산업체에서의 분자동역학 응용

DOI: 10.3938/PhiT.21.040

문원하·배 석

Applications of Molecular Dynamics in Industry

Won Ha MOON and Seok BAE

This article aims to introduce molecular dynamics (MD) techniques and their applications in industry for molecular modeling. MD methods are numerical techniques to compute the equilibrium and the transport properties of classical many-particle systems by solving Newton's equation of motion. MD methods in industry have been used to predict the properties of new materials, *e.g.*, in nanotechnology, and to study systems under extreme conditions, which may be inaccessible or very expensive to study experimentally. In the main, MD techniques have been variously applied to the understanding of materials, processes, and devices.

서 론

최근 나노 소재, 소자 및 공정기술의 발달로 인해 나노 시스템 해석 및 설계에 대한 연구가 증가하면서 분자모델링에 대한 관심이 늘고 있다. 하지만 기존에 주로 사용되었던 연속체 모델과 양자역학 해석은 각각의 제한된 한계 때문에 나노 시스템에 직접적으로 적용되기 어렵다. 결과의 정확도를 위해서는 양자역학적 접근이 타당하지만 많은 계산시간을 필요로 하며, 연속체 모델은 계산의 비용과 속도 면에서는 뛰어나지

저자약력

문원하 박사는 중앙대 전자전기공학부 박사(2004)로서 삼성전기(2004-2011)를 거쳐 현재 LG이노텍 책임연구원으로 재직 중이다. (wonha.moon@lginnotek.com)

배석 박사는 홍익대 금속공학 박사(2002)로서 일본 동북대 Post-doc., 삼성전기, Univ. of Alabama에서 Research Scientist를 거쳐 2010년부터 LG이노텍 수석연구원으로 재직 중이다. (sbae@lginnotek.com)

Fig. 1. Scale of molecular modeling.

만 나노 영역의 해석은 부족한 면이 많다. 당분간은 시스템 해석의 정확도와 계산비용과 속도는 trade-off 관계가 있어서 계산을 위한 타당한 모델을 선정하는 것이 중요하다고 본다.

산업체에서도 기존의 거시적 해석 기술로는 한계가 있어 이미 새로운 방법을 모색하고 있고, 세계적으로도 나노 해석 기술의 필요성을 인식하고 이에 대한 기초 연구 및 인프라를 확충하고 있는 중이다. 이를 위하여 다양한 해석 방법들이 연구되고 있지만, 나노 시스템을 예측할 수 있는 기술이 확보되지 않으면 향후 산업분야의 제품을 설계하거나 적용하기 어려울 것으로 보인다.

소재의 거동을 기술하는 많은 방법들 중에서 실험에 의한 전위 방정식(empirical potential energy function)을 기반으로 한 분자동역학(molecular dynamics)에 관해 여러 분야에서 활발한 연구가 진행되고 있다. 현재의 계산환경에서도 실험적 전위 방정식을 사용한 분자동역학은 수십만 개 이상의 원자의 거동을 다룰 수 있어 복잡하고 큰 영역(large scale)의 접근이 가능하다. 그림 1은 분자모델링 해석을 위한 여러 가지 모델들이 계산할 수 있는 영역을 나타낸다. 아직까지는 분자동역학 해석이 산업체에서 광범위하게 진행되지는 못하나, 나노 영역의 특성을 규명/예측하기 위해 이를 위한 기반 구축이 꾸준히 진행되고 있다.

Fig. 2. Empirical interaction model for molecular modeling.

앞으로는 나노해석 기술을 바탕으로 나노 시스템의 특성 규명 및 예측을 넘어 물질의 다양한 특성을 조절하여 원하는 시스템을 설계하는 방향으로 전개될 가능성이 크다. 이를 위해서는 모델링을 위한 해석 기술 개발과 멀티스케일, 병렬처리 등 계산환경의 구축이 필요하다. 또한 실험을 통한 해석 결과의 검증도 반드시 이루어져야 하며, 비전문가들이 시스템을 쉽게 설계할 수 있도록 DVS(Design Verification System)와 같은 사용자 기반의 해석시스템 개발도 필요하다.

분자동역학

분자동역학은 원자나 분자의 움직임을 고전적 뉴턴 운동방정식의 수치계산을 통해 동역학을 계산한다.^[1,2] 시스템의 내부에너지를 최소화해 위치를 결정하는 분자정역학(molecular statics)과 달리, 분자동역학은 온도, 압력 등 조건에 따라 영향을 받는다. 또한 확률에 의존하는 몬테카를로 방법과 달리 분자동역학은 시간에 따라 시스템의 운동 궤적을 구할 수 있다. 분자동역학 계산을 하기 위해서는 먼저 시스템의 전체 에너지를 위치의 함수로 나타내야 한다. 전체 에너지를 계산하는 방법에는 ab initio, 근사적 전자구조, 실험적 전위식 및 연속체 모델 등 여러 가지 방법이 있다. 그 중 실험적 전위식 방법은 결합구조나 재료의 특성에 따라 여러 가지 형태로 표현될 수 있으며[그림 2], 사용되는 매개변수들은 실험이나 ab-initio 방법과 같은 양자역학 계산결과에 의해 정해진다.

전위식 모델이 정해지면 분자동역학 계산은 적절한 경계조건(periodic boundary condition)과 속도와 위치 등 부여된 초기조건을 가지고 평형화 과정을 수행하게 된다. 일반적으로 초기조건을 가지고 움직이는 입자들은 평형상태에 있지 못하기 때문에 운동에너지를 적분해가면서 시스템의 에너지를 안정화시켜야 한다. 이때 시스템에 강체운동(rigid body motion)이 나타나지 않도록 각각의 속도와 운동량의 합은 0이 되어야 한다. 그런 다음 타당하게 선택되어진 앙상블(ensemble)에 의해 분자동역학을 수행한다. 그림 3은 분자동역학 해석의 개략적인 절차를 보여준다.

Fig. 3. Procedure of molecular dynamics.

Fig. 4. (a) Kinetic mechanism of defect formation for C tubes at 1800 K.^[3] (b) Capping of BN nanotubes.

분자동역학 응용

산업체에서의 분자동역학 해석은 실험을 최소화하면서 소자의 물성, 전자기적, 광학 및 물리/화학적 특성을 예측/규명하기 위해 주로 사용되고 있다. 이를 위하여 본격적인 해석에 앞서 전위식 모델의 신뢰성을 확보하기 위해 실험을 통해 미리 검증하거나 직접 개발하기도 한다.

나노 소재 해석

현재 분자동역학 해석은 주로 나노튜브, 나노선, 나노입자 및 그래핀 등과 같은 나노 소재를 중심으로 진행되고 있다. 그림 4(a)는 탄소 나노튜브의 중요한 결합 형성 메커니즘을 분자동역학 해석으로 보여주고 있다. 고온(1800 K)에서 축 방향으로 변형(strain)된 탄소 나노튜브가 pentagon-heptagon

REFERENCES

- [1] J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation* (Wiley, 1992).
- [2] M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford University Press, 1989).
- [3] Buongiorno Nardelli, Yakobson and Bernholc, Phys. Rev. B **57**, 4277 (1998).

Fig. 5. (a) Atomic configurations of sintering process using molecular dynamics methods. (b) Surface diffusion and grain boundary diffusion of Cu nano particles.

형태의 결합 쌍을 발생시킴을 알 수 있다. 그림 4(b)는 질화 붕소 나노튜브가 capping되는 과정 중에 발생하는 결합을 나타낸다. 일반적으로 (n,n) 질화붕소 나노튜브의 끝은 평평한 구조를 가지는 반면 (n,0) 구조는 뾰족한 형태를 가진다. 분자동역학 해석을 통해 이러한 구조적 변화도 모사할 수 있다.

또한 분자 동역학 해석을 통해 나노입자의 소결(sintering) 메커니즘을 알 수 있다[그림 5(a)]. 나노 영역에서는 나노입자 소결의 경우, 두 가지 메커니즘이 중요하게 작용한다. 나노입자는 표면 곡률(surface curvature)이 크기 때문에 표면에 위치하는 원자들의 영향이 커서 주로 표면 확산(surface diffusion)과 결정립계 확산(grain boundary diffusion)이 발생한다. 그림 5(b)는 소결 해석 중 일어나는 구리 나노 입자의 두 가지 메커니즘 현상을 보여준다.^[4] 이와 같이 분자동역학 해석은 다양한 현상을 규명/예측할 수 있으며, 그림 6은 물질의 파괴(fracture), 나노 인덴테이션(nano indentation), 입자의 충돌(high-velocity impact), 산화(oxidation) 및 습윤(reactive wetting) 등을 해석한 예를 보여준다.

LED GaN 및 InGaN 특성 해석

최근 몇 년간 LED 분야는 산업체의 가장 큰 성장 아이템으로 떠올랐으며, LED 소재인 GaN과 InGaN 층의 구조 및 광학 특성 등을 규명하기 위해 분자동역학 해석은 계속해서 진행되고 있다. 그림 7은 소자 효율에 영향을 미치는 w-GaN

Fig. 6. Multimillion-atom based molecular dynamics simulations of fracture (top left), nanoindentation (top right), high-velocity impact (middle), oxidation (bottom left), and reactive wetting (bottom right).

의 평면결합을 분자동역학 방법을 통해 모사하고 있다.^[5] GaN의 평면결합 중 역 도메인 경계(IDB: Inversion Domain Boundary)는 많은 연구가 진행되어 왔으며, IDB에 의해 발생하는 결정성 문제와 광학 특성에 어떤 영향을 주는지는 아직도 논쟁 중이다. 일반적으로 GaN의 IDB는 크게 IDB*와 Holt 형태로 구분되고, IDB* 결합은 전기적으로 비활성이며 Holt 형태는 활성화되어 있다고 알려져 있다. 또한 적층결합(stacking fault)과의 상호작용에 의해 IDB*의 Holt 형태로의 구조적 변환이 가능하다고 알려져 있다[그림 7(a)]. 그림 7(b)는 평면결합을 갖고 있는 GaN 위에 GaN층이 성장하는 과정을 분자동역학 해석을 통해 보여주고 있다.

LED 발광층으로 주로 쓰이는 InGaN의 경우 In 양이 증가할수록 InN과 GaN의 격자상수(lattice constant) 불일치로

REFERENCES

- [4] G. H. Gu, Atomistic Simulation Project Report (Postech CMSE Lab., 2012).
- [5] W. H. Moon and C. H. Choi, Phys. Lett. A **352**, 538 (2006).

Fig. 7. (a) Formation of Holt IDBs through the interaction of the IDB* with stacking faults (b) GaN layers grown on GaN with the IDBs of IDB* type at different times.

인해 내부 strain이 증가하고, 이에 구조적 변형이 발생해 InGaN의 상분리(phase separation) 현상이 나타난다. InGaN 상분리로 인한 LED 수율과 효율이 감소하기 때문에 이에 대한 대책과 메커니즘 규명이 필요하다. 이러한 현상을 규명하기 위해 분자동역학을 사용하여 InGaN의 In 조성과 온도에 따른 구조적 변화를 모사할 수 있고, InGaN의 적정한 In 양을 결정하기 위한 상태도(phase diagram)를 구할 수 있다.^[6]

자성재료 해석

자성소재 분야의 분자모델링은 자성 특성계산을 위해 전자의 spin까지 고려되어야 하므로 주로 양자역학을 통한 연구가 이루어져 왔다. 최근 영구자석을 포함한 자성소재 연구가 이슈화 되면서 분자동역학을 포함한 다양한 해석까지 관심을 받게 되었다. 자성소재의 원자단위 기반의 분자동역학 접근은 쉽지 않지만, 먼저 희토류(rare-earth)를 포함한 주로 쓰이는 자성물질의 전위식 매개변수 구축이 이루어져야 한다. 최근에는 Nd, Dy 및 Sm 등 희토류가 함유된 자성소재의 전위식이 일부 발표되고 있으며, 또한 원자간 자기 전위식(magnetic interatomic potential)을 통하여 자성물질의 자기특성을 해석하고자 하는 연구도 보고되고 있다(그림 8).^[7] 이 전위식은 밴드(band)의 페로자성(ferromagnetism)을 다루는 Stoner 모델과 Ginzburg-Landau 모델의 조합으로 이루어진 형태이며, 자기 전위식에 의해 얻어진 국부적 자기 모멘트와 그것에 의해 변화하는 원자의 힘을 계산할 수 있다. 그림 8(b)는 원자 기반의 자기모멘트를 계산해 외부 압력이 증가함에 따라 비결정(amorphous) 철(Fe)의 자성-비자성 특성 변화(magnetic/non-

Fig. 8. (a) Magnetic moments for the 110 dumbbell configuration in bcc iron calculated using DFT (top) and the magnetic interatomic potential (bottom) (b) Atomic structures and magnetic moments simulated for different values of mass density.

magnetic transition)를 보여주고 있다. 또한 그림 9는 금속 결합에 자주 사용되는 EAM(embedded atom method) 전위식을 사용하여, 직경 24 nm(원자 560,000개)을 갖는 페로니켈(FeNi) 합금의 오스테나이트(austenite)에서 마르텐사이트(martensite) 구조로의 상변환을 해석한 결과를 보여준다.^[8]

나노 공정 및 소자 해석

산업체에서 분자동역학을 사용한 공정해석은 증착(deposition), 이온주입(ion implantation), 확산(diffusion), 에칭(etching), 레이저 스크라이빙(laser scribing), CMP(chemical mechanical polishing) 공정 등 다양한 분야에서 연구 발표되고 있으며 그림 10은 증착공정에 분자동역학을 적용한 예로 상온에서 Ta 표면 위에 Cu 층을 증착시키고, 그 위에 Al을 증착시킨 후 각각 0.25 ML와 0.5 ML에서의 Al 표면 구조를 보여주고 있다.^[9] 이 해석을 위해 사용된 전위식은 EAM이며

REFERENCES

- [6] W. H. Moon, C. S. Kim and C. H. Choi, Phys. Stat. Solidi C **4**, 1411 (2007).
- [7] P. M. Derlet and S. L. Dudarev, Prog. Mater. Sci. **52**, 299 (2007). UKAEA Fusion Report No. 530 (unpublished) (2006).
- [8] K. Kadau and P. Entel, Phase Transitions **75**, 59 (2002).
- [9] S. P. Kim, K. R. Lee, Y. C. Chung, M. Sahashi and Y. K. Kim, J. Appl. Phys. **105**, 114312 (2009).

Fig. 9. Heterogeneous martensitic nucleation at a plane defect in the spherical $\text{Fe}_{80}\text{Ni}_{20}$ nanoparticle at 50 K.

Fig. 10. (a) Cu deposition on Ta (011) surface using molecular dynamics method (b) 0.25 ML of Al and 0.5 ML of Al depositions on the rough Cu (111) surface.

Ta 원자 160,000개를 사용하여 $33 \times 18.7 \times 4.5 \text{ nm}^3$ 의 기판을 구성하였다. 이 해석을 통해 기판에 흡착되는 대부분의 Al 원자(adatom)들은 Cu 표면의 step이나 plateaus에 위치하는 것을 알 수 있다. 공정해석과 함께 나노소재의 전자, 광학 및 바이오 소자 연구도 지속적으로 진행되고 있으며 특히 나노 튜브, 나노선 및 그래핀 등을 사용한 소자연구가 활발하다. 그림 11은 탄소나노튜브 소자 중 peapod 형태를 갖는 구조를 분자동역학 해석으로 모사한 예를 보여준다. C_{60} 을 내포한 탄소 나노튜브를 데이터 저장이나 메모리 소자로 사용될 수 있는 가능성을 보여준다.^[10,11]

결론

최근 분자동역학의 관심이 늘면서 산업체에서도 관련 기초 연구 및 인프라 확충을 진행하고 있다. 특히 나노 시스템 해석에 있어서는 특성규명 및 예측을 넘어 물질의 다양한 물성을 조절하여 원하는 시스템을 설계하는 방향으로 기술을 개발하고 있다. 이를 위해서는 타당한 전위식 모델 선정과 실

Fig. 11. Schematic design and molecular dynamics for (a) data storage device (b) nanoelectronic memory device.

Fig. 12. (a) Haptics technology for virtual environment of molecular simulation.^[12] (b) Immersive and interactive visualization of large datasets to achieve billion-atom walkthrough.

힘을 통한 검증이 선행되어 해석에 대한 신뢰성을 확보하여야 한다. 또한 큰 영역(large-scale)의 해석 기술개발과 멀티 스케일, 병렬처리 등 계산환경의 구축도 필요하다. 국외에서는 분자모델링 해석의 가상 랩(virtual lab.) 구현을 위한 햅틱(haptic) 기술개발과 인터랙티브(interactive)한 실감영상을 위한 연구가 이미 진행 중이다[그림 12]. 나아가 비전문가들이 시스템을 쉽게 설계할 수 있도록 DVS(Design Verification System)와 같은 사용자 기반의 해석시스템 개발도 필요하다.

REFERENCES

- [10] K. R. Byun, J. W. Kang and H. J. Hwang, J. Korean Phys. Soc. **45**, 416 (2004).
- [11] J. W. Kang, K. R. Byun, J. H. Lee, H. J. Lee and H. J. Hwang, NSTI-Nanotech 2005 **2**, 293 (2005).
- [12] M. Hamdia, A. Ferreira, G. Sharmab and C. Mavroidis, Microelectronics Journal **39**, 190 (2008).