



# 분자동역학 시뮬레이션의 응용

글 ■ 박 승 호 / 홍익대학교 기계·시스템디자인공학과, 교수      e-mail ■ spark@hongik.ac.kr

이 글에서는 분자동역학 시뮬레이션에 대한 이론을 간략히 설명하고 엔지니어링 분야에서 연구되고 있는 다양한 주제를 토의함으로써 분자동역학 시뮬레이션의 응용범위를 이해하고자 한다.

분자동역학(MD : Molecular Dynamics) 기법은 분자의 시간 및 공간적 거동과 이를 지배하는 분자 사이의 포텐셜(inter-molecular potential)을 통하여 나노스케일 시스템의 미세특성 또는 nanomachining process 등을 예측 및 시뮬레이션하는 이론적인 수단으로 개발 및 응용되고 있다.

1953년에 미국의 Los Alamos 국립연구소에서 MANIAC으로 불리는 컴퓨터의 성능을 시험하기 위한 도구로 액체에 대한 컴퓨터 시뮬레이션이 처음 수행되었고, 이 시뮬레이션 기법이 현재 Monte Carlo(MC)라 불리는 분자시뮬레이션의 근간이 되었다. MC와는 다른 분자시뮬레이션 기법인 MD는 분자시스템의 동역학적 성질(dynamic property) 등을 이해하고자 1950년대 말에 분자간의 탄성충돌을 모델로 하는 강구(hard-sphere)시스템에 처음 적용되었다. 1960년대에는 연구(soft-sphere)모델의 하나인 Lennard-Jones 분자에 대한 MD 시뮬레이션이 수행되었으나, 1970년대 중반 이후에 이르러서야 비로서 digital 컴퓨터의 발달에 힘입어 물리 및 화학분야에서 광범위하게 응용되기 시작하였다. 그 이후 1980

년대 및 1990년대 초반에는 여러 분자들에 대한 포텐셜모델이 개발되었고, 이를 이용하여 다양한 분자에 대한 시뮬레이션이 가능해져서 재료학 및 생물학 관련 분야에서 신물질 개발 및 각종 프로세스의 모사 등에 이용되고 있었다. 세포 및 복합체의 거동에 대하여도 MD 계산이 가능해졌으나, 분자 개수는 상당히 제한되었었고, Ar과 같은 단원자 분자에 대하여도 계산 가능 분자 개수가 수만 개 이하, 그리고 수 나노초 범위 이내였다.

최근에는 컴퓨터 연산능력의 획기적 신장과 더불어 병렬처리를 통하여 수백만 개 정도의 분자에 대한 시뮬레이션이 가능한 상태이다. 특히, 1990년대 말 이후에 공학분야에서도 마이크로스케일 및 나노스케일 시스템의 해석에 고전적인 연속체이론에 근거한 연구 또는 확률에 근거한 이론의 한계에 부딪혀, 보다 구체적인 연구기법을 요구하게 되었다. 또한, 1980년대에 개발된 STM(Scanning Tunnelling Microscopy), AFM(Atomic Force Microscopy) 및 SPM(Scanning Probe Microscopy) 등의 실험적 나노과학의 발달에 따라 나노 기

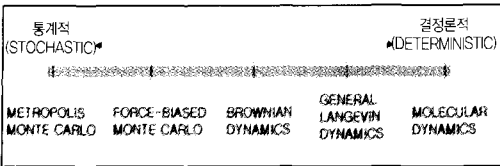


그림 1 여러 분자 모델링에 대한 해석적 특성(통계적-결정론적) [2]

계학(nano-mechanics), 나노전자기학(nano-electronics and magnetism) 및 나노광학(nano-optics) 등에 대한 연구가 활성화되고 있는 상황에서 이에 필적하는 나노이론 개발의 필요성이 제기되고 있었다.

희박기체와 같이 분자간의 상호작용이 비교적 작거나 무작위한 기상(gas-phase)에 대하여는 Monte Carlo법(DSMC)이 용이하게 적용될 수 있고<sup>[1]</sup>, 이와는 극단으로 결정격자로 이루어진 고체에 대한 연구는 고체물리학(solid-state physics)이 잘 설명하고 있다. 그러나 이의 중간상태인 액체, 비정질(amorphous), 다상(multi-phase) 자체 및 다상경계(interface)에 대한 연구는 분자동역학 기법이 가장 적절한 방법의 하나로 인식되고 있다. 그리고 이는 DSMC와 달리 시간에 대하여 결정론적(deterministic)이기에 비평형과정의 이해 및 관찰에도 널리 적용될 수 있다(그림 1). 보다 자세한 사항은 Haile<sup>[2]</sup>, Allen과 Tildesley<sup>[3]</sup>,

Raffi-Tabar<sup>[4]</sup>, Maruyama<sup>[5]</sup>, Chou 등<sup>[6]</sup>을 참고하길 바라고, 이 글에서는 분자동역학 기법 및 이의 응용에 대하여 간략히 소개하고자 한다.

분자크기에 대한 시뮬레이션은 그림 2와 같이 기본적으로 (1) 이론적 해석모델 및 포텐셜모델 정립, (2) 분자의 거동 계산 및 (3) 분자의 거동에 따른 물리적 상태량 분석의 3단계로 구성된다고 할 수 있다. 분자동역학의 이론적 해석모델은 Schrodinger 방정식으로부터 출발하나, Born-Oppenheimer 가정에 의하여 분자의 속박전자에 대한 영향을 간단한 분자 포텐셜에너지로 모델링함으로써 고전적인 Newton 방정식으로 단순화된다. 이 가정은 de Broglie 파장  $\Lambda = h/\sqrt{2mE}$  이 입자간의 거리보다 작은 경우에는 타당하나, 전자 또는 수소와 같이 입자질량이 작아 de Broglie 파장이 큰 경우에는 입자성보다는 파동성이 크므로 Newton 방정식으로는 해석이 불가능하다. 즉, 전자 또는 광자에 의하여 지배되는 현상은 일반적인 MD로는 해석이 어렵기 때문에 양자역학을 응용한 QMD(Quantum Molecular Dynamics)로 해석하여야 한다<sup>[7-9]</sup>. 그러나 이 QMD는 많은 양의 연산을 요하므로 계산이 가능한 분자수는 100개 이내이다. 따라서, 공학적으로 실질적인 자료를 얻기에는

아직 이른 상황이다. 이 같은 점이 레이저 이용 마이크로 및 나노 가공 또는 분광학에서의 MD의 적용을 어렵게 하고 있다.

일반적인 MD 시뮬레이션에서는 아래와 같은 Newton 방정식을 적용한다.

$$F_i = - \sum_{j \neq i}^n \frac{\partial \Phi(r_{ij})}{\partial r_i} = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (1)$$

여기서,  $F_i$ 는 입자  $i$ 가 주변의

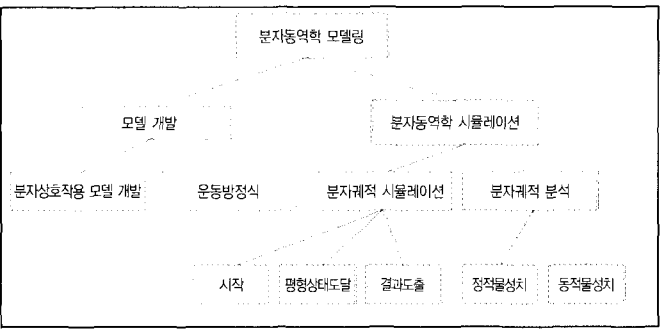


그림 2 분자 모델링을 위한 주요 해석 단계

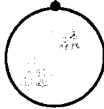


표 1 Lennard-Jones 포텐셜 모델을 따른 분자에 대한 에너지 변수

	$\sigma$ [nm]	$\epsilon$ [J]	$\epsilon/k_B$ [K]
Ne	0.274	$0.50 \times 10^{-21}$	36.2
Ar	0.340	$1.67 \times 10^{-21}$	121
Kr	0.365	$2.25 \times 10^{-21}$	163
Xe	0.396	$3.20 \times 10^{-21}$	232

표 2 Tersoff 포텐셜 모델에 대한 변수

Parameters	Tersoff (Si)
$A_{ij}$ [eV]	1830.8
$B_{ij}$ [eV]	471.18
$\lambda_{ij}$ [ $\text{\AA}^{-1}$ ]	2.4799
$\mu_{ij}$ [ $\text{\AA}^{-1}$ ]	1.7322
$\chi_{ij}$	1.0
$\beta_i$	0.0000010999
$n$	0.78734
$c_i$	100390.
$d_i$	16.218
$h_i$	-0.59826
$R_{ij}$ [ $\text{\AA}$ ]	2.7
$S_{ij}$ [ $\text{\AA}$ ]	3.0

다른 분자로부터 받는 힘의 총합으로 주변 분자와의 포텐셜에너지  $\Phi(r_{ij})$ 로부터 구할 수 있고, 이에 대한 이론적 모델이 MD에 있어서 중요한 부분을 차지하고 있다. 즉, 분자의 실질적인 거동을 해석하기 위하여는 적절한 포텐셜모델의 선택이 매우 중요하다. 분자의 특성에 따라 여러 가지 모델이 경험적 또는 이론적으로 개발되었으나, 이 글에서는 2입자(two-body or pair) 모델의 대

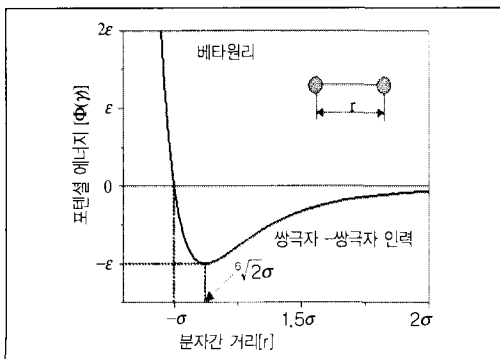


그림 3 Lennard-Jones (12-6) 포텐셜

표로 Ne, Ar, Kr, Xe에 적용이 가능한 6-12 Lennard-Jones 모델과 다입자(many-body)모델의 대표로 다이아몬드 또는 실리콘의 해석에 적용이 되는 Tersoff model을 소개하고자 한다.

분자간의 포텐셜에너지 계산에 널리 적용되는 6-12 Lennard-Jones 모델은 식 (2) 이고, 각 분자에 따라 적용이 될 수 있는 변수들을 표 1에 정리하였고 이를 그림 3에 나타내었다.

$$\Phi(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2)$$

여기서,  $\epsilon$ 과  $\sigma$ 는 각각의 분자에 대한 에너지 및 길이 변수이다. 식 (2)의 우변에서 첫 번째 항은 Pauli의 배타원칙에 따라 분자간의 거리가 가까워질수록 전자의 궤도가 겹치기 때문에 발생하는 척력이고, 두 번째 항은 van der Waals 인력에 따른 dispersion 에너지에 의한 항으로 원자 자체로는 전기적으로 중성이지만 다른 원자와 근접한 거리에 있을 때 자발적으로 생성되는 쌍극자(dipole)에 의한 인력을 모델링하고 있어 비극성(nonpolar)물질의 응집특성을 설명한다.

물에 대한 모델은 ST2, TIP4P, CC, SPC, SPC/E 등의 여러 모델이 있으나, 기본적으로는 아래와 같이 산소원자와 산소원자에 대한 Lennard-Jones 포텐셜과 수소원자와 산소의 가전자 중 결합에 참여하지 않은 전자의 상호작용을 고려한 Coulomb 포텐셜로 구성되어있다.

$$\Phi(R_1, R_2) = 4\epsilon_{\infty} \left[ \left( \frac{\sigma_{\infty}}{R_{12}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{\infty}}{R_{12}} \right)^6 \right] + S(R_{12}) \sum_i \sum_j \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (3)$$

이 모델은 산소원자간의 상호작용과 더불어 수소와 비결합전하 간의 상호작용을 고려하여야 하기에 계산량이 상대적으로 방대



해진다. 또한, 우변 첫 번째 항인 Lennard-Jones 포텐셜은 분자간의 거리가 비교적 작을 때에만 유효하지만, Coulomb 포텐셜은 분자간의 거리가 멀 경우에도 상당한 영향력이 있기 때문에 보다 정확한 계산을 위하여 계산영역이 상대적으로 커야하므로 고려하여야 하는 분자개수가 더욱 늘어, 이에 따른 계산량의 증가 등의 어려운 점이 있다.

다입자간의 상호작용이 중요한 분자로는 실리콘을 들 수 있다. 실리콘과 탄소는 불활성 분자 또는 물과는 달리 공유결합을 하고 있어 2입자 포텐셜로 입자간의 상호작용을 설명할 수 없다. 다이아몬드 구조를 하고 있

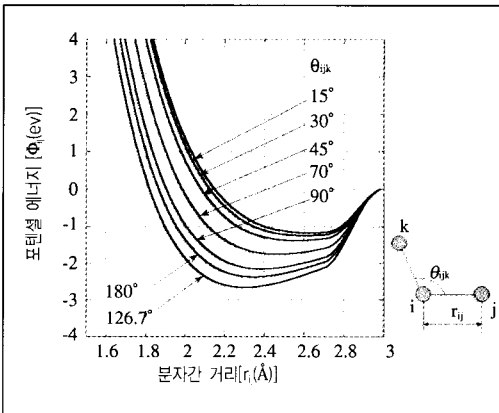


그림 4 실리콘에 대한 Tersoff 포텐셜

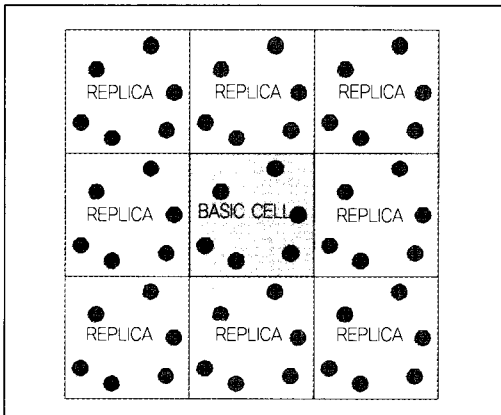


그림 5 주기적 경계조건(Periodic boundary condition)

는 실리콘에 대한 모델로는 SW(Stillinger-Weber) 모델<sup>[10]</sup> 및 Tersoff 모델<sup>[11-12]</sup> 등이 있고, Tersoff 모델을 수정한 Brenner 모델은 탄소(fullerene 및 nanotube 등) 또는 탄화수소(hydrocarbon) 등의 해석에 응용되고 있다<sup>[5]</sup>. Tersoff 모델은 실리콘과 탄소 이외에도 GaAs와 같이 화합물반도체의 해석에도 최근에 적용되고 있다. Tersoff 모델은 2입자 시스템에 대한 Morse potential에 cutoff 함수를 고려하고, 또한 3입자간의 작용을 고려하여 반발력항을 수정한 함수로 식 (4)~(10)과 같이 정리되었다.

$$\Phi_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (4)$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij}r_{ij}), \quad (5)$$

$$f_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-\mu_{ij}r_{ij}) \quad (6)$$

$$1, \quad r_{ij} \leq R_{ij},$$

$$f_c(r_{ij}) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos[\pi(r_{ij} - R_{ij})/(S_{ij} - R_{ij})],$$

$$R_{ij} < r_{ij} < S_{ij}$$

$$0, \quad r_{ij} \geq S_{ij} \quad (7)$$

$$b_{ij} = x_{ij} (1 + \beta^n \zeta_{ij}^{-1/2n}), \quad (8)$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \quad (9)$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c^2}{d_i^2} + \frac{c^2}{d_j^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2} \quad (10)$$

그림 4는 실리콘 원자  $i$ 와 원자  $j$ 에 대한 Tersoff 포텐셜에너지를 원자간의 거리의 함수로 표현하였는데, 이 에너지는 주변원자  $k$ 와 원자  $i$ 와  $j$ 가 이루는 각도 ( $\theta_{ijk}$ )에 따라 상당히 달라짐을 보이고 있다. 이는 3입자의 상호작용을 설명하는 것으로서 식 (8)~(10)으로 모델링된다. 이때 사용되어진 실리콘에 대한 상수들의 값을 표 2에 정리하였다.

식 (2)~(10)의 포텐셜모델을 이용하여 식 (1)을 수치적으로 해결하면 각각의 원자의 속도와 위치를 시간에 따라 구할수 있다. 이때 일반적으로 적용되는 수치해석기법은 상

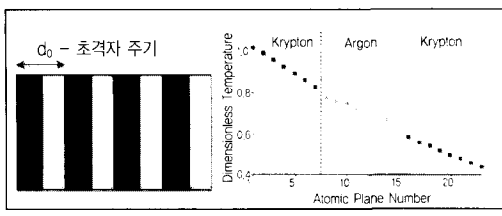


그림 6 초격자에 대한 MD 시뮬레이션<sup>[14]</sup>

미분방정식의 해석에 널리 이용되는 Verlet 방법<sup>[13]</sup>과 Gear 방법<sup>[2, 5]</sup>이 있다. Verlet algorithm은 수정된 leap-frog 방법으로 계산량이 상당히 적어 경제적이고, Gear의 predictor-corrector법은 시간적 정확도를 요하는데 적용된다. 분자동역학 시뮬레이션은 분자의 각각의 거동을 수치적으로 예측하는 정확한 기법이지만 적용분자의 개수는 상당히 한정되어 있으므로 거시적인 시스템에 대한 해석을 하기에는 어려운 점이 많은 실정이다. 이를 효율적으로 극복하기 위하여 주기적 경계조건(periodic boundary condition)을 사용하여 작은 공간에서의 현상을 보다 큰 공간에서 일어나는 현상으로 가정할 수 있다. 이와 같은 경계조건은 연속체이론을 근간으로하는 모델에는 자주 적용되지 않으나, 고체물리학 또는 양자역학 등에는 널리 적용되고 있다. 그림 5는 주기적 경계조건에 대한 개략도를 나타낸다.

지금부터는 분자동역학 자체에 대한 설명보다는 이의 응용분야에 대하여 토의하고자 한다. 그림 2는 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 분자의 거동을 계산한 후, 이를 이용하여 열역학적 또는 물리적 인자를 도출하는 것도 또한 연구의 중요한 다른 방향임을 설명한다. 우선 분자의 위치와 속도에 따라 시스템의 온도, 내부에너지, 또는 압력을 아래의 식으로 각각 구할 수 있고, 또한 이를 이용하여 확산계수, 열전도계수, 그리고 점성계수 등을 예측할 수 있다<sup>[2]</sup>.

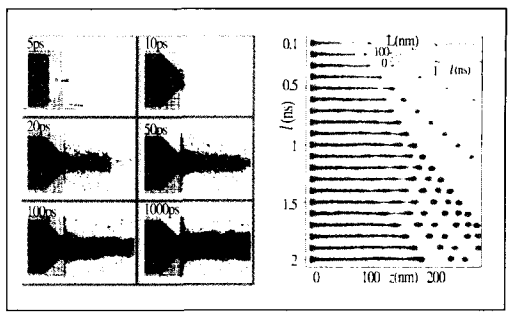


그림 7 나노젯에 대한 MD 시뮬레이션<sup>[15]</sup>

$$T = \frac{1}{3Nk_B} \left\langle \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 \right\rangle \quad (11)$$

$$U = \frac{3}{2} Nk_B T + \left\langle \sum_{i,j>} \phi(r_{ij}) \right\rangle \quad (12)$$

$$P = \frac{N}{V} k_B T - \frac{1}{V} \left\langle \sum_{i,j>} \frac{\partial \phi}{\partial r_{ij}} \cdot r_{ij} \right\rangle \quad (13)$$

위와 같은 물리적 상태량 이외에도 다양한 분야에 분자동역학 시뮬레이션을 적용할 수 있다. 그림 6은 최근에 널리 연구되고 있는 superlattice에서의 열전달 특성을 예측한 것으로서 시뮬레이션 모델은 고체 Kr과 Ar으로 이루어진 superlattice이다. 각각의 물질특성에 다른 열전도율뿐만 아니라, 물질경계에서 접촉저항(interfacial resistance)에 따른 온도 jump가 있음을 확인할 수 있다.

그림 7은 2000년 8월 Science지에 발표된 Moseler와 Landman<sup>[15]</sup>의 나노젯 특성에 대한 MD simulation 결과이다. 노즐과 액체제트(liquid jet)의 분자는 각각 금과 propane으로 설계되었고, 노즐로부터 분사되는 제트의 직경은 약 분자 20개 정도의 크기이다. 이들은 나노스케일의 시뮬레이션을 통하여 연속체 이론에 근거한 제트의 안정성모델을 수정하였다. 기존의 거시적 모델에 열적요동(thermal fluctuation) 특성을 보완하여 MD시뮬레이션 결과와 유사한 결과를 얻을 수 있었다. 즉, 거시적 모델에서 일반적으로 무시되는 무작위성, 열적요동 등

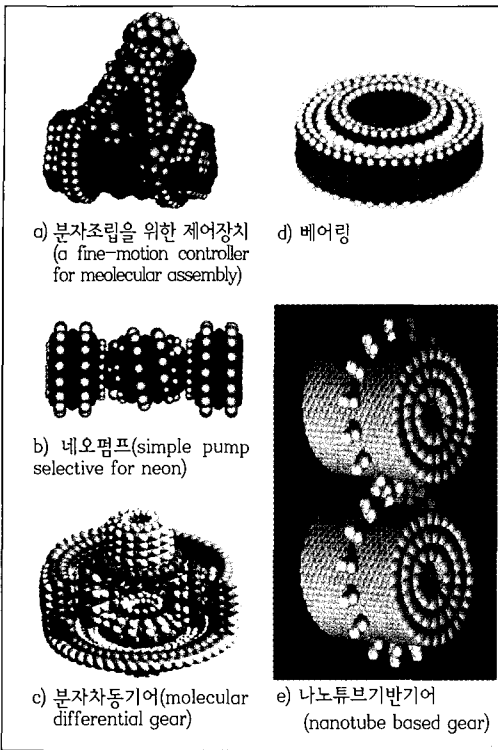


그림 8 MD 시뮬레이션으로 설계된 나노 기계류(nano-machines)<sup>[6]</sup>

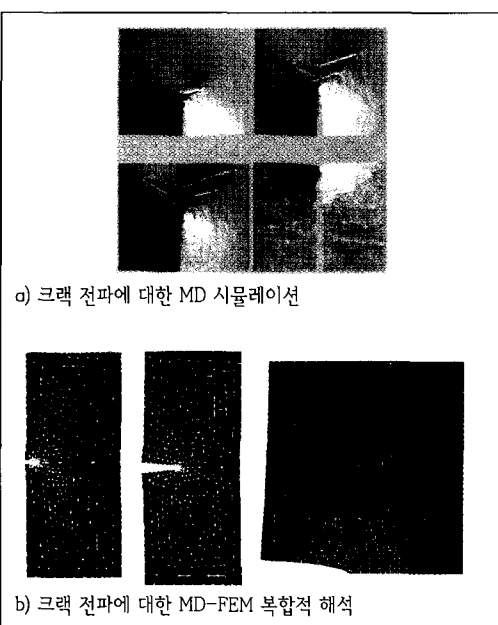


그림 9 크랙 전파에 대한 멀티스케일 해석<sup>[4]</sup>

이 나노제트의 불안정성에 대한 중요한 지배인자임을 확인하였다. 이 연구는 엔진에서의 효율적 연료분사장치의 설계 또는 전자회로의 극소화를 위한 설계에 기초자료를 제공할 뿐만 아니라, 세포에 유전자를 주입하거나, 매우 작은 형상을 식각(etching)하는데 있어 나노제트의 적용 가능성을 보여준다.

그림 8은 Drexler<sup>[6]</sup>가 MD로 디자인한 각종 장치로서, 분자를 이용한 nanoscale급의 기계시스템의 작동 가능한 구조를 소개한다. 이외에도 다양한 시스템에 대하여 nanodesign하여 제시함으로써 앞으로 펼쳐질 nanoengineering에 대한 미래상을 제시한다. 그림 9 (a)는 crack의 전파를 2차원적으로 MD 시뮬레이션한 결과를 보여준다. Crack이 전파되는 과정에서 응력이 집중되는 부분과 소성변형이 일어나는 부분, crack의 전파속도 및 전파기구 등에 대한 자세한 자료를 도출할 수 있다. 그림 9 (b)는 수치적 모델링이 발전하여야 하는 방향을 제시하고 있다. Crack의 전파를 해석하기 위하여 분자의 특성이 중요한 부분은 MD와 같은 분자/원자 모델을 사용하고, 거시적인 특성이 중요한 부분은 FEM 또는 FDM을 사용하는 hybrid 해석기법을 사용하고 있다<sup>[4]</sup>. 이와 같은 MD-continuum coupling기법은 multi-scale 해석기법의 하나로 고체역학분야에서 처음 시도되었으나, 최근에는 유체역학분야에서도 적용되기 시작하였다. 이와 같은 coupling 과정에서 고려하여야 할 중요사항은 MD 영역과 연속체 영역이 중첩하는 경계부분에서의 분자밀도변화의 최소화, 경계부분에서의 적절한 포텐셜 선정/수정, 그리고 수렴속도의 최적화를 위한 이완과정의 선택 등이다.

1990년대 말부터 관심 및 연구가 매우 심도있게 진행되고 있는 nanotechnology 분

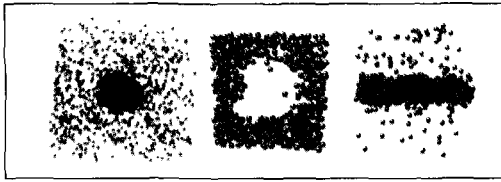


그림 10 액적, 기포, 액막에서의 분자분포

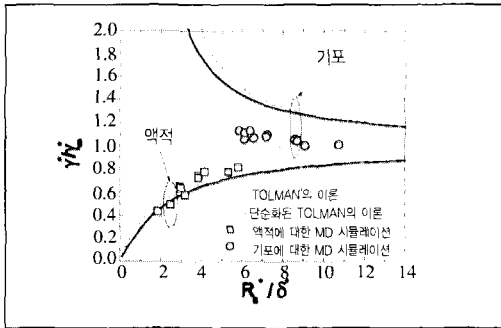


그림 11 액적과 기포에 대한 표면장력(MD 시뮬레이션 결과와 Tolman의 이론과의 비교)<sup>19)</sup>

야에서는 시스템의 크기가 nanoscale로 작아지기에 거시적인 해석에서 널리 적용되고 있는 단순화된 경계특성이 매우 중요한 인자가 될 수 있다<sup>17)</sup>. 따라서, 이와 같은 경계 영역에서의 열역학적 및 물리적 현상을 이해하기 위하여 MD를 적용하기도 한다. 그림 10은 액체와 증기가 공존하고 있는 2상에서의 액적, 기포 및 액막에서의 분자위치를 나타내고, 분자 각각의 분포 및 속도를 통하여 온도, 압력 이외에도 경계특성의 하나인 표면장력/표면에너지 등의 다양한 물리적 상태량을 계산할 수 있다<sup>18-19)</sup>. 액적과 기포에 대한 표면장력은 일반적으로 액막의 표면장력과 동일하다 가정할 수 있으나, 반경이 매우 작아지는 경우에는 액적의 표면장력은 점점 감소하게 되고, 기포의 경우에는 증가하게 됨을 Tolman이 이론적으로 증명하였다. 그러나 이를 실험적으로 확인하기가 용이하지 않았으나 그림 11과 같이 분자동역학 시뮬레이션으로 확인할 수 있다.

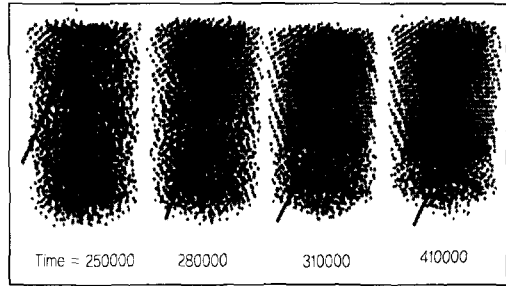


그림 12 Lennard-Jones 고체에서의 재결정 과정<sup>20)</sup>

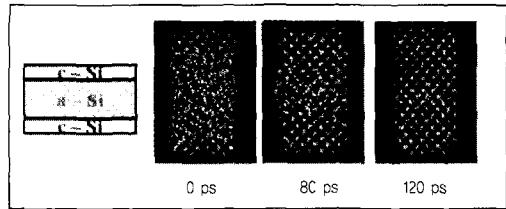


그림 13 비정질 실리콘의 비균질 결정화(Heterogeneous crystallization of amorphous silicon)<sup>21)</sup>

그림 12는 비정질 Lennard-Jones 고체가, 분자 내부의 가진에 의하여 결정화되는 현상을 시뮬레이션 한 것으로 결정화방향 및 속도 등을 예측할 수 있다<sup>20)</sup>. 그림 13은 비정질 실리콘이 결정화되는 과정을 보여준다. 이때 주위의 결정 실리콘(crystalline silicon)에 의하여 내부의 비정질 실리콘(amorphous silicon)이 결정화되는, 즉 heterogeneous 결정화과정을 보여준다<sup>21)</sup>. 이와 같은 실리콘 결정화 과정에 대한 시뮬레이션은 TFT-LCD용 다결정 실리콘(polycrystalline silicon)의 제작과정에서의 중요한 결정화 기구를 설명함으로써 이의 최적설계에 대한 이론적 기반이 될 수 있다.

그림 14 (a)는 점착과정을 시뮬레이션한 결과를 보여준다. 이 과정에서 발생하는 소성변형, necking, 작용력의 이력현상(그림 14 (b)), 또는 분자이동현상 등을 확인할 수 있다<sup>22)</sup>. 이와 같은 시뮬레이션을 통하여, 거시적 시스템에서는 이해하기 어려운

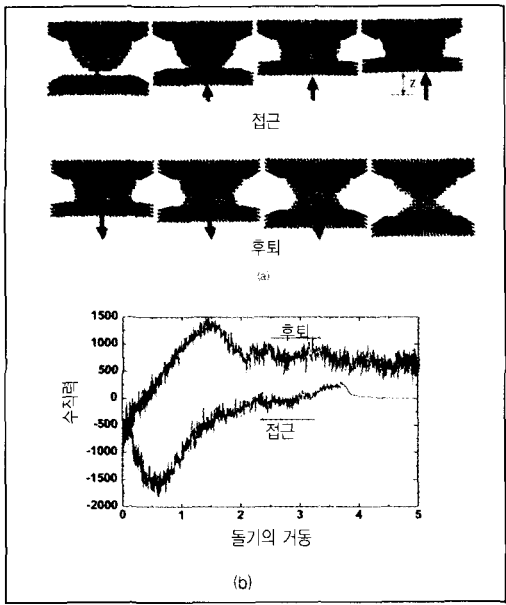


그림 14 점착(adhesion)과정에서의 (a) 분자분포와 (b) 히스테리시스(hysteresis)

nanotribology 현상의 중요성을 확인하고, MEMS 및 NEMS의 구동기구에서 발생할 수 있는 구조체와 구조체와의 상호작용을 분석할 수 있다.

그림 15는 연속체이론, MD 및 QMD가 적용될 수 있는 시간적 공간적 영역을 보여준다. 공간적으로나 시간적으로나 매우 작은 1nm 이하 femto초급에서는 QMD의 적용이 불가피하고, 다른 극단인  $\mu\text{m}$  및  $\mu\text{s}$  급 이상에서는 연속체 이론이 효율적임을 보인다. 따라서, 당분간 컴퓨터의 성능이 현재보다 획

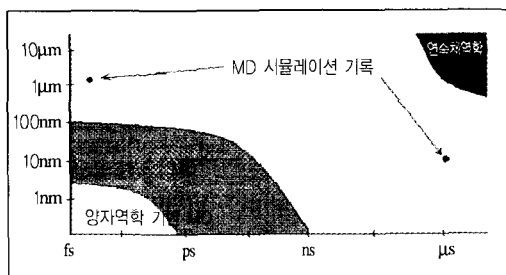


그림 15 이론적 해석 모델에 대한 시간적-공간적 적용영역

기적으로 개선되지 않는 한 MD의 적용한계는 nanoscale임을 확인할 수 있다. 이와 같은 한계에도 불구하고, laser machining, 난류, nanofluidics 등 기존의 연속체 이론이 접하기 어려운 분야에 MD가 응용되고 있고, 앞서 언급한 multi-scale 해석방법의 개발 및 nanotechnology의 발전에 따라 이의 적용영역이 급속히 넓어질 것으로 예상된다.

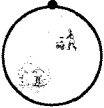
<후기>

본 글에서 연구 중의 일부는 한국과학재단이 지원하는 마이크로 열시스템연구센터 연구사업에 의해 수행되었습니다.

[참고문헌]

- [1] Bird, G. A., 1994, Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flow, Oxford University Press, New York.
- [2] Haile, J. M., 1997, Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, Wiley, New York.
- [3] Allen, M. P., and Tildesley, D. J., 1987, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford.
- [4] Rafii-Tabar, H., 2000, Modelling the Nano-scale Phenomena in Condensed Matter Physics via Computer-Based Numerical Simulations, Physics Reports, Vol. 325, pp. 239~310.
- [5] Maruyama, S., 2000, Molecular Dynamics Method for Microscale Heat Transfer. In Advances in Numerical Heat Transfer (W. J. Minkowycz and E. M. Sparrow, Eds.), Vol. 2, pp. 189~226. Taylor & Francis, Washington, D. C.
- [6] Chou, F. C., Lukes, J. R., Liang, X. G., Takahashi, K., and Tien, C. L., 1999, Molecular Dynamics in Microscale Thermophysical Engineering. Ann. Rev. Heat Transfer, Vol. 10, pp. 141-176.
- [7] Kotake, S., and Kuroki, M., 1993, Molecular Dynamics Study of Solid Melting and Vaporization by Laser





Irradiation, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 36, pp. 2061~2067.

[8] Shibahara, M. and Kotake, S., 1997, Quantum Molecular Dynamics Study on Light-to-Heat Absorption Mechanism: Two Metallic Atom System, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 40, pp. 3209~3222.

[9] Shibahara, M. and Kotake, S. (1998) Quantum Molecular Dynamics Study of Light-to-Heat Absorption Mechanism in Atomic Systems. Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 41, pp. 839~849.

[10] Stillinger, F. H. and Weber, T. A., 1985, Computer Simulation of Local Order in Condensed Phase of Silicon, Phys. Rev. B, Vol. 31, pp. 5262~5271.

[11] Tersoff, J., 1988, New Empirical Approach for the Structure and Energy of Covalent System, Phys. Rev. B, Vol. 37, pp. 6991~7000.

[12] Tersoff, J., 1988 Empirical Interatomic Potential for Silicon with Improved Elastic Properties, Phys. Rev. B, Vol. 38, pp. 9902~9905.

[13] Swope, W. C., Anderson, H. C., Berens, P. H., and Wilson, K.R., 1982, A Computer Simulation Method for the Calculation of Equilibrium Constants for the Formation of Physical Clusters of Molecules: Application to Small Water Clusters, J. Chem. Phys., Vol. 76, pp. 637~649.

[14] Abramson, A. R. and Tien, C.L., 2000, Interfacial Thermal Resistance in Superlattice Structures, presented at Heat Transfer and Transport Phenomena in Microsystems, Banff, Canada.

[15] Moseler, M., and Landman, U., 2000, Formation, Stability, and Breakup of Nanojets, Science, Vol. 289, p. 1165.

[16] IMM, www.imm.org.

[17] Weng, J. G., Park, S. H. and Tien, C. L., 2000, Interfacial Ambiguities in Microdroplets and Microbubbles, Microscale Thermo-physical Engineering, Vol. 4, pp. 83~88.

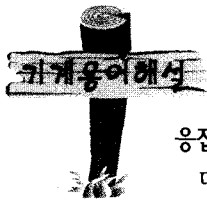
[18] Weng, J. G., Park, S. H., Lukes, J. R., and Tien, C. L., 2000, Molecular Dynamics Investigation of Thickness Effects on Liquid Films, Journal of Chemical Physics, Vol. 113, pp. 5917~5923.

[19] Park, S. H., Weng, J. G., and Tien, C. L., 2001, A Molecular Dynamics Study on Surface Tension of Microbubbles, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 44, pp. 1849~1856.

[20] Park, S. H., Lee, J. S., Choi, Y. K., and Kim, H. J., 2002, Vibration Induced Crystallization of Amorphous Materials: Molecular Dynamics Study, Proceedings of Int. Symp. on Micro/ Nanoscale Energy Conversion and Transport, ICHMT, Antalya, Turkey, pp. 75~77, 2002.

[21] Park, S. H., Lee, J. S., Choi, Y. K., Kim, H. J., and Kwon, O. M., 2002, External Force-Field Induced Crystallization of Amorphous Silicon, SNU-U.C. Berkeley Joint Workshop, Berkeley.

[22] Cho, S. S. and Park, S. H., Molecular Dynamics Simulation of Adhesion Processes, KSME Int. J. (to appear).



### 응집구조(Coherent Structure)

대부분의 난류운동은 통계학적으로 완전히 무작위적(random)인 소규모와동 (small-scale eddy) 성분과 유동의 기하학적인 특성에 의하여 좌우되는 거대 규모 성분으로 구분될 수 있다. 이중 거대규모 성분을 응집구조라 칭하며 난류 생성에 있어서 주된 역할을 수행하며 난류유동에너지의 대부분을 차지한다.