$\vec{F}_i = - \sum_{j>i} \frac{d\Phi}{dr} \bigg|_{r=r_{ij}} \begin{Bmatrix} \vec{r}_{ij} \\ r_{ij} \end{Bmatrix} \quad (5)$$

여기서 $r_{ij}(=|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)$ 는 입자 i 와 j 를 연결하는 위치벡터이고, $r_{ij}(=|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)$ 는 입자 i 와 j 사이의 거리이다.

MD에서 채용하는 입자간 상호작용 포텐셜은 크게 물리적 근거가 없이 구해지는 경험적 포텐셜과 양자역학적 개념을 도입한 반 경험적 포텐셜로 분류되며 경험적 포텐셜이 자주 사용된다. 경험적 포텐셜은 목적으로 하는 절점계의 물성값(고체인 경우는 탄성계수, 격자정수, 결정구조, 원자공공의 형성에너지 등의 실험 데이터)의 재현성으로부터 구해지는 포텐셜로 두 입자간 포텐셜과 세 입자이상 다 입자간(N-body potential) 포텐셜이 있다. 대표적인 포텐셜로는 LJ 포텐셜, Morse 포텐셜, Johnson 포텐셜이 있다. 또한 반 경험적 포텐셜로는 EAM 포텐셜, FS 포텐셜, Tersoff 포텐셜, SW 포텐셜 등이 있다.

2.2 각종 포텐셜

분자동력학 해석에 있어서 분자간, 원자간에 작용하는 포텐셜을 어떤 형태로 생각하는가에 따라 해석 결과가 크게 좌우된다. 따라서 포텐셜을 어떤 형태로 가정하는가는 연속체 역학에서 구성관계식을 가정하는 것과 같이 중요한 문제이다. 그러나 현존하는 모든 분자, 원자에 대한 포텐셜

이 알려져 있지 않으므로 물질 또는 해석하려는 문제에 따라서 각각 적당하다고 생각되는 포텐셜을 이용하는 것이 현실이다.

Table 1 Potential function for atomic pair

Potential	Atomic pair
Lennard-Jones	Ar, CH ₄ , O ₂ , H ₂
Morse	Fe, Cu, P, Fe-P, C, Cu-C
EAM	Ni, Al, G3, Au, Cu, Ag
Finnis-Sinclair	α -Fe, Cu, V, Mo, W
Tersoff	Si, GaAs, Ge
Stillinger-Weber	Si, GaAs, Ge, C

Table 1은 각각의 포텐셜이 잘 맞다고 알려져 있는 원자(쌍)들을 나타낸 것이다.

Fig. 2는 포텐셜(Φ)과 포텐셜의 도함수인 원자간 상호작용 힘 F의 개념을 도시한 것이다. 여기서 r_0 는 원자가 가장 안정한 평형거리를 나타내고, 이때 원자에 작용하는 힘은 0이고, 원자거리(r_{ij})가 평형거리(r_0)보다 작으면 두 원자간에는 척력이 작용하고, 크면 인력이 작용한다

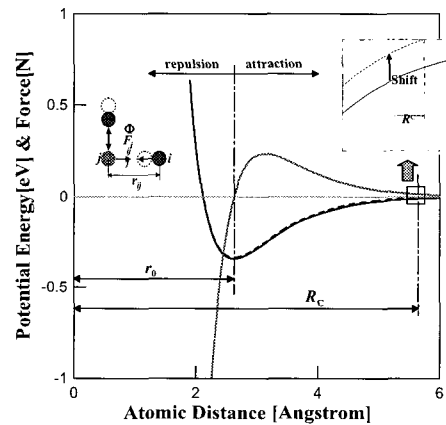


Fig. 2 General and shifted potential function

2.1.1 Lennard-Jones 포텐셜⁽¹²⁾

LJ 포텐셜은 Van-der-Waals력에 의해 결합되어 있는 분자들을 시뮬레이션하는데 주로 사용된다.

$$\Phi(r_{ij}) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right\} \quad (6)$$

σ, ϵ 은 재료 상수이다. 여기서, $1/r^{12}$ 의 항은 Pauli의 원리와 관련하여, 원자 주위의 전자 구름이 겹쳐질 때 에너지가 급격히 증가하는 현상을 나타내며 척력을 표현하는 항인 반면에, $1/r^6$ 의 항은 Van der Waals 힘을 나타낸 것으로, 인력을 나타내는 항이다. σ 는 $\Phi=0$ 가 되는 두 원자 사이의 거리로 $\sigma=r_{eq}/2^{1/6}$ [Å]으로 나타내지며, ϵ 은 평형상태에 있는 두 원자간의 결합에너지, 즉 최소 에너지 값을 나타내고 $\epsilon=-\Phi_{min}(r_{eq})$ [kcal/mol]이다.

2.2.2 Morse 포텐셜⁽¹³⁾

몰스 포텐셜은 공유결합(covalent bonding)에 의해 결합된 원자간의 상호작용 에너지의 성질을 잘 나타내는 특징이 있다.

$$\Phi(r_{ij}) = D \exp^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2D \exp^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \quad (7)$$

위의 식에서, $\Phi(r_{ij})$ 의 값은 r_{ij} 가 무한대일 때는 0, r_0 에서 최소값 $-D$ 를 갖는다. 3개의 파라미터 D, α, r_0 는 실험적으로 결정되는 값으로 재료의 물리정수, 예를 들면 평형상태에서의 격자정수, 체적, 그리고 체적 탄성률을 계산하는 것으로부터 구해진다.

2.2.3 Johnson 포텐셜⁽¹⁴⁾

이 포텐셜은 대표적인 두 입자간에 작용하는 포텐셜을 나타내는 것으로 Johnson에 의해 $\alpha-Fe$ 의 격자정수, 탄성계수, 원자공공의 형성에너지를 재현하도록 결정된 것이다.

$$\Phi(r_{ij}) = \alpha(r_{ij} + \beta)^3 + \gamma_{ij} + \epsilon \quad (8)$$

$\alpha, \beta, \gamma, \epsilon$ 은 물질정수이며, 이 함수는 완전결정부분에 있어서 입자간 상호작용을 정밀하게 나타낸다. 그러나 일반적인 금속 재료의 거동 해석은 본질적으로 다 입자간에 작용하는 포텐셜을 필요로 하고 있어, 다음과 같은 형태의 다양한 반 경험적인 포텐셜이 제안되어 있다.

$$\Phi = \sum_i \Phi_i + \sum_i F_i = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(i \neq j)} \Phi(r_{ij}) + \sum_i f(\rho_i) \quad (9)$$

식 (9) 우변의 첫번째 항은 앞에서 기술한 두 입자간 포텐셜 항을 나타내고, 두번째 항은 가상적인 평균 전자밀도분포를 고려하여 그 속에 들어

있는 원자에 작용하는 다 입자간 포텐셜의 항을 나타낸다. 대표적인 것으로 EAM 포텐셜, FS 포텐셜, Tersoff 포텐셜, SW 포텐셜 등이 있다. 이들 포텐셜 함수는 공유결합하고 있는 유기분자나 결정구조를 갖는 금속의 거동을 기술하는데 적당한 것으로 알려져 있다.

2.2.4 Embedded Atom Method 포텐셜⁽¹⁵⁾

Daw는 밀도 범함수 이론에 기초하여 원자간에 작용하는 포텐셜을 인접 원자 사이에 작용하는 두 물체간 포텐셜 (식10)과 이 원자 주위를 둘러싼 전자구름밀도 $\rho_i(r_{ij})$ 에 의한 포텐셜 (식 (11))의 합으로 나타내었다.

$$\Phi(r_{ij}) = D_m e^{2\alpha(r_0-r_{ij})} - 2D_m e^{\alpha(r_0-r_{ij})} \quad (10)$$

$$f(\rho_i) = -\sqrt{\rho_i(r_{ij})} \quad (11)$$

$$\rho_i(r_{ij}) = r_{ij}^6 (e^{-\beta_{ij}} + 2^9 e^{-2\beta_{ij}}) \quad (12)$$

여기서 $f(\rho_i)$ 는 원자 i 의 위치에서 전자밀도 ρ_i 속으로 원자 i 를 삽입하기 위해 필요한 에너지이다. 이 EAM 포텐셜 함수는 유효매질 이론(effective medium theory)와 같은 형태를 취한다[1]. Table 2는 대표적으로 Ni와 Al에 대한 포텐셜 파라미터들을 나타낸 것이다.

Table 2 EAM potential parameters

Pair	D_m	r_0	α	β
Ni	1.5335	2.2053	1.7728	3.6408
Al	3.7760	2.1176	1.4859	3.3232

2.2.5 Finnis-Sinclair 포텐셜⁽¹⁶⁾

Finnis-Sinclair는 $\alpha-Fe$ 등의 천이금속과 등등의 귀금속에 대한 좁은 범위의 경험적 포텐셜을 제안했다. 이 포텐셜은 Tight Binding 이론의 2차 모멘트 근사화를 기초로 한다.

$$\Phi(r_{ij}) = \begin{cases} (r_{ij} - c)^2 (c_0 + c_1 r_{ij} + c_2 r_{ij}^2) & r \leq c \\ 0 & r > c \end{cases} \quad (13)$$

$$f(\rho_i) = -\sqrt{\rho_i(r_{ij})} \quad (14)$$

$$\rho_i(r_{ij}) = \begin{cases} \alpha^2 \{ (r_{ij} - d)^2 + \frac{\beta(r_{ij} - d)^3}{d} \} & r \leq d \\ 0 & r > d \end{cases} \quad (15)$$

여기서 c 와 d 는 각각 두 번째와 세 번째 가까운 원자들의 cut-off 거리를 나타낸다. 대표적으로 α -Fe에 대한 파라미터 들을 Table 3에 정리하였다.

Table 3 FS potential parameters (α -Fe)

Parameters	Value
α (eV)	1.828905
β	1.8
c (Å)	3.4
c_0	1.237114
c_1	-0.3592185
c_2	-0.0385607
d (Å)	3.569745

2.2.6 Tersoff 포텐셜⁽¹⁷⁾

Tersoff 포텐셜은 원자 주위에 존재하는 전자들이 존재하는 궤도, 즉 원자배치(결합수)에 따라 원자의 결합강도에 미치는 영향이 달라지는 특성을 지닌다.

$$\Phi_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (16)$$

$$f_R(r_{ij}) = Ae^{-2\alpha r_{ij}} \quad (17)$$

$$f_A(r_{ij}) = Be^{-\alpha r_{ij}} \quad (18)$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & (r_{ij} < r_o) \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\frac{\pi(r_{ij} - r_o)}{(r_1 - r_o)} \right] & (r_o < r_{ij} < r_1) \\ 0 & (r_{ij} > r_1) \end{cases} \quad (19)$$

$$b_{ij} = (1 + \zeta_{ij}^n)^{-\frac{1}{2n}} \quad (20)$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} \gamma_i g(\theta_{ijk}) f_c(r_{ik}) \quad (21)$$

$$\gamma_i = \beta_i \frac{c_i^2}{d_i^4} \quad (22)$$

$$g(\theta_{ijk}) = (h_i - \cos \theta_{ijk})^2 \quad (23)$$

이 식에서 Φ_{ij} 는 원자 i 와 j 사이의 결합 에너지이고, f_c 는 포텐셜의 범위를 제한하는 보정 함수이다. f_R 은 척력을, f_A 는 인력을 나타내는 에너지이고, b_{ij} 는 결합순서를 지정하는 인자이다. θ_{ijk} 는 ij 결합과 ik 결합사이의 결합각이다. 대표적인 예로써 Si와 C 원자의 경우에 사용되는 파라미터들을 Table 4에 정리하였다.

Table 4 Tersoff potential parameters

Parameters	Value(Si)	Value(C)
A (eV)	1830.8	1769.0
B (eV)	471.18	419.23
λ (Å ⁻¹)	2.4799	2.4451
μ (Å ⁻¹)	1.7322	1.7047
r_0 (Å)	2.7	2.8
r_1 (Å)	3.0	3.1
n	0.78734	0.75627
β	1.1000×10^{-6}	9.0166×10^{-7}
c_i	100390	106430
d_i	16.218	15.652
h_i	-0.59826	-0.43884

2.2.7 Stillinger-Weber 포텐셜⁽¹⁸⁾

Stillinger와 Weber는 Si, GaAs, Ge, C와 같이 가장 안정적인 격자구조인 다이아몬드형 격자구조의 분자들에 관한 포텐셜을 제안했다. 또한, 세 입자간 포텐셜 에너지의 확장에 있어서 결합의 방향성을 접목시켰다.

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{ij} \Phi(r_{ij}) + \sum_{ijk} \{g(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) + g(r_{ji}, r_{jk}, \theta_{ijk}) + g(r_{ki}, r_{kj}, \theta_{ikj})\} \quad (24)$$

$$\Phi(r_{ij}) = \begin{cases} \epsilon A [B \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^p - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^q] e^{\left(\frac{1}{r_{ij}} - \frac{1}{\sigma}\right)} & r_{ij} < r_o \\ 0 & r_{ij} > r_o \end{cases} \quad (25)$$

$$g(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) = \epsilon \lambda e^{\left[\frac{\gamma}{r_{ij}/\sigma - r_o} + \frac{\gamma}{r_{ik}/\sigma - r_o}\right]} \cos(\theta_{jik} + \frac{1}{3})^2 \quad (26)$$

Si와 Ge 원자에서 사용되는 파라미터들을 Table 5에 나타내었다.

이러한 포텐셜들에 계산의 효율화를 위해 도입하는 cut-off 거리 밖의 외부 원자들에 대한 무시로 인하여 truncation error, $\Phi(R_C)$ 를 야기시키고, 그것은 곧 에너지 보존법칙의 파괴나 시뮬레이션 원자들의 비물리적인 거동을 야기시킬 수 있다.

따라서 이러한 현상을 방지하기 위하여 포텐셜의 값을 식 (27)과 같이 조정해 주는 것이 필요하다. Cut-off 거리에서의 포텐셜 값을 조정(shift)하는 방법을 Fig.2의 오른쪽에 확대하여 나타내었다.

Table 5 SW potential parameters

Parameters	Value(Si)	Value(Ge)
ϵ (eV)	2.315	1.740
σ	2.095	2.215
A (eV)	7.049	7.0945
B	0.60222	0.60222
r_0	1.80	1.80
λ (eV)	21.0	19.5
γ	1.20	1.20
p	4	4
q	0	0

$$\Phi(r_{ij}) = \begin{cases} \Phi(r_{ij}) - \Phi(R_c) - (r_{ij} - R_c) \left\{ \frac{d\Phi}{dr} \right\}_{R_c} & r_{ij} \leq R_c \\ 0 & r_{ij} > R_c \end{cases} \quad (27)$$

2.3 각종 포텐셜의 국소적 응력

두 입자간 포텐셜을 이용한 경우, 계 전체의 평균적 응력(국소적 응력)은 이하의 형태로 정의할 수 있다.

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} (m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \sum_{j=1, j \neq i} q_{ij}^\alpha \cdot F_{ij}^\beta) \quad (28)$$

또, EAM, FS 포텐셜을 이용한 경우는 이하의 형태로 정의된다.

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} (-m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_{j=1, j \neq i} V'_{eff}(q_{ij}) \frac{q_{ij}^\alpha q_{ij}^\beta}{q_{ij}}) \quad (29)$$

q_{ij}^α 는 원자간 벡터 q_{ij} 의 α 성분이고, Ω 는 원자 한 개가 점유하는 체적이고, 각 원자마다 각 스텝에 따라 다른 양이지만, 초기의 격자정수 α 를 이용해서 $\Omega = \alpha^3/2$ 으로 주어진다. V'_{eff} 는 유효 포텐셜이라고 부르고, 다음 식으로 표시된다.

$$V'_{eff}(q_{ij}) = \Phi(q_{ij}) - 2f'(\rho_i)\rho'(q_{ij}) \quad (30)$$

2.4 앙상블

시뮬레이션의 입자수 N , 전 에너지 E , 체적 V 의 3개의 양이 일정하게 유지되는 통계 모집단인 NEV 앙상블(micro canonical ensemble)을 생각하면, 식 (2)에서 보여준 선형 상미분 방정식의 뉴턴 방정식이 운동방정식이 된다. NEV 앙상블 이외, NTV(N, T, V가 일정한 앙상블이며 정준(canonical) 앙상블이라고도 말함), NHP, NTP, μ VL, μ VT, 다섯 개 앙상블에 대한 분자동역학법이 개발되어 있다. 예를 들면, 고립된 마이크로 클러스터 시뮬레이션

(NEV 또는 NTV 앙상블을 사용), 고체의 구조 상전이나 유리(glass)전이, 결정화 과정, 용해 과정 등의 시뮬레이션(NTP 앙상블을 사용), Zeolite 나 결정 기판 위에서의 원자와 분자의 흡착 시뮬레이션(μ VT 앙상블을 사용) 등이 해석되고 있다. 이와 같이 분자동역학법은 다양한 재료의 미시적 거동 문제를 취급할 수 있는 중요한 연구 수단으로 각광 받고 있다.

2.5 입자의 초기상태의 결정

원자의 운동방정식이 2개의 상미분 방정식이므로 해를 구하기 위해서는 초기조건으로써 초기의 기준시간 $t=0$ 에서 각 원자의 초기위치 $r_i(0)$ 와 각 원자의 초기속도 $v_i(0)$ 를 시뮬레이션의 목적에 따라 적절히 설정할 필요가 있다. 액체와 기체의 경우에는 초기위치를 동밀도의 결정을 이용하는 것이 좋다. 그 외 방법으로 초기 위치를 무질서하게 배열하는 방법도 고려되고 있지만, 단거리 상호작용이 강한 경우에는 이 방법은 적당하지 않다. 이것은 유연히 두 입자가 매우 근접하게 배치되면 입자간에 매우 강한 힘이 작용하여 다음 스텝에서 이들 입자가 비현실적 거동을 하기 때문에 이것을 피하지 않으면 안되기 때문이다.

따라서, 결정체를 대상으로 하는 경우는 결정의 격자구조와 후술하는 주기경계조건을 고려하여 초기 원자위치가 결정된다. 통상 초기조건을 설정할 때, 초기속도의 방향을 균일난수의 발생에 의해 랜덤하게 설정하고, 초기속도의 크기는 각 입자의 운동에너지($mv^2/2$)의 평균이 $3k_B T/2$ 정도가 되도록 한다. 그러기 위해서는 입자의 초기속도가 맥스웰 분포(Maxwell distribution)가 되도록 설정하는 것이 바람직하다(통계역학에서는 평형상태의 입자의 속도가 맥스웰 분포를 따름). 즉, 온도가 T 일 때 입자의 속도 v 의 성분은 다음의 맥스웰 분포에 따르도록 결정한다.

$$P(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left\{-\frac{\frac{1}{2}mv_i^2}{\pi k_B T}\right\} \quad (31)$$

여기서 $P(v_i)$ 는 v_i 의 속도분포를 나타내는 확률밀도이다. 식 (31)에 따르면 속도 v_x, v_y, v_z 의 평균값이 0이고 분산은 $(k_B T/m)^{1/2}$ 인 정규분포 형태가 된다. 이 분포에 의해 구해지는 계의 중

심속도는 일반적으로 0이 아니다. 계에 관한 성질은 계가 정지상태에서의 성질을 나타내므로 입자 i 의 초기속도를 다음과 같이 보정하면 계 전체의 중심의 초기속도를 0으로 할 수 있다.

$$\vec{v}_i'(0) = \vec{v}_i - \frac{1}{N} \sum_j \vec{v}_j \quad (32)$$

여기서 N 은 입자의 개수, $v_i(0)$ 는 수정 후의 속도, v_i 는 수정 전의 속도이다.

2.6 주기경계조건

MD에서는 계산기의 능력에 의해 해석 가능한 입자의 수가 제한되어 있어 대상으로 하는 물체 전체를 그대로 해석하는 경우는 매우 드물다. 또한 금속재료를 대상으로 하는 경우는 표면근방과 내부에서 그 물성이 약간 다른 것을 고려해야 한다. 따라서 MD에서 표면의 영향을 받지 않는 재료 내부에서의 거동을 효과적으로 파악하기 위해 주기경계조건(Periodic boundary condition)을 고려하는 방법이 이용되고 있다. 이는 엄청난 많은 수의 원자로 구성되는 실제 재료의 거시적인 특성의 본질은 주기경계조건을 이용하여 표면, 벽의 영향을 제거하는 것에 의해 어느 정도의 수의 원자로 구성되는 집단의 특성으로부터 설명할 수 있을 것으로 생각할 수 있기 때문이다.

Fig. 3은 주기경계조건을 도시화 한 것으로, 중앙의 정방형을 기본 셀(fundamental cell)이라고 하고 이것 이외의 점선으로 나타낸 상하, 좌우의 셀을 이미지 셀(image cell) 또는 복제 셀(replica cell)이라고 한다. 분자동력학에서 운동방정식은 기본 셀 내의 N 개 입자에 대해서만 풀지만, 입자에 상호 작용하는 힘은 기본 셀과 이미지 셀을 구분하지 않고 컷오프(cut-off) 반경 내에 있는 모든 입자들에 대해서 고려한다. 한편 기본 셀 이외에 이미지 셀도 고려하기 때문에, 비록 기본 셀 내의 모니터링하는 입자 수가 적을지라도 그 주위의 모든 입자를 시뮬레이션한 것과 같게 된다. 이 경계조건 하에서는 입자수가 수 백개 정도의 계가 운동하여 나타나는 열역학적 특성 등이 거시적인 계의 특성을 잘 나타낸다는 것이 알려져 있다. 그럼에서와 같이 기본 셀 내의 입자의 운동과 동일한 운동이 이미지 셀에서도 일어나고 있으므로 생각하고 있으므로 시뮬레이션 중에 기본 셀의 밖으로 나간 입자는 마주보는 면의 벽의 상대

위치로부터 동일속도로 들어오는 것으로 취급한다. 따라서 기본 셀 내의 입자 수는 일정하게 유지되며 주기경계조건에서는 입자는 벽으로부터 힘을 받지 않는 것이 된다. 그러나 기본 셀의 벽을 고정된 탄성 벽으로 취급하는 경우는 벽에 부딪치는 입자는 탄성적으로 돌아와 입자의 운동범위는 기본 셀 내에 한정되고, 이 고정 탄성 벽의 경계조건에서는 입자는 근방의 다른 입자뿐 아니라 탄성 벽으로 취급한 셀의 벽으로부터도 힘을 받는다.

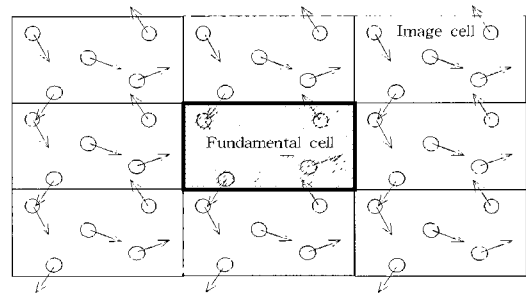


Fig. 3 Periodic boundary condition

Fig. 3에서 각 변의 길이가 각각 a, b, c 인 이미지 셀 내에 있는 입자의 위치는, 좌표원점과 일치하는 기본 셀의 정점과 유사한 위치에 있는 정점의 좌표를 지정하면 결정된다. 이 정점의 위치 벡터는

$$(\mathbf{r}_i)_{image} = \mathbf{r}_i + l\mathbf{a} + m\mathbf{b} + n\mathbf{c} \quad (33)$$

으로 나타내진다. 기본 셀의 경우는 $(l, m, n) = (0, 0, 0)$ 이다.

이 주기경계조건 하에서 계의 운동에너지는 기본 셀 내의 입자의 운동에너지의 합으로 나타내지지만, 계의 포텐셜 에너지(Φ)는 기본 셀 내의 입자간에 작용하는 포텐셜 에너지($\Phi_{fundament}$)와 기본 셀과 이미지 셀 내의 입자간에 작용하는 포텐셜 에너지($\Phi_{mirror-image}$)와의 합으로 주어진다.

$$\Phi = \Phi(\mathbf{r}_{ij})_{fundament} + \Phi(\mathbf{r}_{ij})_{mirror-image} \quad (34)$$

2.7 입자등록법

MD 문제에서 계산시간의 대부분은 힘의 계산에 소비된다. 힘의 계산은 입자 수의 제곱에 비례하기 때문에 입자수가 많아지면 엄청난 계산시간이 요구된다. 이에 대한 계산의 고속화 수단으로 입자등록법(verlet list⁽¹⁹⁾ or bookkeeping method)이 자주 이용된다. Fig. 4는 입자등록법의 개념도

를 나타낸 것이다.

입자 j 에 작용하는 힘을 구하기 위해서는 먼저 j 를 중심으로 포텐셜이 작용하지 않는 거리 (R_C)보다 먼 거리(R_{BK})를 결정한다. R_{BK} 이내에 있는 모든 입자를 등록하여 그 입자만을 고려하여 입자 j 에 작용하는 힘을 구한다.

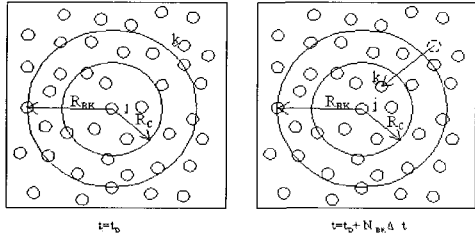


Fig. 4 Verlet list method(Bookkeeping)

그리고 어떤 시간($N_{BK}\Delta t$, N_{BK} : 등록 스텝수, Δt : 매 시각) 후에 입자 j 로부터 R_{BK} 이내에 있는 입자를 등록하여 갱신한다. 이 조작을 반복하면 R_{BK} 의 범위 밖의 입자는 고려하지 않으므로 계산 시간의 단축이 가능하다. 그런데 N_{BK} 과 R_{BK} 를 결정할 때에 $N_{BK}\Delta t$ 의 시간사이에서 R_{BK} 보다 먼 거리에서 R_C 이내의 범위로 진입하는 입자(그림중의 입자 k)가 없도록 하지 않으면 안 된다. 왜냐하면 입자 k 는 t_0 의 시점에서 등록 되어 있지 않기 때문에 R_C 이내에 진입하여도 입자 j 와의 작용은 고려되지 않기 때문이다. 따라서 이 두개의 정수를 결정하기 위해서는 다음 식을 만족하도록 하여야 한다.

$$R_{BK} - R_C \geq VN_{BK}\Delta t \quad (35)$$

2.8 계의 온도 제어 방법

온도의 영향에 의한 계의 거동의 변화를 시뮬레이션하는 경우는 계의 온도를 일정한 값으로 제어하는 것이 바람직하다. 이것을 온도제어 (temperature control)라고 하고, 이 때에 자주 이용되는 간단한 방법이 속도 스케일링법(velocity scaling method)이다. 통계 열역학에 대한 고찰로부터 계의 온도는 입자의 질량과 속도를 이용하여 다음의 운동 에너지 식에서 계산된다.

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_i^N m_i v_i^2 = \frac{3}{2} Nk_B T \quad (36)$$

따라서, 즉 계의 온도는 입자속도를 이용하여

$$T = \frac{\sum_i^N m_i v_i^2}{3Nk_B} \quad (37)$$

으로 구해진다. 따라서 목표의 온도를 T_0 , 어떤 시각에서 온도를 T 라고 하면 각각에서 입자속도 v_{i0} 와 v_i 는 식 (36)으로부터

$$v_{i0} = \left(\frac{3Nk_B T_0}{\sum m_i} \right)^{0.5}, \quad v_i = \left(\frac{3Nk_B T}{\sum m_i} \right)^{0.5} \quad (38)$$

으로 나타내지고 식(38)으로부터 다음 식이 얻어진다.

$$v_{i0} = v_i \left(\frac{T_0}{T} \right)^{0.5} \quad (39)$$

이상으로부터 계의 온도를 T 로부터 T_0 로 유지하기 위해서는 각 순간에 구해지는 각 입자의 속도 v_i 를 식 (39)의 v_{i0} 로 치환하면 된다. 즉 각 입자의 속도를 일정한 비율로 증가시키거나 감소시켜 강제적으로 계의 온도를 설정 값에 일치시키는 방법이다. 그러나 어떤 계에서도 어느 정도의 입자의 요동은 허용되어야 하므로 이 조작은 매 스텝마다 행하지 않고 일정한 스텝간격마다 수행한다. 이렇게 온도제어를 행하면 외부계와의 에너지 이동은 일어나지 않으므로 내부에너지(포텐셜에너지+운동에너지)가 일정한 NEV 양상블에 대한 MD 계산이 된다.

그러나, 모든 입자의 속도를 이와 같이 조절하는 것은 막대한 계산 시간을 요구하게 된다. 이에 Andersen⁽²⁰⁾은 속도의 정규 분포로부터 궤도의 짧은 영역을 선택하여 치환하는 Monte Carlo 법과 유사한 Andersen thermostat을 제안했다. 이 방법은 랜덤하게 선택된 원자들의 속도만을 일정한 계산 스텝마다 목표 온도에 해당하는 Maxwell-Boltzmann 분포로 바꾸는 것이다.

2.9 수치해석기법

2.9.1 Verlet algorithm⁽¹⁹⁾

분자동역학의 가장 중요한 Newton의 운동방정식을 수치적으로 푸는 수치해석법 중에서 NEV 양상블에 가장 널리 이용되고 있는 것이

Verlet algorithm이다. 기존의 Verlet algorithm에서 속도 $v_i(t)$ 는 시각 $t + \Delta t$ 와 $t - \Delta t$ 에서의 위치좌표를 각각 시각 t 에서 테일러 전개하여

$$\bar{v}_i(t) = \frac{\bar{r}_i(t + \Delta t) - \bar{r}_i(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (40)$$

으로 계산된다. 한편, 계산 수행 시 Truncation error를 줄이기 위해 Modified Verlet algorithm이 제안되었다. 이 방법에서 차분식은

$$\bar{r}_i(t + \Delta t) = \bar{r}_i + \Delta t \cdot \bar{v}_i(t) + (\Delta t)^2 \frac{\bar{F}_i(t)}{m_i} \quad (41)$$

$$\bar{v}_i(t + \Delta t) = \bar{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{2m} \{ \bar{F}_i(t + \Delta t) + \bar{F}_i(t) \} \quad (42)$$

$$\Delta \bar{F}_i(t + \Delta t) = \Delta t \cdot \bar{v}_i(t) + \frac{(\Delta t)^2}{2m} \bar{F}_i(t) \quad (43)$$

$$\bar{r}_i(t + \Delta t) = \bar{r}_i(t) + \Delta \bar{F}_i(t + \Delta t) \quad (44)$$

으로 나타내지고 식 (44)의 $r_i(t + \Delta t)$ 를 이용하면 시간 $t + \Delta t$ 에서 힘 $F_i(t + \Delta t)$ 가 계산되고,

$$\begin{aligned} \Delta \bar{v}_i(t + \Delta t) &= \bar{v}_i(t + \Delta t) - \bar{v}_i(t) \\ &= \frac{(\Delta t)^2}{2m} \{ \bar{F}_i(t + \Delta t) + \bar{F}_i(t) \} \end{aligned} \quad (45)$$

속도가 $v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \Delta v_i(t)$ 으로 구해진다. 위에서 서술한 Verlet 법을 사용하면 선형 상미분 방정식인 NEV 양상불을 풀 수 있다. 그러나 그외 (NTV, NHP, NTP 등)의 양상불은 비선형 상미분 방정식으로 나타내지므로 이 경우는 후술의 Gear법에 의해서 풀 수 있다.

2.9.2 Gear method⁽²¹⁾

원자의 궤적은 시간에 대한 연속 함수이므로, 시각 $t = t + \Delta t$ 에서의 위치, 속도, 가속도 등은 시각 t 에 대한 Taylor 급수 전개로 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} r^p(t + \Delta t) &= r(t) + \Delta t v(t) + (\Delta t)^2 a(t) / 2 \\ &\quad + (\Delta t)^3 b(t) / 6 + \dots \\ v^p(t + \Delta t) &= v(t) + \Delta t a(t) + (\Delta t)^2 b(t) / 2 + \dots \quad (46) \\ a^p(t + \Delta t) &= a(t) + \Delta t b(t) + \dots \\ b^p(t + \Delta t) &= b(t) + \dots \end{aligned}$$

이 새로운 위치벡터 $r^p(t + \Delta t)$ 을 이용하면, 시각 $t + \Delta t$ 에서의 힘 $F(t + \Delta t)$, 즉 가속도 $a^c(t + \Delta t)$ 을 계산한다. 가속도로부터 예측된 가속도 $a^p(t + \Delta t)$ 의 오차를 계산할 수 있다.

$$\Delta a(t + \Delta t) = a^c(t + \Delta t) - a^p(t + \Delta t) \quad (47)$$

이 차를 예측자에 더하면 수정자가 얻어진다.

$$\begin{aligned} r^c(t + \Delta t) &= r^p(t + \Delta t) + c_0 a(t + \Delta t) \\ v^c(t + \Delta t) &= v^p(t + \Delta t) + c_1 a(t + \Delta t) \\ a^c(t + \Delta t) &= a^p(t + \Delta t) + c_2 a(t + \Delta t) \\ b^c(t + \Delta t) &= b^p(t + \Delta t) + c_3 a(t + \Delta t) \end{aligned} \quad (48)$$

Gear는 여기서 나오는 계수 c_0, c_1, c_2, c_3 를 궤적의 계산 정밀도와 안정성이 실현되도록 결정하였고, 이 값들을 Table 6에 보여주었다.

Table 6 Parameters of Gear method

Order	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5
3	0	1	1			
	1/6	5/6	1	1/3		
5	19/12	3/4	1	1/2	1/12	
6	0	251/3	1	11/18	1/6	1/6
	3/20	60				0

2.10 통계학적 물리량의 측정과 계산

분자동력학에서 정량적 측정치들은 전체 시스템에 대한 물리량들의 시간에 대한 평균값을 취한다. 왜냐하면, 이러한 물리적 양들은 입자의 좌표와 속도의 함수로 이루어져 있으며, 진동하는 입자들의 거동을 해석하는 것이기 때문이다. 예를 들어 시간 t 에서 임의의 물리량을 A 라고 가정하면,

$$A(t) = f(r_1(t), \dots, r_N(t), v_1(t), \dots, v_N(t)) \quad (49)$$

로 나타나고 이의 평균치는

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N_T} \sum_{t=1}^{N_T} A(t) \quad (50)$$

와 같이 구할 수 있다.

3. 분자동력학에 의한 해석 예

3.1 파괴메카니즘의 해석

A.Nakatani⁽²²⁾는 그의 논문에서 3가지 파괴모드에 따른 크랙거동을 연구하였다. 그는 실제적인 모델에 접근하기 위해 선단에서 조금 떨어진 부분은 동적양해법(dynamic explicit method)을 이용한 유한요소 해석하였고, 유한요소 해석에서 얻어진 절점 속도를 크랙선단에 분자 배치한 모델의 경계조건으로 하여 분자동역학 해석을 수행하였다. Fig. 5는 유한요소법과 분자동역학법의 결합모델을 나타내고 있다. a)는 집중질량계를 나타내고 있고, b)는 유한요소 분할한 그림을, 그리고 c)는 크랙 선단주위를 분자동역학을 이용하여 모델링한 그림이다.

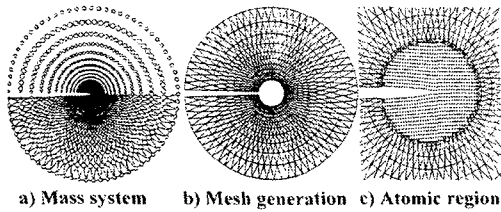


Fig. 5 Mesh generation and atomic arrangement (Combination of FEM and MD)

그는 위의 모델의 경계부에 있는 원자에 대해 응력확대계수 K_I 에 상당하는 변위속도를 부여하여 모드 I의 하중을 묘사하였다.

3.2 하중하에서의 전위의 거동해석

Kim⁽²³⁾은 $\alpha-Fe$ 원자로 이루어진 모재의 (110) 면에서 전위의 생성과 단축부하 하에서의 전위의 움직임에 대해 Johnson 포텐셜을 이용하여 시뮬레이션하여, 부하속도와 계의 온도가 전위의 거동과 전위운동 속도에 미치는 영향을 고찰하였다.

인장 하중 하에서 전위는 Fig. 6과 같이 위쪽 방향(upward)으로 활주하여 시편을 빠져나가고, 압축 하중 하에서는 반대로 전위가 Fig. 7과 같이 아래쪽으로 활주하여 시편을 빠져나가는 것을 알 수 있었다.

3.3 나노젯의 분사해석

Moseler와 Landman⁽²⁴⁾은 나노젯 특성에 대한 분자동역학 시뮬레이션을 하였다. 노즐과 액체젯의 분자는 각각 금과 propane으로 설계되었으며, 이 시뮬레이션을 통하여 연속체 이론에 근거한

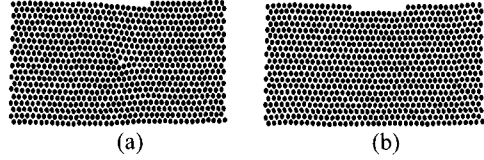


Fig. 6 Molecules of strain of (a) $\epsilon=0.0$, (b) $\epsilon=0.024$ under 3m/s tension in 300K

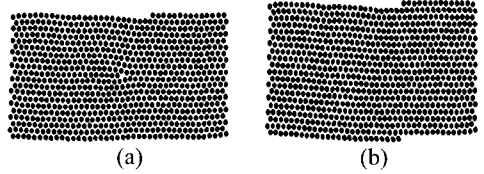


Fig. 7 Molecules of strain of (a) $\epsilon=0.03$, (b) $\epsilon=0.054$ under 10m/s compression in 300K

근거한 제트의 안정성 모델을 수정하였다. 기존의 거시적 모델에 열적동요 특성을 보완하여 분자동역학 시뮬레이션 결과와 유사한 결과는 나노젯 실험 양상을 잘 재현해주고 있음을 밝혔다.

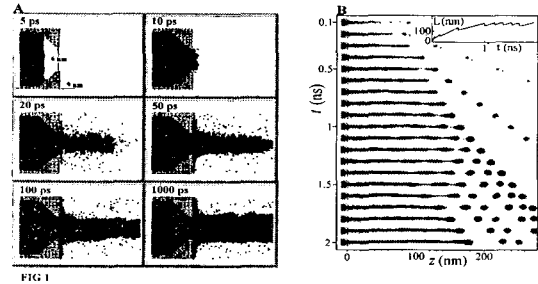


Fig. 8 Propane nanojets through 3-D gold nozzle

3.4 나노 인덴테이션 해석

Fig. 9은 2002년 7월에 Nature 지에 발표된 Ju Li와 Krystyn J. Van Vliet⁽²⁵⁾의 나노 인덴테이션에서의 탄성한계와 초기 소성의 원자레벨의 특성에 관한 연구결과이다. Cu를 모재로 하여 구형 압입자를 이용한 인덴테이션 시뮬레이션과 FE M 해석을 통하여 압입에 의한 원자들의 응집과 전위 발생을 고찰하였다.

3.5 나노 리소그래피 해석

Kim⁽²⁶⁾은 MEMS 부품의 제조를 위한 나노 리소그래피 공정의 해석을 하였다. 반구형의 강체 다이아몬드 공구와 구리를 모재로 하여 Morse 포텐셜을 따르는 원자들의 거동, 칩 형성, 가공력(절삭력: 주분력, 배분력, 폭방향력)의

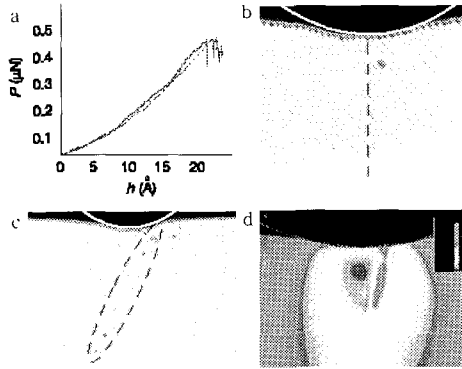


Fig. 9 Correspondence of MD and FEM simulations in cylindrical indentation of Cu

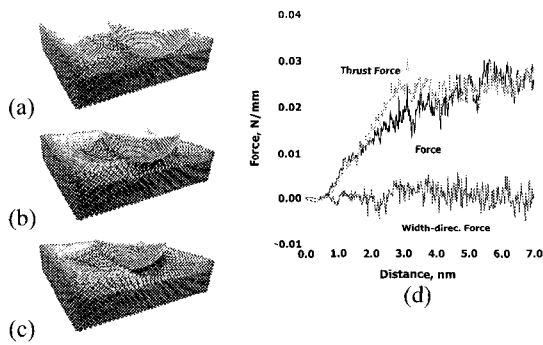


Fig. 10 AFM based nano lithography

변화 및 소성 영역에서의 전위거동 등을 고찰하였다.

Fig. 10의 (a)-(c)는 공구가 각각 4.2, 5.6, 7.0 nm의 변위를 가질 때의 시뮬레이션 결과를 나타낸 것이다. 그리고 (d)는 공구의 진행에 따른 절삭력의 변화를 나타내고 있다.

3.6 Hybrid method를 이용한 공진기 설계

R. E. Rudd와 J. Q. Broughton⁽²⁷⁾은 유한요소(FE), 분자동력학(MD), 반 경험적인 Tight-Binding(TB)을 이용하여 실리콘 재료에서 크랙의 전파와 마이크로 레조네이터의 동적거동을 해석하였다. 여기서 주목할 수 있는 것은, 기존의 분자동력학의 한계로 여겨진 방대한 계산량에 따른 시뮬레이션 크기의 제한을 FE와 TB를 조합하여 극복하고, 실제 크기의 거동해석을 하였다는 것이다.

이러한 Hybrid method와 병렬화 처리를 통하여, 나노 스케일에서 마이크로-메조 스케일까지를 무리

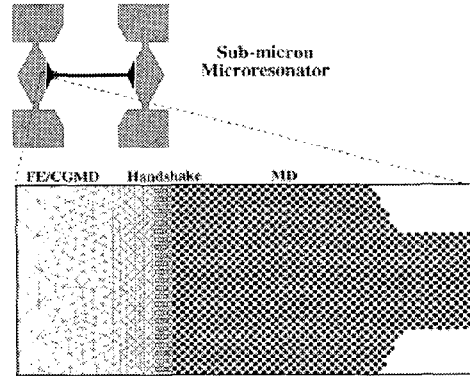


Fig. 11 Schematic diagram showing the mesh refinement used to couple length scales in the micro-resonator

없이 정확하게 해석할 수 있게 되었다.

지금까지 간단히 살펴본 예들 이외에도, 분자동력학을 이용한 분야는 미소절삭, 마찰 메커니즘, 금 속의 결정화 과정, 액적이나 기포의 형성, 다양한 MEMS나 NEMS의 구동기구와 초소형 기계부품의 거동해석, 의공학 분야의 뼈의 재형성 해석등에서도 활발한 연구가 진행되고 있다.

4. 결론

이상에서는 재료공학에서 분자·원자레벨에서의 재료의 궁극적인 변형거동을 해석하기 위해 널리 사용되기 시작한 분자동력학의 개념 이론에 대한 개념을 상세히 설명하였다. 거시적인 관점에서의 근래의 유한요소법은 재료의 연속체적인 거동을 묘사하는데 적합하지만 파괴의 근원적인 문제에 해당하는 원자, 분자레벨에서의 미시적인 거동의 묘사에는 어려움을 갖고 있었다. 하지만 분자동력학에서는 재료를 이산요소로써 취급함에 따라 원자, 분자레벨에서의 재료의 거동을 좀더 실제적으로 나타낼 수 있는 장점을 갖고 있어 재료의 파괴, 초미세 절삭 거동, 나노스케일의 트라이볼로지 해석, 실리콘 공정 해석 및 카본 나노튜브(Carbon nanotube, CNT)의 응용 해석 등에 널리 이용되고 있다. 하지만 분자동력학에서 행해지는 분자간의 물성치와 분자수가 결합되어져 천문학적인 계산량을 만들어 내기 때문에 아직까지는 컴퓨터 계산용량의 한계에 의해 정량적인 접근보다는 정성적이고 개념적인 접근이 많은 실정이다. 한편, 계산상의 제약을 극복하기 위해 여러 개의

분자들의 집합을 준분자 하나로 간주하여 해석하는 준분자동역학(Quasi-Molecular Dynamics, QMD)을 이용하면 실제 재료 크기의 모델링이 가능하다.⁽²⁸⁻²⁹⁾ 또한 MD가 원자레벨에서 재료의 미시적인 변형거동을 잘 묘사하는 수단으로 활발히 연구되고 있으나, 아직 해석에 사용하는 포텐셜의 형태, 경계조건, 시간 스텝 등에 따라 결과가 좌우되는 문제점과 대상으로 하는 해석영역이 수십 nm 정도가 한계이고 계의 반응이 일어나는 시간도 1~100ns로 비현실적인 문제점이 남아 있다.

하지만 이러한 문제점들은 점진적인 컴퓨터의 발전과 분자동역학 관련 알고리즘의 진보에 따라 해결되어질 수 있을 것으로 예상되며, 이에 따라 분자동역학 관련 연구와 나노 공정의 전산모사 기술로서 그 적용도 점차 늘어날 것으로 기대되어진다.

후 기

본 연구는 과학기술부 2002나노핵심기반기술개발사업(M10214000237- 02B1500-03810) 연구비에 의하여 수행되었으며, 이에 관계자 여러분들께 감사 드립니다.

참 고 문 헌

(1) Allen, M. A., Tildesley, D. J., 1989, "Computer simulation of liquids", Oxford University Press, New York.

(2) 김영석, "분자동역학의 개요와 재료공학에의 응용 (I)(II)", 1998, 대한금속학회회보, 제 11권, 제 6호, pp.671~678; 2000, 재료마당, 제 13권, 제 7호, pp. 58~70.

(3) Alder, B. J., Wainwright, T. E., 1959, "Studies in molecular dynamics. I. General method", J. Chem. Phys. Vol. 31, pp. 459~466.

(4) Chang, R., 1970, "An atomistic study of fracture", Int. J. Fract. Mech., Vol. 6, No. 2, pp. 111~125.

(5) Paskin, A., Gohar, A., Dienes, G. J., 1980, "Computer simulation of crack propagation", Phys. Rev. Lett., Vol. 44, No. 14, pp. 940~943.

(6) Cheug, K. S. and Yip, S., 1994, "A molecular-dynamic simulation of crack-tip extension : the brittle-to-ductile transition, Modeling Simul.", Mater. Sci. Eng., Vol. 2, pp. 865~892.

(7) 中谷, 1992, "金屬結晶 の破壊機構の分子動力學法

による研究", 大阪大學 博士學位論文.

(8) Maekawa, K. and Itoh, A., 1995, "Friction and tool wear in nano-scale machining - a molecular dynamic approach", Wear, Vol. 188, pp. 115~122.

(9) Kim, D. E. and Suh, N. P., 1994, "Molecular dynamic investigation of two-dimensional atomic-scale friction", J. of Trib., Vol. 116, pp. 225~231.

(10) Trabado, G. P., Plata, O., Zapata, E. L., 2002, "On the parallelization of molecular dynamics codes", Computer Phys. Communications, Vol. 147, pp. 711~715.

(11) Hansen, J. P., McDonald, I. R., 1986, "Theory of simple liquids", 2nd Ed., Academic press, San Diego, California.

(12) Lennard-Jones, J. E., 1924, "The determination of molecular fields. I. From the variation of the viscosity of a Gas with Temperature", Proc. Ray. Soc., London, Vol. 106A, pp. 441~462.

(13) Ishida, Y., Mori, M., Hashimoto, M., 1983, "Molecular dynamical calculation of crack propagation in segregated grain boundaries of iron", Surface Sci., Vol. 144, pp. 253~266.

(14) Johnson, R. A., 1964, "Interstitials and vacancies in α -iron", Phys. Rev. A, Vol. 5, No. 134, pp. 1329~1336.

(15) Daw, M., Baskes, M., 1984, "Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals", Phys. Rev. B, Vol. 29, No. 12, pp. 6443~6453.

(16) Finnis, M. W., Sinclair, J. E., 1984, "A simple empirical N-body potential for transition metals", Phil. Mag. A, Vol. 50, pp. 45~55.

(17) Tersoff, J., 1985, "New empirical model for the structural properties of silicon", Phys. Rev. Lett., Vol. 56, No. 6, pp. 632~635.

(18) Stillinger, F. H., Weber, T. A., 1985, "Computer simulation of local order in condensed phases of silicon", Phys. Rev. B, Vol. 31, No. 8, pp. 5262~5271.

(19) Verlet, L., 1967, "Computer 'Experiments' on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones Molecules", Phys. Rev., Vol. 159, pp. 98~103.

(20) Andersen, H. C., 1980, "Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature", J. Chem. Phys., Vol. 72, No. 4, pp. 2384~2393.

- (21) Gear, C. W., 1971, "Numerical initial value problems in ordinary differential equations", Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- (22) Nakatani, A., 1993, "The analysis on the deformation behavior of the crystal grain boundary using molecular dynamics", Ph.D thesis, Osaka University. Osaka.
- (23) Kim, Y. S., Choi, D. Y., Park, J. Y., 1999, "Molecular dynamics studies for the generation and the movement of dislocation", Metals and Materials, Vol. 5, No. 4, pp. 329~337.
- (24) Moseler, M., Landman, U., 2000, "Formation, stability, and breakup of nanojets", Science, Vol. 289, pp. 1165~1169.
- (25) Li, J., Van Vliet, K. J., Zhu, T., Yip, S., Suresh, S., 2002, "Atomistic mechanisms governing elastic limit and incipient plasticity in crystals", Nature, Vol. 418, pp. 307~310.
- (26) Kim, Y. S., 2003, "Three dimensional molecular dynamics simulation of AFM-based lithography process for fabrication of nano components in MEMS applications", IUTAM2003 Symposium on Mesoscopic Dynamics in Fracture Process and Strength of Materials, Osaka, Japan.
- (27) Rudd, R. E., Broughton, J. Q., 2000, "Concurrent coupling of length scales in solid state systems", Phys. Stat. Sol. B, Vol. 217, pp. 251~291.
- (28) Greenspan, D., 1991, "Quasi-molecular modeling", World Scientific Publishing Co, New Jersey, USA.
- (29) Kim, Y. S., Park, J. Y., 1998, "Molecular dynamics simulation for microfracture behavior of material", KSME Int. J., Vol. 12, No. 3, pp. 388~395.