

## 다중물리 전산모사를 이용한 물성 최적화 이론 및 시뮬레이션

현상일<sup>1,a</sup>

<sup>1</sup> 한국세라믹기술원 기초소재융합본부 나노IT소재팀

### Material Design Using Multi-physics Simulation: Theory and Methodology

Sangil Hyun<sup>1,a</sup>

<sup>1</sup> Nano IT Materials Lab, Advanced Materials Convergence Division,  
Korea Institute of Ceramic Engineering and Technology, Seoul 153-801, Korea

(Received October 13, 2014; Revised November 17, 2014; Accepted November 21, 2014)

**Abstract:** New material design has obtained tremendous attention in material science community as the performance of new materials, especially in nano length scale, could be greatly improved to applied in modern industry. In certain conditions limiting experimental synthesis of these new materials, new approach by computer simulation has been proposed to be applied, being able to save time and cost. Recent development of computer systems with high speed, large memory, and parallel algorithms enables to analyze individual atoms using first principle calculation to predict quantum phenomena. Beyond the quantum level calculations, mesoscopic scale and continuum limit can be addressed either individually or together as a multi-scale approach. In this article, we introduced current endeavors on material design using analytical theory and computer simulations in multi-length scales and on multi-physical properties. Some of the physical phenomena was shown to be interconnected via a cross-link rule called 'cross-property relation'. It is suggested that the computer simulation approach by multi-physics analysis can be efficiently applied to design new materials for multi-functional characteristics.

**Keywords:** Computer simulation, First principle calculation, Multifunctional materials, Optimization

#### 1. 서론

첨단산업 발전에서 우수한 물성을 갖는 소재 개발은 매우 중요하다. 인류가 기원전부터 사용하여 오던 전통적인 소재를 비롯하여 철강 및 반도체, 초전도체

개발 등 20세기에 이뤄진 소재에 관한 연구는 21세기를 특징짓는 다양한 분야의 융합에 걸맞게 이를 위한 소재 개발의 새로운 방향이 모색되고 있다.

전자기물성이나 기계물성 외에도 열 및 광학 특성 등이 복합된 물성들의 최적화가 '다기능성 제품' 개발에 필수적으로 요구되어 가고 있다. 소형화 및 경량화 되고 있는 첨단 디바이스들은 동시에 다양한 기능들이 요구되는데, 단일 물성 최적화 방식으로는 이러한 복합적 요구를 충족시키기 어렵다. 작은 전자부품 하나에도 수십 가지의 서로 다른 기능들이 동시에

a. Corresponding author; shyun@kicet.re.kr

Copyright ©2014 KIEEME. All rights reserved.  
 This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

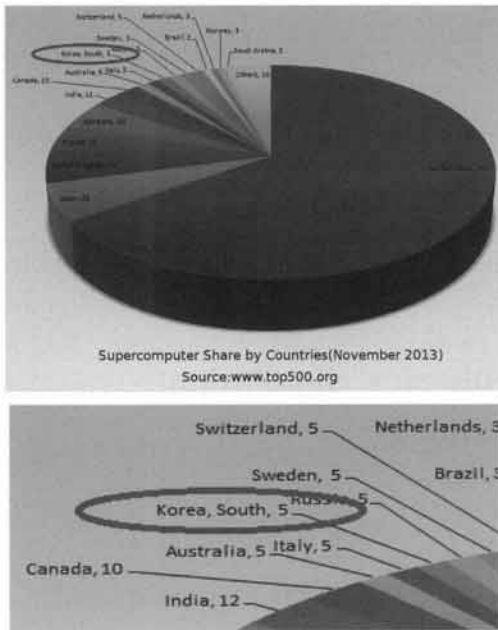


Fig. 1. Top 500 supercomputer shares by Countries (Nov. 2013) (from Wikipedia).

요구되는데, 이 같은 복합 물성을 최적화할 수 있는 기술은 앞으로 개발되어야 될 중요한 융합소재 생산 기술이라고 하겠다.

우수한 물성을 갖는 소재는 실험실에서 직접 개발하는 것이 제일 좋지만, 이러한 방식으로는 고 비용 및 긴 개발 기간이 요구된다. 따라서 이를 대체 및 보완하기 위해 최근 들어 컴퓨터 시뮬레이션이 활발히 도입되고 있다. 비약적으로 발전한 병렬화 등의 알고리즘 기법과 함께 대용량 메모리 및 고속 CPU 등의 하드웨어 개발에 힘입어 시뮬레이션 기술은 기술 개발 광범위하게 적용되어 가고 있는 실정이다. 특히 실험실에서의 개발이 용이하지 않거나 불가능한 나노소재 개발에는 매우 효과적이어서 다양한 분야에서 응용범위가 확대되어 가고 있다.

일반적으로 소재 개발 비용이 높게 요구되는 첨단 소재의 경우에 시뮬레이션 기법을 이용한 소재 개발은 비용 절감에 효과적이다. 현재 사용되고 있는 대부분의 주요 소재 설계용 시뮬레이션 기법이 미국, 유럽, 일본 등 소재 개발 비용이 큰 나라에서 더 활발히 개발되고 있음은 이런 이유 때문이기도 하다. 그림 1에서와 보는 바와 같이 우리나라는 경제 규모에 비해 아직은 슈퍼컴퓨터 보유가 적은 편이다. 또한 공학용 소프트웨어 개발도 미약한 수준이다. 이는 기술 선진국에

진입하는 중요한 기준으로 볼 수도 있으므로, 우리나라에서도 하드웨어 및 소프트웨어 개발 산업을 안정적으로 지원하는 한편 저작권 보호 등과 같은 제도적 기술 보호정책도 필요하다.

본 논문에서는 최근 개발되고 있는 소재 설계용 시뮬레이션 기술을 간략히 소개하고, 두 가지 이상의 복합물성을 동시에 극대화하는 다 기능성 소재 개발에 대한 연구 동향 및 컴퓨터 시뮬레이션 기법 적용의 사례들을 소개하고자 한다.

## 2. 실험 방법

### 2.1 단일 물성 최적화 시뮬레이션

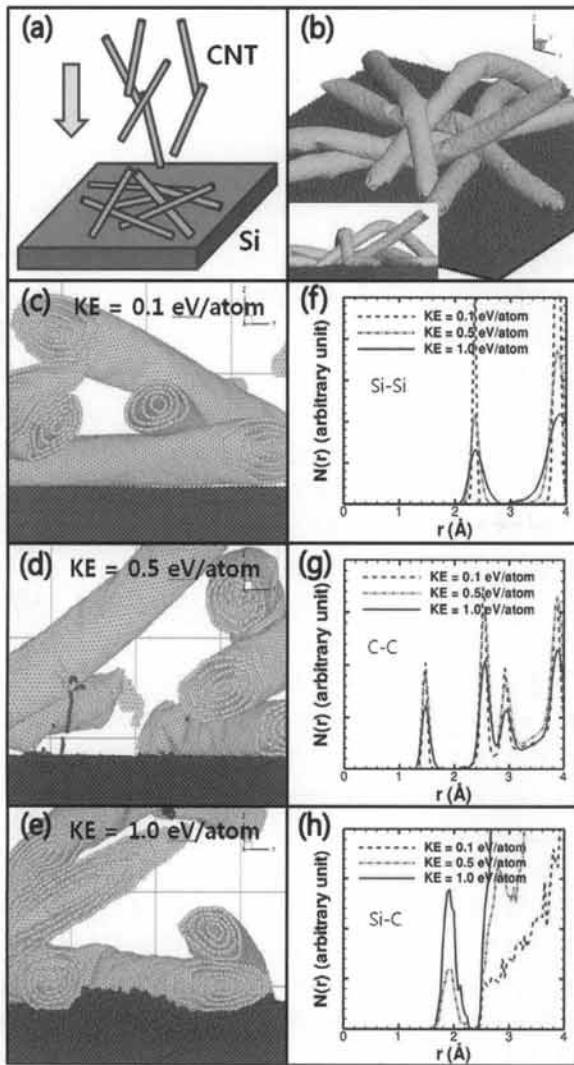
일반적으로 소재의 물성은 기계물성, 열물성, 전자기물성 등과 같이 다양한 형태로 나타나는데, 이들 물성 중에는 동일한 물리학적 현상으로 묘사되는 것들이 있다. 물리량은 서로 다르지만 같은 물리학 법칙을 따르기 때문에 동일한 수학적 형태로 묘사되는데, 이를 분류하면 아래 표 1과 같다 [1].

Table 1. Four different classes of steady-state effective media problems ( $F \sim K_e \cdot G$ ). Class A and B share many common features [1].

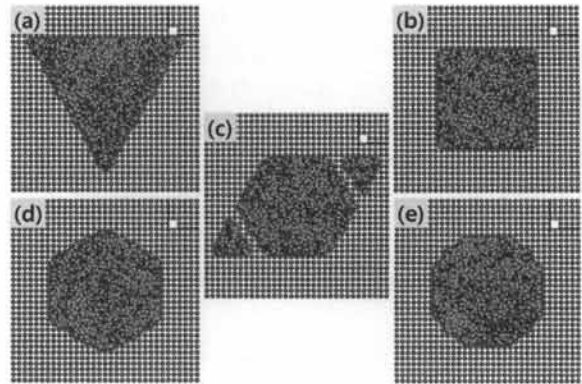
	General effective property ( $K_e$ )	Average Generalized intensity ( $G$ )	Average Generalized flux ( $F$ )
A	Thermal conductivity	Temperature gradient	Heat flux
	Electrical conductivity	Electric field	Electric current
	Dielectric constant	Electric field	Electric displacement
	Magnetic permeability	Magnetic field	Magnetic induction
	Diffusion coefficient	Concentration gradient	Mass flux
B	Elastic moduli	Strain field	Stress field
	Viscosity	Strain rate field	Stress field
C	Survival time	Species production rate	Concentration field
	NMR survival time	NMR production rate	Magnetization density
D	Fluid permeability	Pressure gradient	Velocity field
	Sedimentation rate	Force	Mobility

즉, 열전도 현상이나 전기 전도도는 동일한 수학적 형태로 묘사되므로 컴퓨터 시뮬레이션에서는 같은 미분 방정식에 의해 해석된다. 다음에서는 이러한 단일 물성을 해석하는 시뮬레이션 기술을 소개하겠다.

### 2.2 나노계면(Nano-interfacial) 구조 시뮬레이션



**Fig. 2.** Multiwall CNTs sequentially injected on a Si substrate (a) schematic and (b) molecular dynamic results. Interfacial morphologies (cross-sectional views on yz plane) for different kinetic energies are shown in (c) - (e), (f) The pair distribution of Si - Si. (g) The pair distribution plot of C - C, (h) The pair distribution plot of Si - C indicates the formation of Si - C chemical bonds ( $\sim 1.83 \text{ \AA}$ ) at high impact energies. The peak increases with the impact energy [5].



**Fig. 3.** Atomic models of nanochannels with various cross sectional shapes: (a) triangular (b) square, (c) kagome, (d) hexagonal, and (e) circular (oxygen: blue, hydrogen: green, wall: red) [9].

20세기 후반에 Suo Iijima에 의해 실험적으로 발견된 탄소 나노튜브는 우수한 기계적 강도 및 전기적 물성으로 인해 현재까지 전자기 디바이스에 응용하기 위한 많은 연구가 수행되어 왔다 [2,3]. 이 같은 연구는 유사한 탄소 구조체인 2차원 형태인 그래핀(graphene)으로 확장되어 2012년 노벨상을 수상하면서 오늘날까지 더욱 활발한 연구가 수행되고 있다 [4]. 전자기 디바이스에 활용되기 위해서는 합성 및 분산 등의 연구와 함께 다른 전자소재와의 연결 특성이 중요하다. 나노스케일의 소재, 특히 표면적이 큰 저차원 구조체는 발열에도 취약하므로 나노계면에서의 구조 안정성 확보가 중요하며, 이를 위해 전산모사를 이용하여 CNT-Si 기판 간의 계면 강도 및 패턴등에 대한 체계적인 연구가 가능하였다 [5].

그림 2는 CNT를 고속으로 실리콘 기판위에 분사하여 탄소원자와 실리콘 원자 간의 화학적 본드가 형성되는 과정을 분자동역학 (molecular dynamics, MD) 코드인 LAMMPS로 해석한 결과이다 [6,7]. 이와 같이 나노스케일에서 소재들의 물성 및 형성 과정 등에 대한 예측 및 물성의 평가가 시뮬레이션을 통해 가능해졌다. 또한, 전산모사는 고체 (solid state) 외에도 유체 (fluid state)와 같은 비정형의 소재 물성 해석에도 유용하다. 일반적으로 유동해석은 연속체 근사에 기반을 두는 유한요소해석 등의 방법이 적용되고 있지만, 나노스케일에서 원자들의 운동을 개별적으로 관찰하기 위해서는 분자동역학 시뮬레이션이 효과적이다 [8].

그림 3은 수 nm의 직경을 갖는 다양한 형태의 나노채널에 대해 물 분자들의 운동 및 유동량을 해석한 결과이다 [9]. 이 같은 결과는 연속체 해석에 의해 얻은 결과 및 표면/체적비에 의해 예측된 이론적 결과와도 잘 일치하며, 물 분자와 벽면과의 계면 강도에 따라 흐름의 특성이 변화함을 나타내었다.

### 2.3 전자기(electromagnetic) 물성 시뮬레이션

전자기 물성 중 에너지 밴드와 전도도를 예로 들자면, 에너지 밴드는 하이브리드 DFT (density functional theory) 방식에 의한 제일원리해석 (first principle calculation)으로 구할 수 있으며 실험값과도 잘 일치한다. 전도도의 경우는 그림 4의 예와 같이 Kubo formula에 의한 quantum transport 해석 방법이 개발되어 있다 [10,11]. 하지만 제일원리해석의 경우 수천 개의 원자모델로 제한되고 있는 상황이라, 다결정 및 grain boundary 등에 의해 나타나는 전자기 물성은 실험값과 잘 맞지 않는다.

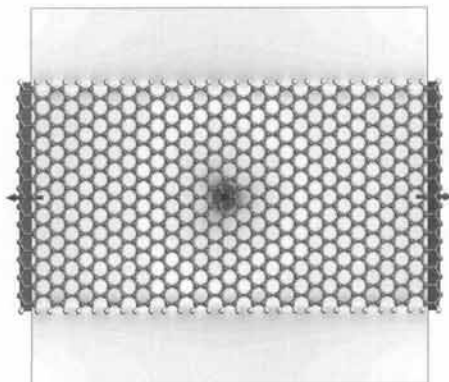


Fig. 4. Graphene transport device showing the effect of a nitrogen defect on electron transport (from Materials Studio, 2014 [12]).

자기 특성 (magnetic property)은 비교적 실험값과 잘 일치하는 것으로 알려져 있는데, 이는 이미 오래 전부터 인류에 의해 발견되어 일상생활에 활용되고 있는 성질이다 [13]. 자성에 대한 물리학적 이해는 19세기 초 오르스테드 (Hans Christian Ørsted)를 거쳐 Michael Faraday에 의해 이뤄졌다. 자기적 성질은 인력과 척력이 존재한다는 면에서 전기적 성질과도 유사하며 실제로 이 두 가지 물리현상은 유사한 수학적 틀에 의해 표현될 수 있다.

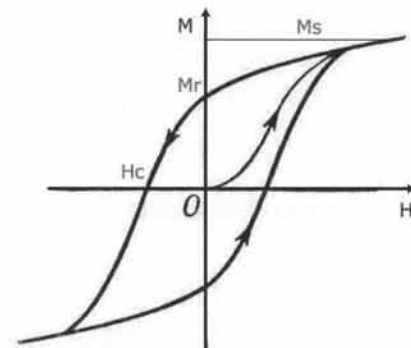


Fig. 5. Magnetic hysteresis curve.

자성을 갖는 소재는 외부 자기장과 소재의 자화되는 형태에 따라 반자성체 (diamagnetism), 상자성체 (paramagnetism), 강자성체 (ferromagnetism) 등으로 구분된다. 이 중 자성소재로 주로 활용되는 것은 외부 자기장이 없는 상태에서도 자화되는 강자성체로서, 우리가 일상생활에서 흔히 접하는 예로 영구자석이 있다. 보어-판레이우언 (Bohr-van Leeuwen) 정리 [14]에 따르면, 고전역학으로는 이러한 자기적 성질을 설명할 수 없었는데, 스핀의 개념과 파울리의 배타원리를 설명할 수 있는 양자역학이 발전하면서 설명이 가능한 것으로 알려져 있다.

자성체의 물성은 일반적으로 아래 그림 5와 같은 자기 이력곡선 (hysteresis curve)에 의해 표현된다. 자성체가 외부에 제공할 수 있는 최대 자기력인 포화자화 (saturation magnetization,  $M_s$ ), 외부자기력이 0일 때의 외부 자장값인 보자력 ( $H_c$ ), 외부자기장이 0일 때 자성체에서 발생하는 자기력인 잔류자화 ( $M_r$ ) 등 활용도에 따라 다양한 형태의 자성이 정의된다. 또한 포화자화가 크거나 이력곡선의 면적인 에너지적 ( $BH_{max}$ )이 높으면 강자성체 (hard magnet), 포화자화가 작고 에너지적이 낮으면 연자성체 (soft magnet)로 구분되기도 한다. 자기 이방성 (magnetic anisotropic energy, MAE)은 주로 소재의 결정성에 따라 나타나는 자기 에너지의 방향성을 나타낸다. 자기의 세기나 자기 이방성 등을 임의로 설계할 수 있으면 다양한 센서나 메모리 개발에 매우 유용할 것이다. 이를 위해서는 많은 양의 실험이 반복 수행되어야 하는 실험적인 방식과 더불어 원자레벨에서 소재의 물성을 예측할 수 있는 제일원리해석법이 많은 관심을 끌고 있다.

다음에서는 제일원리해석을 이용한 자성소재 설계의 한 예를 들고자 한다 [15]. 아래 그림 6에 나타낸

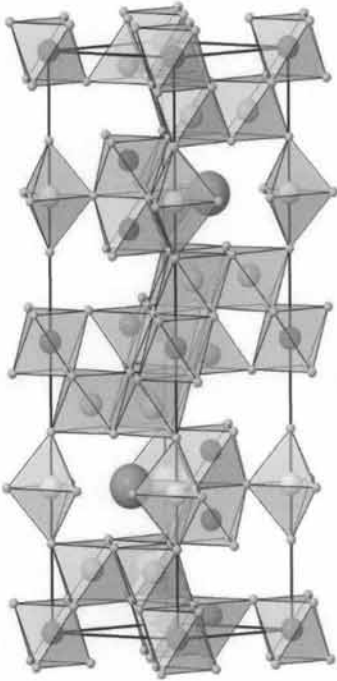


Fig. 6. An atomic configuration of SrFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub>.

SrFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub>(SFO)는 Hexagonal 격자에 P6<sub>3</sub>/mmc 공간 군을 가지며 격자 상수가 a = 5.88 Å, c = 23.01 Å인 소재로서 자기 모멘트가 단위 셀 당 20 μB를 갖는 강자성체이다. 이 소재에 5 μB를 갖는 Fe<sup>3+</sup> 이온의 배열이나 위치를 조절하거나 첨가물(Zn, Sn)등을 조합하여 자기 모멘트 등을 향상시킬 수 있음을 보이기 위해 VASP (Vienna Ab-initio simulation package) 이라는 상용 프로그램이 사용되었다 [16], 이를 통해 자기 모멘트가 역방향으로 배열되어 있는 Fe 이온들을 다른 이온들로 치환할 경우 전체 자기 모멘트를 최대 25 μB까지 증가시킬 수 있음을 규명하였다.

또한, 자기 이방성을 나타내는 에너지 E<sub>MAE</sub>는 아래 식 (1)과 같이 정의되는데, 제일원리해석을 통하여 결정 방향(100)와 (001)에 대한 전체 에너지의 차이를 구하여서 아래 식 (2)와 같은 자기 이방성 계수 K를 구하였다.

$$E_{MAE} = E_{(100)} - E_{(001)} \tag{1}$$

$$K = \frac{E_{MAE}}{V \sin^2 \theta} \tag{2}$$

여기서 V는 단위셀의 체적이며, θ는 (100)과 (001)의 결정방향 간의 각도를 나타낸다. 위 연구에 따르면 초기 SFO의 E<sub>MAE</sub>= 0.84 meV, K= 190 KJ/m<sup>3</sup>에서 Zn와 Sn의 치환함에 따라 E<sub>MAE</sub>= 0.45~0.53 meV, K= 100~120 KJ/m<sup>3</sup>로 자기 이방성은 다소 감소하였다.

### 2.4 다 기능성 소재의 물성 최적화

일반적으로 소재의 물성은 몇 가지 변수 즉 원자의 종류, 원자의 조성 및 미세구조 등에 의해 결정된다고 볼 수 있다. 소재의 특정 성능을 구현하기 위해 사용되는 원자의 종류에 따라 가장 기본적인 소재 물성이 결정된다고 할 수 있으며, 특정 원자들의 물성은 대부분 잘 알려져 있으므로 요구에 적합한 원자를 선택하는 과정은 가장 기본적인 소재 설계라고 할 수 있다. 하지만 한 가지 종류의 원자로는 다양한 물성을 동시에 구현하는데 한계가 있으므로 이를 위해서는 두 가지 이상의 원자들로 이뤄진 화합물이 필요하다. 이 경우 원자의 종류 및 비율에 따라 복합적인 물성의 조절이 가능해지는데 이 같은 과정을 '조성 최적화 (composition optimization)'라고 한다. 오늘날의 대부분의 복합물성 소재 개발은 이 같은 방식에 의해 이뤄지고 있다.

## 3. 결과 및 고찰

### 3.1 Hashin-Shtrikman 이론 및 최적 구조

현재까지 최적 소재 개발은 주로 단일 물성을 극대화하는 방식으로 이뤄져 왔다. 즉 기계적인 강도를 향상시키거나, 전기전도도 및 유전율 등을 극대화하기 위한 소재 개발 등이 이에 해당된다. 이러한 소재의 최적물성에 관한 연구는 꽤 오래 전부터 이뤄져 왔는데, 이론적인 연구 중에 대표적인 것으로 Hashin과 Shtrikman에 의해 제안된 '한계 (Bound) 이론'을 예로 들 수 있다 [17]. 이들은 서로 다른 전기 전도도 (σ<sub>i</sub>) 및 체적비 (φ<sub>i</sub>)를 갖는 두 가지 소재로 구성된 복합체에 대해 미세구조의 변화에 따라 이론적으로 가능한 전도도의 최고치와 최저치를 예측하는 공식 (1)을 발표하였는데, 이를 통하여 다양한 복합소재의 물성의 범위를 예측할 수 있게 되었다. 이 결과는 전기전도도뿐만 아니라 유사한 물리 법칙을 따르는 열전

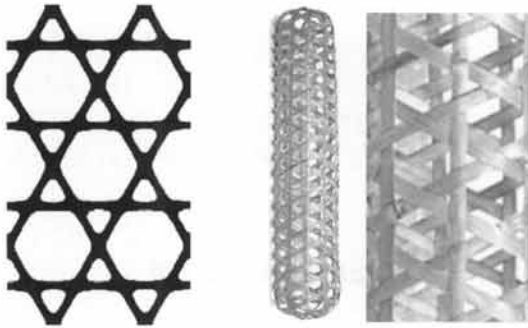


Fig. 7. Two-dimensional kagome structure as a multifunctional material optimal (left). A traditional cooling device made of bamboo shows same patterns with kagome lattice [22].

도도, 탄성강도, 유체 특성 등에도 확장할 수 있다. 각각의 단일 소재 물성은 정해져 있으므로, 실제적인 물성 최적화 변수는 미세구조인데, 이 이론이 제안하는 극대치를 만족하는 다양한 미세구조들이 추후 수행된 연구들을 통해서 알려지게 되었다 [18-22].

$$\langle \sigma \rangle - \frac{\phi_1 \phi_2 (\sigma_1 - \sigma_2)^2}{\langle \tilde{\sigma} \rangle + 2\sigma_{\min}} \leq \sigma_e \leq \langle \sigma \rangle - \frac{\phi_1 \phi_2 (\sigma_1 - \sigma_2)^2}{\langle \tilde{\sigma} \rangle + 2\sigma_{\max}}$$

$$\langle \sigma \rangle = \sigma_1 \phi_1 + \sigma_2 \phi_2 \quad \langle \tilde{\sigma} \rangle = \sigma_1 \phi_2 + \sigma_2 \phi_1 \quad (3)$$

위와 같이 제안된 전기전도도의 최대치를 만족하는 미세구조로는 코팅된 구로 이뤄진 공간 채움 구조 (space-filling coated spheres), 계층적 라미네이트 (hierarchical laminates) 구조, Vigdergauz 구조 등이 있다 [17-21]. 앞의 두 가지 구조들은 무한 반복되는 형태로 이뤄진 가상적인 구조인 반면 Vigdergauz 구조는 단일 스케일에서 정의되는 간단한 구조여서 실제 디바이스에 적용이 가능한 구조이다 [21]. 이와 같이 미세구조를 결정함에 있어서는 실제 디바이스에 적용이 가능하여야 그 효용성이 높다고 하겠다. 그 외에도 기계적인 강도를 최적화 구조로 '자연 모방 (nature-inspired) 구조'들이나 '멀티스케일 구조' 등의 다양한 구조도 함께 밝혀졌는데, 그 중에 흥미로운 예로 인류가 오랫동안 사용해 오고 있는 '대 바구니 구조'를 들 수 있다 [22]. 일본어로는 '카고메 (kagome)' 구조라고 하는데, 우리나라에서도 대 바구니

나 죽부인 등에서 흔히 볼 수 있는 육각형과 삼각형이 혼합된 구조이다 (그림 7).

이 구조는 최고의 탄성강도를 갖는 것으로 알려진 삼각형 및 육각형 격자 구조와 동일한 탄성강도를 갖는 한편, 이들 구조에 비해 기계적인 좌굴 (buckling)에 대해 매우 강한 구조로 알려졌다. 또한 이 구조는 기계 물성 및 전기 전도도 뿐만 아니라, 비교적 큰 육각형 통로를 갖고 있어 유체 특성도 훌륭하여 대표적인 다기능성 최적 구조의 예라 할 수 있다 [23].

### 3.2 상호물성 관계 (cross-property relation) 이론

한편 다 기능성 소재 설계를 위해서는 두 가지 이상의 물성들의 상호 연관성에 대한 연구가 필수적이다. 복합소재의 경우 각 소재의 물성은 정의되어 있으면, 전체 물성은 이들 간에 형성되는 미세구조에 따라 결정된다. 한편 복합소재의 서로 다른 물성들도 이러한 미세구조를 매개체로 연관되게 된다. 예를 들면 특정 미세구조에 대한 전기 전도도를 알면, 동일한 미세구조에 대한 열전도도나 기계적인 탄성률을 특정 범위 안에서 예측할 수 있다는 것이다 [24,25]. 이와 같은 관계를 '상호물성 (cross-property)' 관계라고 하는데, 다 기능성 물질 최적화를 위해서는 필수적인 내용이다 [24]. 두 가지 소재가 갖는 전기 전도도 ( $\sigma_i$ ) 및 열전도도 ( $\lambda_i$ )의 상호 관계는 아래와 같은 식으로 나타낼 수 있다.

$$\frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_e - \phi_1 \lambda_1 - \phi_2 \lambda_2} - \frac{\sigma_2 - \sigma_1}{\sigma_e - \phi_1 \sigma_1 - \phi_2 \sigma_2} = \frac{3(\lambda_2 \sigma_1 - \lambda_1 \sigma_2)}{\phi_1 \phi_2 (\lambda_2 - \lambda_1)(\sigma_2 - \sigma_1)}$$

$$\frac{\sigma_1 + 2\sigma_2}{\sigma_1 - \sigma_2} \left( \frac{\sigma_2 + 2\sigma_1}{\sigma_1 - \sigma_2} - \phi_2 \frac{\sigma_e + 2\sigma_1}{\sigma_1 - \sigma_e} \right) = \frac{\lambda_1 + 2\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \left( \frac{\lambda_2 + 2\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} - \phi_2 \frac{\lambda_e + 2\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_e} \right) \quad (4)$$

아래 식 (5)의 부호에 따라서, 양수일 때는 (4.1)식이 복합소재의 전도도( $\sigma_e$ ,  $\lambda_e$ )의 상한곡선을, (4.2)식은 하한곡선을 나타낸다.

$$\frac{\lambda_2 \sigma_1 - \lambda_1 \sigma_2}{\sigma_1 - \sigma_2} \geq 0 \quad (5)$$

예를 들자면, 두 소재의 전기전도도와 열전도도와 같이 주어졌을 때, 이들로 이뤄진 복합소재의 열전도도와 전기전도도가 가지는 범위는 그림 9에서 나타낸 렌즈모양의 영역 안으로 한정된다 [25].

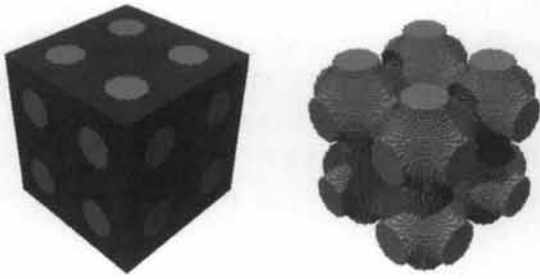


Fig. 8. A bicontinuous structure for optimal electrical and thermal transport determined by computer simulation [25].

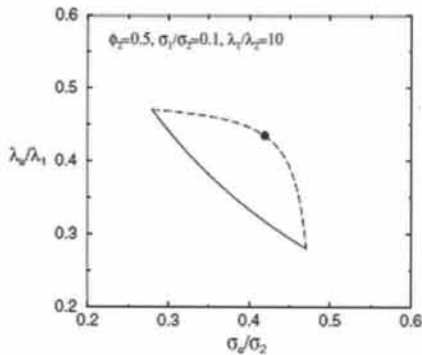


Fig. 9. Bounded regions of thermal and electrical conductivities predicted by the cross-property relation for the bicontinuous structure [25].

실제로 그림 8에 점으로 표시된 전기전도도 및 열전도도 두 가지 물성을 동시에 최대화하는 미세구조는 아래 그림 9에 나타난 '이중 연결 (Bicontinuous)' 구조이다. 그림에서 한 상 (red)은 다른 상 (green)보다 전기전도도가 높고 열전도도는 낮는데, 두 가지 상이 서로 동일한 형태를 갖고 얽혀있어 열전도도 및 전기전도도를 최대화 하는 동시에 두 소재 간의 접촉 면적을 최소화하는 구조이기도 하다. 이 연구는 이론적으로 제시된 두 가지 이상의 물성의 최댓값을 갖는 구조를 컴퓨터 시뮬레이션으로 구현한 다 기능성 소재 개발의 한 예이다. 이 외에도 기계적 물성과 전기적인 물성이 연결된 대표적인 소재로 각종 센서 및 액츄에이터에 적용되고 있는 압전 (piezoelectric) 소재를 들 수 있으며, 이 소재에 대한 연구도 원자스케일에서의 제일원리해석 및 거시적인 스케일에서의 유한요소해석 등에 의해 효과적으로 수행되고 있다.

### 3.3 재료 설계를 위한 컴퓨터 시뮬레이션 기술

컴퓨터 시뮬레이션을 이용한 소재 설계는 앞서 소개한 이론적인 연구 결과를 직접 적용하기 위해 사용할 수 있는 기술이다. 오늘날 컴퓨터의 성능은 다양한 요구에 따라 비약적으로 발전하였으며, 이를 첨단 산업 발전 특히 소재 개발에 적용하기 위한 시도는 활발히 진행되고 있는 실정이다. 앞서 언급한 대로 소재 개발은 조성최적화를 통한 소재 자체 개발과 이들 간에 상호관련성 및 미세구조 최적화로 이뤄지고 있는데, 이를 위해서 사용되고 있는 주요 시뮬레이션 기법 등을 소개하겠다.

소재 자체 개발을 위해서는 원자레벨에서의 물성 해석 기법이 이용되는데, 대표적인 것이 나노스케일에서의 양자물성 해석을 위해서 Schrodinger 방정식을 전자밀도함수 (DFT)에 따라 해를 구하는 제일원리해석이다. 또한 수  $\mu\text{m}$  이상의 거시적인 스케일에서는 소재를 연속체로 가정하여 해석하는 유한요소해석 (finite element method, FEM) 기법이 물성 최적화에 이용된다. 또한 이들 사이에 해당되는  $\text{nm} \sim \mu\text{m}$ 의 메조 스케일에서는 분자동력학 (MD) 등이 이용된다. 유한요소해석 (FEM) 기법에는 기계, 전기, 열 등 거의 모든 물성에 대한 해석이 가능한 반면 각 소재에 대한 물성들이 제공되지 않으면 해석이 불가능하고, 제일원리해석이나 분자동력학에서는 기계적인 물성 및 제한적인 열 물성, 전기물성 등에 대한 해석만이 가능하다. 하지만 전기 전도도나 광학적인 물성 등에 대한 시뮬레이션 기법들은 그 중요성에 따라 꾸준한 연구 개발이 진행되고 있는 실정이다.

이와 같이 현재까지의 시뮬레이션 기법은 해석하는 스케일에 따라 물성이 달라지는 문제점이 있다. 예를 들어 전기 전도도와 같이 실험적으로 쉽게 측정되는 물성이 원자 스케일 시뮬레이션에서는 정확한 값을 얻기가 쉽지 않다. 또한 크리프 (creep)이나 피로 (fatigue) 특성과 같이 오랜 시간이 경과하거나 무한 반복되는 외부 조건에 의해 일어나는 현상들은  $10^{-6}$  sec 정도가 한계인 (분자동력학의 경우  $10^{-15}$  sec를 시간단위로  $10^9$  스텝을 반복하여야 한다) 원자스케일 해석법으로는 불가능하다. 반대로 거시적인 스케일에서는 통계적으로 존재할 수 있는 결함 등에 의한 물성변화나 계면에서의 현상 등은 원자스케일의 시뮬레이션을 이용하지 않으면 얻기가 어렵다. 자연계에서 발생하는 물리현상들은 다양한 효과들의 종합적으로

구현되는 것이므로 원칙적으로 이들을 다 고려하여야 할 것이다. 하지만 이를 동시에 통합할 수 있는 시뮬레이션 기법은 아직까지 존재하지 않는다. 다만, 시간 및 공간의 스케일에 따른 한계점을 극복하기 위하여 시도되고 있는 새로운 시뮬레이션 기법으로 '멀티스케일 시뮬레이션 (multiscale simulation)'이 있다 [26-28]. 위에서 언급한 몇 가지 문제점들을 해결하기 위하여 두 가지 이상의 서로 다른 스케일에서의 해석 기법을 계층적(hierarchical)인 방법 [26]과 동시적(concurrent) 방법 [27]으로 적용하는 방법이다. 이를 적용하여 나노계면 등의 물성을 해석한 예들이 있지만 [28], 여전히 스케일이 다른 해석 기법들 간의 데이터를 주고 받는 과정에서 해결되어야 할 연결 문제들이 존재한다. 이를 해결하기 위해서는 고속 통신용 알고리즘 등의 소프트웨어들과 빠른 계산 속도와 대용량 메모리 등의 하드웨어들이 개발되어야 한다.

소재를 구성하는 원자들을 독립적으로 보고 설계하는 조성 최적화와 함께, 미세구조 최적화도 소재 개발에서는 빼 놓을 수 없는 기술이다. 소재 자체 개발과는 무관한 듯 보이지만, 소재의 물성과 구조가 서로 영향을 받기 때문에 소재 개발에는 필히 포함되어야 한다. 미세구조 최적화는 원자레벨 및 거시레벨에서 모두 가능한데, 양자점 (quantum dots)이나 탄소 나노튜브 (CNT), 그래핀 (graphene)과 같이 수 nm인 나노구조에서부터 IT부품의 패키징 소재에 이르기까지 다양한 스케일에서 적용되는 기술이다. 거시적 스케일에서 적용되는 대표적인 구조 최적화로 '위상최적화 (Topology optimization)'를 들 수 있으며, 이는 각종 디바이스, 부품 등의 물성 최적화에 적용되고 있는 잘 알려진 시뮬레이션 기술이다 [29].

끝으로 소재 개발 시뮬레이션 기법에 필히 포함되어야 할 기술은 '다기능 물성 최적화 (multifunctional optimization)'인데, 이는 앞서 언급한 다기능 소재 개발과 직접 관련이 있다. 단일 물성 최적화를 위한 시뮬레이션 기법은 앞서 소개된 최적화 기법들이 사용되지만, 두 가지 이상의 물성을 동시에 최적화 하는 시뮬레이션 기술은 아직 성숙되어 있지 않다. 이는 다기능성 최적화에 대한 이론적 기반이 아직은 잘 확립되어 있지 못하기 때문이기도 하다. 그럼에도 불구하고, 장기적으로 이 분야에 대한 요구가 증가할 것이 확실하기 때문에 대표적인 상용해석 프로그램 개발 회사들은 다중물리 해석 기법 등을 이미 개발하고 있다. 제일원리해석들을 기반으로 멀티스케일 시뮬레이션 플랫폼을 개발하여 판매하고 있는 Materials

Studio [12]나 연속체 해석을 기반으로 하는 콤솔 (comsol) [30], 앤시스 (ANSYS) [31] 및 다쏘시스템 (Dassault) [32] 등에서 다양한 형태의 '다중물리 (multiphysics) 해석' 프로그램들을 판매하고 있다. 이는 정해진 구조 또는 변형되는 구조에서 다양한 물성을 동시에 해석하거나 구조 최적화를 가능하게 하였다.

#### 4. 결론

지금까지 첨단 산업에서 요구되고 있는 다양한 물성의 극대화 및 생산 비용과 시간을 절약하기 위한 소재 개발의 한 방법으로 도입되고 있는 컴퓨터 시뮬레이션 기술에 대해 논의하였다. 지금까지는 주로 단일 물성 최적화 기술 위주로 적용되어 왔지만, 다기능 특성을 요구하는 융합 산업 분야에 있어서는 기계, 열, 전자기, 광학, 유체 물성 등 다양한 물성을 동시에 최적화하는 다기능 소재 물성 최적화 기법이 더 발전하고 이를 구현하는 실제적인 다기능 소재들이 더 많이 제안되어야 할 것이다. 이와 같은 융합 소재 개발 기술은 실험분야와 이론 분야에서 아직은 시작 단계라고 볼 수 있다. 하지만 실험 연구와의 공조를 필요로 하는 컴퓨터 시뮬레이션 소재설계 기술은 실험실에서 수행되는 직접적인 소재 합성 기술과 함께 매우 효율적인 소재 개발 기술이므로, 다양한 분야의 연구자들의 지속적인 협조와 조화로운 공조가 더욱 필요한 융합 연구 분야라고 하겠다.

#### 감사의 글

본 연구는 산업통상자원부 벤처형전문소재기술개발 사업의 지원을 받아 수행되었음 (과제번호: 10043193).

#### REFERENCES

- [1] S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties* (Springer-Verlag, New York, 2002).
- [2] S. Iijima, *Nature*, 354, 56 (1991).
- [3] Y. S. Min, E. J. Bae, U. J. Kim, E. H. Lee, N. J. Park, C. S. Hwang, and W. J. Park, *Appl. Phys. Lett.*, 93, 043113 (2008)

- [4] A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature*, 6, 183 (2007).
- [5] S. H. Huh and S. I. Hyun, *Carbon*, 48, 3635 (2010).
- [6] M. Allen and D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon, Oxford, 1987).
- [7] S. J. Plimpton, *J. Comput. Phys.*, 117, 1 (1995): LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov/>).
- [8] P. A. Thompson and S. M. Troian, *Nature*, 389, 360 (1997).
- [9] S. I. Hyun and E. H. Koo, *J. Appl. Phys.*, 113, 074301 (2013).
- [10] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, 140, A1133 (1965).
- [11] D. Cohen, *Phys. Rev. B*, 68, 15 (2003).
- [12] Materials Studio, Accelrys Inc.
- [13] H. P. Vowles, *Isis*, 17, 412 (1932).
- [14] N. Bohr, *J. de Physique et le Radium*, 2, 361 (1921).
- [15] L.S.I. Liyanage, S. Kim, Y. K. Hong, J. H. Park, S. C. Erwin, and S. G. Kim, *J. Mag. Mag. Mat.*, 348, 75 (2013).
- [16] VASP (<http://www.vasp.at/>).
- [17] Z. Hashin and Shtrikman, *J. Appl. Phys.*, 33, 3125 (1962).
- [18] G. W. Milton, in *Homogenization and Effective Moduli of Materials and Media*, ed. by J. L. Eriksen, D. Kinderlehrer, R. Kohn, and J. L. Lions (Springer, New York, 1986).
- [19] D. J. Bergman, *Phys. Rep.*, 43, 377 (1978)
- [20] G. W. Milton, *J. Appl. Phys.*, 52, 5294 (1981).
- [21] S. Vigdergauz, *Int. J. Solids Struct.*, 38, 8593 (2001).
- [22] S. Hyun and S. Torquato, *J. Mater. Res.*, 16, 280 (2001).
- [23] A. G. Evans, J. W. Hutchinson, N. A. Fleck, M. F. Ashby, and H.N.G. Wadley, *Prog. Mater. Sci.*, 46, 309 (2001).
- [24] L. V. Gibiansky and S. Torquato, *Phys. Rev. Lett.*, 71, 2927 (1993).
- [25] S. Torquato, S. Hyun, and A. Donev, *Phys. Rev. Lett.*, 89, 266601 (2002).
- [26] E. B. Tadmor, M. Ortiz, and R. Phillips, *Mag. A*, 73, 1529 (1996).
- [27] J. Q. Broughton, F. F. Abraham, N. Bernstein, and E. Kaxiras, *Phys. Rev. B* 60, 2391 (1999).
- [28] B. Q. Luan, S. Hyun, J. F. Molinari, N. Bernstein, and M. Robbins, *Phys. Rev. E*, 74, 046710 (2006).
- [29] M. P. Bendsoe and O. Sigmund, *Topology Optimization: Theory, Methods, and Applications* (Springer, New York, 2003).
- [30] COSMOL Inc. (<http://www.comsol.com>).
- [31] ANSYS Inc. (<http://www.ansys.com>).
- [32] DASSAULT Systems (<http://www.3ds.com>).