

나노-연속체 멀티스케일 해석과 통계적 접근법

조 맹 효 서울대학교 기계항공공학부 교수

| e-mail : mhcho@snu.ac.kr

신 현 성 서울대학교 기계항공공학부 석박사통합과정(박사과정)

| e-mail : p2530@snu.ac.kr

이 글에서는 나노재료의 멀티스케일 해석에 있어서 재료 구성/조성의 불확실성과 해석 모델의 불확실성을 고려하는 통계적 접근의 중요성과 그 방법에 대해 소개하고자 한다.

나노역학이란 나노 체계에서의 역학적 거동을 해석하기 위한 학문이다. 미시적으로 원자들의 움직임을 계산하여 거시적인 물성 특성을 예측하는 분자동역학 전산모사의 경우 컴퓨터의 발전과 함께 그 활용이 가속화되고 있다. 분자동역학 전산모사를 통하여 물리적, 화학적 현상을 해석적으로 규명할 수 있다는 장점이 있지만, 전산적인 비효율성 때문에 분자동역학 전산모사는 나노재료의 최적설계나 신뢰성 해석 등에는 적합하지 않다. 따라서 본 연구단에서는 분자동역학 전산모사와 미시역학, 멀티스케일 균질화 모델을 조합하여 멀티스케일 해석을 수행한 바 있다. 미시역학이나 멀티스케일 균질화모델은 연속체 역학 이론을 기반으로 분자동역학의 해석결과를 파라미터로 반영하는 해석 기법으로 분자동역학, 양자역학 전산모사에 비해 현재의 전산자원 한계 내에서 문제를 해결하기 위한 효율적인 방법론이다.

나노재료의 멀티스케일 해석 기법을 산업체 등에서 보다 실용적으로 활용하기 위해서는 통계적인 접근이 필요하다. 나노재료 제조 공정 과정의 지속적인 발전에도 불구하고 여전히 입자간 응집현상(Agglomeration)이나 입자의 크기 성장 문제 등 불확실성은 아직 해결되지 않은 문제이다. 따라서 입자간 응집현상 등을 반영한 통계 기반의 멀티스케일 해석 모델의 개발이 필요

하다. 또한 분자동역학 전산모사의 경우 해석 모델 자체가 내재하는 모델 불확실성(Model uncertainty) 때문에 예측된 물성의 분산이 존재한다. 본 연구단에서는 분자동역학 전산모사가 내재하는 모델 불확실성이나 나노 입자의 크기 및 위치의 분포를 고려한 통계 기반의 멀티스케일 해석 모델에 대한 연구를 수행하고 있다. 이번 테마 기획에서는 나노역학과 멀티스케일 해석 문제에 대한 통계적 접근을 고찰하고자 한다.

분자동역학 전산모사와 통계적 접근

분자동역학 전산모사 기법은 뉴턴의 법칙에 의거하여 원자, 분자의 움직임을 시간에 따라 컴퓨터를 통해 모사하는 기법이다. 이 때 원자간 힘은 양자역학 계산 및 실험적 평가에 의해 정의되며, 1ps(=10⁻¹²초) 정도의 짧은 시간 간격에 대해 동역학적 계산을 수행하여 원자, 분자들의 위치와 속도 정보를 갱신한다. 이 때, 단위 셀에 외부 온도, 압력 조건과 같이 거시적 열역학적 조건의 부여가 가능하며 정온, 정압, 정적, 정 에너지 등 여러 종류의 거시적 조건에 의한 앙상블 계산이 가능하다. 분자동역학 전산모사는 체내 약물 전달 체계 문제나 구리 입자의 소결 과정 등 다양한 대상에 적용이 가능하며, 다양한 분야에서 활용되고 있다. 특히, 분자동

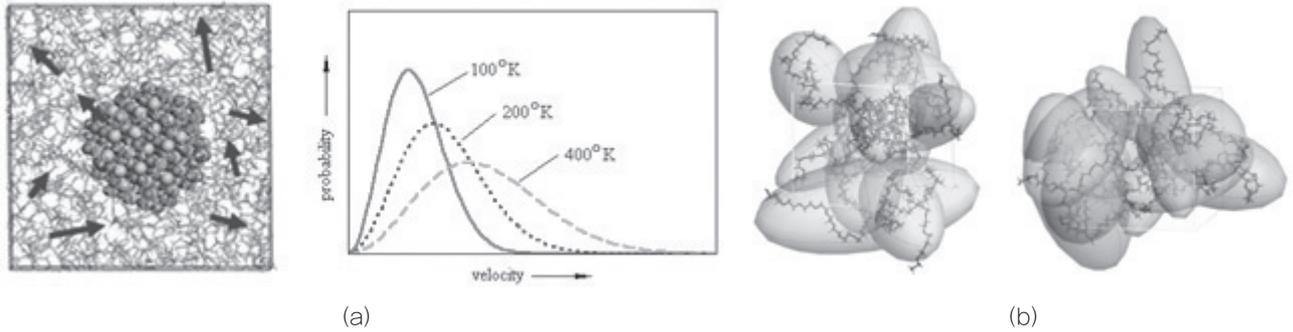


그림 1 모델 불확실성의 주요 원인: (a) 초기 속도 분포의 임의성; (b) 형태학적 불확실성

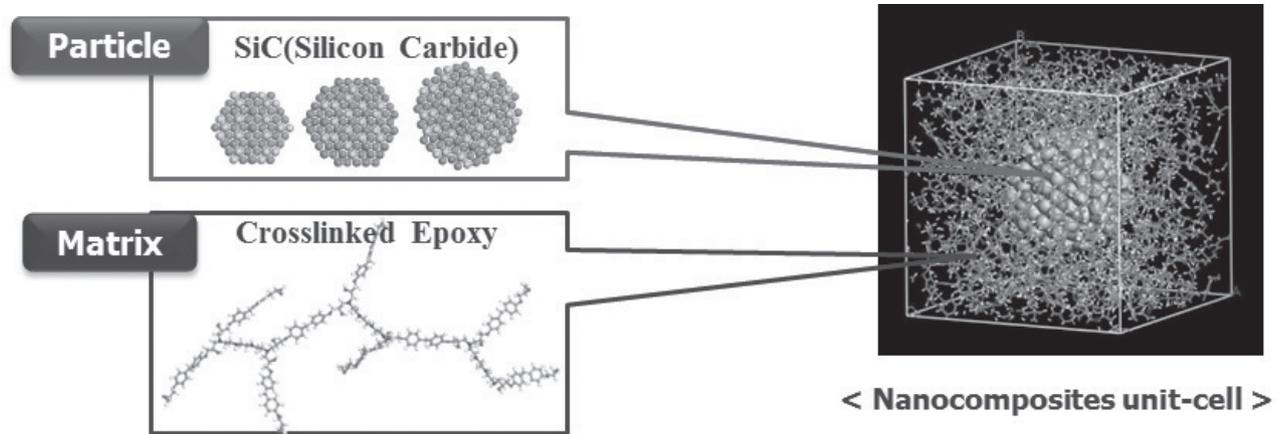


그림 2 탄화규소와 61%로 가교결합된 에폭시 고분자 나노복합재료 단위 셀

역학 전산모사는 고분자 재료의 가교율(Cross-linking Ratio) 정도에 따른 물리적, 화학적 특성 변화와 같이 실험적으로 제어하기 힘든 대상에 대해 비교적 쉽게 구현하고 모사할 수 있다는 장점이 있다.

본 연구단에서는 분자동역학 전산모사를 나노재료의 표면 효과, 나노복합재료의 계면 효과, 광반응 변형 구조체의 상변이 특성 등에 활용하고 있다. 해석하고자 하는 특성으로는 탄소성 해석, 균열 해석, 열탄성 거동 해석, 상전이 해석 등 다양한 물리적 특성에 초점을 맞춰서 연구를 수행하고 있다. 그러나 분자동역학 전산모사의 경우 분자동역학 전산모사 해석 기법 자체가 내재하고 있는 모델 불확실성이 존재한다. 분자동역학 전산모사가 모델 불확실성을 내재하는 이유는 크게 두 가지

이다. 하나는 원자들의 초기 속도 분포가 볼츠만 확률 분포에 의해 주어진다는 점이고, 다른 하나는 분자들의 배열 상태에 따른 형태학(Morphology)적 불확실성이 존재하기 때문이다(그림 1). 모델 불확실성을 내재하는 두 가지 이유 가운데 본 연구단에서는 첫 번째 원인인 초기 속도 분포의 임의성 문제에 대해 초점을 맞춰 연구를 수행하였다.

분자동역학 자체가 내재하는 불확실성을 고려하기 위해 본 연구단에서는 에폭시와 탄화규소(SiC)로 이루어진 고분자 나노복합재료 단위 셀을 구성하였다. 이를, 전단계수의 입자 반경에 따른 분포를 예측하기 위해 5.18 Å, 7.54 Å, 9.00 Å, 10.00 Å의 반경을 갖는 구형 나노 입자를 포함하였으며, 각 단위 셀의 체적분율

은 5.8 %로 고정하여 사용하였다(그림 2). 에폭시의 가교율은 61%로 고정하였다. 분포를 예측하기 위해 약 30 번 정도 계산을 반복적으로 수행하여 그 분포를 예측하였다. 30번 정도 반복적으로 계산을 수행하여 얻은 결과를 토대로 확률 밀도 함수를 예상하였으며 그 결과가 거의 정규 분포에 가깝게 나왔다는 것을 확인할 수 있었다(그림 3). 정규 분포는 평균, 표준편차 두 종류로 구성되기 때문에, 평균, 표준편차만 제대로 예측하면 그 분포를 어느 정도 예상할 수 있음을 알 수 있다. 그림 3에서 예상된 영률의 평균의 경우 약 5.4GPa에 해당하는

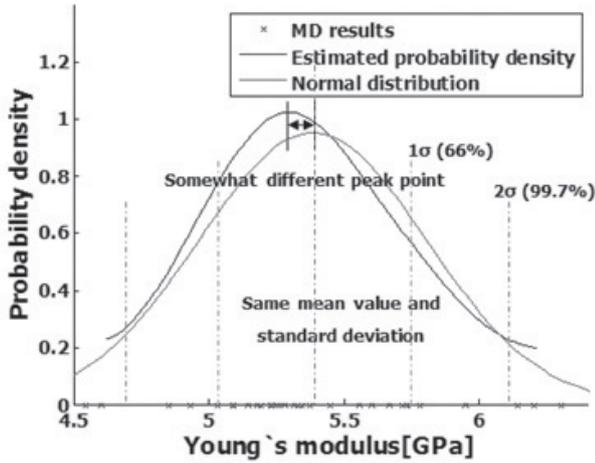


그림 3 모델 불확실성의 정규 분포에 가까운 경향

다. 그리고 임의로 물성 예측을 시행했을 때 약 66% 확률로 예측될 수 있는 범위인 1σ 구간은 (5.05, 5.75) GPa 정도로 평균을 기준으로 평균의 6.5% 정도 표준편차가 발생함을 알 수 있다.

입자의 반경에 따라 예측한 평균과 표준편차의 경향은 그림 4와 같다. 평균과 표준편차 모두 입자의 반경이 증가함에 따라 감소한다는 것을 확인할 수 있다. 영률의 평균이 입자의 반경에 따라 감소하는 이유는 계면효과 때문이다. 나노 입자와 고분자 기지 사이에 발생하는 계면효과는 표면적에 지배적인 영향을 받는다. 입자의 반경이 작아지면 작아질수록 부피 대비 표면적이 입자의 반경에 반비례하여 급격히 증가하기 때문에 계면효과가 두드러진다. 계면효과는 주로 물성 상승효과를 유발하는데, 따라서 영률의 평균의 경우 입자의 반경이 작아짐에 따라 증가하는 경향성을 보인다. 영률의 표준편차가 감소하는 이유는 원자의 수가 증가할수록 원자에 부여된 속도 분포의 임의성이 줄어들게 되기 때문이다. 체적분율이 고정되어 있기 때문에 입자의 반경이 작아질수록 단위 셀 내부에 포함되어 있는 원자들의 수가 감소한다. 따라서 원자에 부여된 속도분포의 임의성이 보다 지배적인 영향을 미치고 영률의 표준편차가 증가한다.

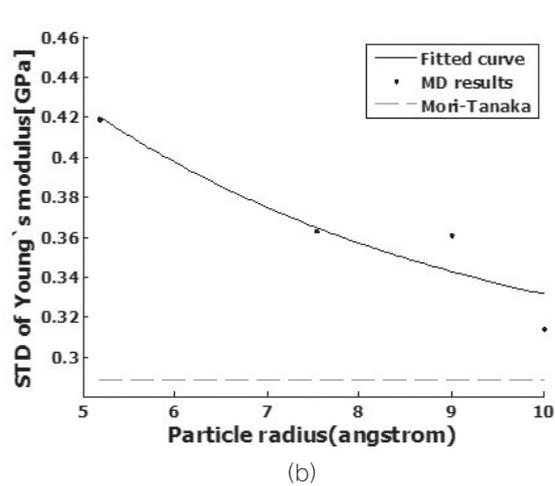
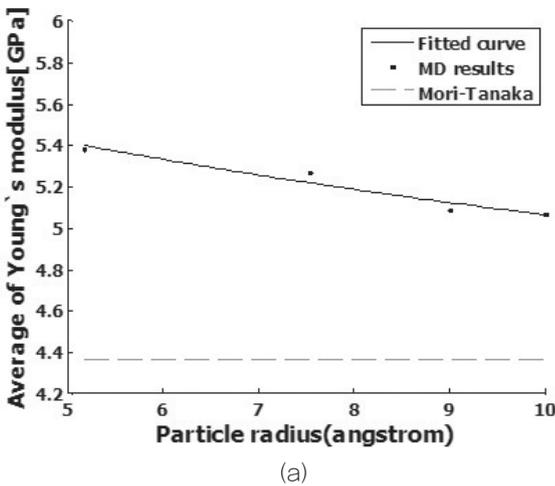


그림 4 영률의 평균과 표준편차: (a) 평균; (b) 표준편차

제조 공정 상 불확실성을 반영한 멀티스케일 모델

분자동역학 전산모사로부터 예측한 입자의 반경에 따른 물성을 예측하여 미시역학, 멀티스케일 균질화 모

델을 통해 연속체 단위로 전달하는 멀티스케일 브리징 (Multiscale bridging) 방법론에 대한 연구가 국제적으로 증가 추세에 있다(그림 5 (a)). 나노복합재료에서 발생하는 계면효과를 반영한 연속체 모델을 구성하는 것이

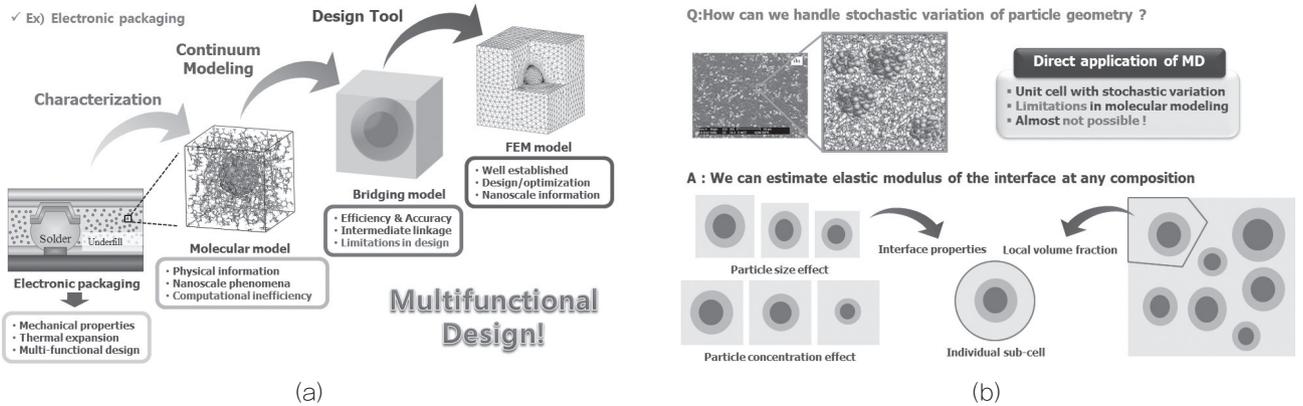


그림 5 (a) 나노복합재료의 멀티스케일 브리징 방법론 개요; (b) 입자의 반경과 위치의 불확실성을 반영한 멀티스케일 모델링 과정 개요

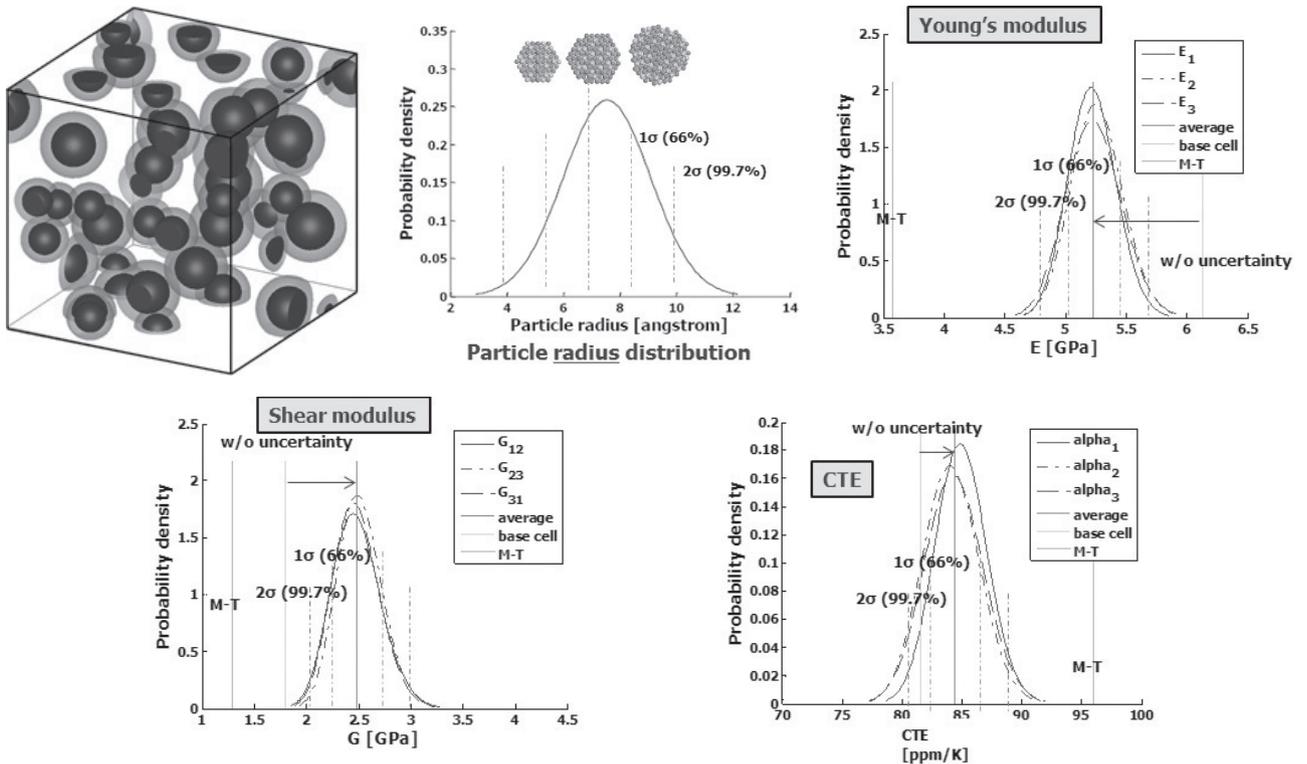


그림 6 입자 반경의 분포와 그에 따른 영률, 전단계수, 열팽창 계수의 분포

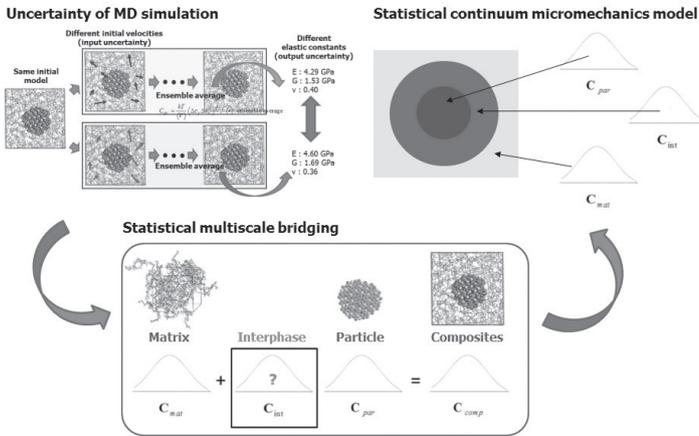


그림 7 유효 계면의 분포 예측을 위한 통계적 멀티스케일 모델

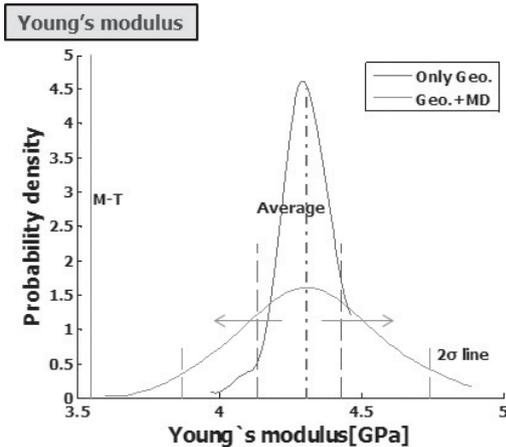


그림 8 영률의 분포에 있어서 모델 불확실성이 미치는 영향 핵심이다.

본 연구단에서는 기존의 멀티스케일 브리징 방법론을 활용하여 나노복합재료의 제조 공정상 발생하는 입자 반경과 위치의 분산을 고려하기 위해 통계 기반 멀티스케일 해석 기법에 대한 연구를 수행하고 있다(그림 5 (b)). 입자 반경의 분포를 정규분포로 가정하여, 영률, 전단계수, 열팽창 계수의 분포를 도출하였다(그림 6). 이 때, 영률, 전단계수, 열팽창 계수는 유한요소 기반 멀티스케일 균질화 모델을 통해 수행하였으며, 분포 도출을 위해 약 100회 정도의 반복 계산을 수행하였다. 단위 셀 내에 입자는 약 30개 포함되어 있다.

모델 불확실성과 제조 공정 상 불확실성을 병합한 통계적 멀티스케일 모델

앞의 두 부분에서 각각 언급한 모델 불확실성과 제조 공정상 발생하는 불확실성을 병합한 통계적 멀티스케일 모델에 대하여 고찰하는 것은 흥미로운 일이다. 그림 7은 모델 불확실성을 반영한 계면 모델을 구성하기 위한 모식도이다. 분자동역학 전산모사에 의하면, 기지(Matrix), 입자(Particle), 복합재(Composites)의 물성이 분포로 나타난다. 따라서 통계적 멀티스케일 모델을 구성할 때 계면의 분포를 예측하기 위한 역연산 알고리즘이 구성되어야 한다. 본 연구단에서는 미시역학 기반으로 역연산 알고리즘을 구성하여 이를 수행하였다. 미시역학 모델의 경우 유한요소 기반의 멀티스케일 균질화 모델과 달리 해석적인 모델이기 때문에 계산소요 시간이 굉장히 짧다. 역연산을 수행하기 위해서 몬테카를로 전산모사(Monte-Carlo simulation)를 수행하였는데, 시행 횟수가 많음에도 불구하고 역연산 알고리즘에 소요되는 시간이 짧다. Intel i7 cpu 기준으로 미시역학 계산 100,000번에 약 3초 정도의 시간이 소요된다.

그림 8은 모델 불확실성과 제조 공정상 불확실성을 반영하여 도출한 분포와 제조 공정상 불확실성만을 반영하여 도출한 분포를 비교한 그래프이다. 모델 불확실성이 포함되면서 영률의 분포가 두 배 이상 퍼져나가는 것을 확인할 수 있는데, 이는 모델 불확실성이 전체 물성의 분산에 지배적인 영향을 미친다는 것을 보여준다.

통계적 멀티스케일 브리징 방법론이 나아가야 할 방향

이번 테마기획을 통해 폴리머 나노복합재료의 멀티스케일 해석에 있어서 통계적 접근의 중요성과 그 방법

에 대해 소개하였다. 다기능성의 특징을 가지는 나노복합재료의 특성과약을 위하여 통계적 접근이 중요하며 이는 강성, 강도뿐만 아니라 제반 역학적 성질, 전기, 열, 광학적 특성까지 포함하게 된다. 이런 특성의 예측은 그 재료 특성의 산포를 고려하여 신뢰성을 확보하는 것이 미시의 재료설계부터 거시 구조설계까지 각 설계 단계에서 매우 중요하다. 특히 나노스케일의 특징을 포함하고 있는 나노 구조물, 나노 복합재료 등은 그 해석이 양자역학, 분자동역학, 미시역학, 연속체역학까지 연결되어 있어 매우 복잡하며 설계에 활용하기 위해서는 멀티스케일 해석법이 필요하다. 그러나 설계의 신뢰성을 확보하기 위해서는 통계적인 접근을 피할 수 없으며 이는 ‘확률기반의 나노-연속체 멀티스케일 브릿징 기법’이라는 새로운 해석, 설계분야를 만들어내고 있다고 하겠다.

이 글에서 소개했던 나노복합재료의 경우 아직 응집현상 등 제조 공정 측면에서 더 고려해야 할 중요한 인자들에 대한 폭넓은 연구가 필요하다. 따라서 해석적 단계에서도 응집현상 등 다양한 측면을 반영하기 위한 시도가 필요하고 공정상 불확실성, 해석 모델 불확실성

을 반영하기 위한 연구도 지속적으로 이루어져야 한다. 나노역학 전산모사의 목적은 나노재료의 물리, 화학적 특성을 보다 정확하고 효율적으로 모사하는 것에 있다. 실제로 나노 입자들이 응집현상을 보일 경우, 입자간 거리가 1nm 이하로 줄어들게 되어서 유효 계면간 겹쳐지는 현상이 일어난다. 계면이 겹쳐질 경우, 계면 특성이 약화되는데 이를 반영한 멀티스케일 모델의 구성을 위한 연구도 지속적으로 이루어지고 있다. 기하학적 불확실성 문제에 대해서 현재 단계에서는 입자의 반경 및 위치의 분포를 임의로 가정한 경우의 모델링을 소개하였다. 추후 실제로 제작된 나노복합재료의 입자 배열 상태를 토대로 해석을 수행하는 연구가 필요하다. 이를 위해서는 광학 현미경 등으로부터 촬영된 나노복합재료의 이미지를 바탕으로 분자 모델 및 캐드(CAD) 모델을 구성하는 영상(image) 처리 기법 또한 통계적 기법과 더불어 접목되어야 할 것이다.

후기

본 내용은 서울대학교 윤병동 교수와의 토의와 공동 연구가 포함되어 있으며, 이에 대해 감사드립니다.



기계용어해설

규칙적 다공질금속(PCM: Periodic Cellular Metal)
규칙적인 구조로 형성된 다공질금속

근-골격 모델(Muscle-Skeleton Model)
골격과 근육으로 이루어진 인체 모델

나노인덴테이션(Nanoindentation)
재료의 표면 압입시험 중 하나로 나노단위로 미세 압입이 가능하며 로딩과 로딩시 연속적인 하중-변위 그래프를 얻을 수 있는 시험.

내후성 강재(Weathering Steel)
강에 내식성 원소를 적정량 첨가하여 안정녹의 피막이 형성될 수 있도록 제조한 강재

다단계 등통로각압축 공정(Multi-pass ECAP)
입구통로와 출구통로의 단면적이 동일한 금형에 소재를 통과시켜 전단소성변형을 가함으로써 소재의 결정립을 미세화시키는 방법. 이때, 등통로각압축 공정을 거친 소재는 단면적이 변하지 않으므로 반복공정, 즉 다단계 공정이 가능함.