

포항공과대학교 전산재료과학 연구실

이병주 교수

1984년 서울대학교 금속공학과 졸업, 1989년 서울대학교 대학원 공학박사

1998년 ~ Associate Editor of the CALPHAD journal

2010년 대한금속·재료학회 세아해암 학술상 수상, 2017년 대한금속·재료학회 POSCO 학술상 수상

2014년 ~ 한국공학한림원 일반회원, 2017년 ~ 한국과학기술한림원 정회원

전산재료과학

가장 효율적이면서도 재미있는 연구 형태는 어떠한 것일까? 실험하고 분석하면서 생각하고 다시 실험을 반복하는 기존 연구 형태의 순서를 약간만 바꾸어 보자. 먼저 생각하고 계획한 조건에서 실험을 할 경우 어떠한 결과가 나올지를 미리 예측하자. 그리고 실험을 통해 본인의 예측이 맞았는지 틀렸는지를 확인하자. 실험은 분석 또는 생각할 거리를 마련하기 위한 수단이 아니라 자신의 예측이 맞았는지를 확인하기 위한 최소한의 절차가 된다. 전자의 경우 가능한 한 많은 양의 실험을 필요로 하지만 후자의 경우에는 결정적인 몇 번의 실험이면 충분하다. 이 경우 연구는 고도의 지적 게임이 되고 대부분의 학자나 연구원들은 이 지적 게임에 쉽게 몰입하면서 (자신의 예측이 적중했을 경우) 승리의 즐거움을 느낀다.

실험 결과를 정확하게 예측할 수 있다는 것은 실험 대상이 되는 현상을 지배하는 원리를 파악했음을 의미한다. 원리를 파악하고 실험 조건에 따른 결과를 미리 예측한 후 실험 확인을 한다는 것은 Map을 보면서 스타크래프트 게임을 하는 것과 같아서 백전백승이다. 이는 남의 기술을 사서 조립 생산에 의존하는 저급 기술 사회에서는 사치일 뿐이며 스스로 앞서 나가면서 기술 설계도를 창안해 나가는 고급 기술 사회에서나 추구할 수 있는 연구 형태이기도 하다.

학생들이 넓은 범위의 공부를 열심히 해야 하는 이유는 위와 같은 고급 연구를 수행하면서 수준

높은 예측을 할 수 있기 위한 것이다. 수준 높은 예측을 위해서는 많은 지식이 필요하지만 보다 정량적인 예측을 위해 때로는 간단한 모사실험이 필요하기도 하다. 현상을 지배하는 원리의 규명 과정에서 인과관계를 명확하게 하기 위해 주요 실험 변수의 영향만을 고려한 채 비교적 단순한 실험 조건에서 컴퓨터를 통해 하는 실험, 이러한 실험을 전산모사 (computer simulation)라 한다. 전산모사는 원리의 규명 과정이며 완성된 전산모사는 실험을 대체한다.

재료공학은 영어로 "Materials Science and Engineering"으로 표기하는데, "Science"를 포함하는 몇 안 되는 공학 분야 중의 하나이다. 재료는 세상의 모든 물질을 구성하는 소재인 만큼 매우 다양하며, 많은 이학과 공학의 공통된 연구 대상이기도 하고, 재료공학은 이학과 공학을 연결하는 다리 역할을 하는 학문이기도 하다. 재료공학에서 원리의 규명이 강조되는 것은 바로 이학과 공학의 속성을 모두 가지고 있기 때문이다.

소재 연구에서 전산모사는 다양한 조건에서 얻어진 실험 결과를 해석하고 현상을 지배하는 원리를 규명함으로써, 새로운 실험의 방향을 제시하고 결과적으로 소재 개발 연구 효율을 높이는 역할을 한다. 전문지식이 뒷받침되지 않은 창의성이 공상에 지나지 않듯, 원리의 규명과 확인을 동반하지 않는 소재 연구는 경쟁력을 지닐 수 없으며, 전산모사는 이제 많은 소재 연구에서 필수 요소가 되고 있다.

대형 구조용 소재에서 나노 부품 소재에 이르기까지 소재의 크기가 다양한 만큼 소재의 특성에 영향을 미치는 인자 역시 전자분포, 원자구조로부터 소재 형상에 이르기까지 다양한 크기 분포를 가지며, 소재에 대한 전산모사 역시 nano scale에서 meter scale에 이르기까지 넓은 범위에서 수행되고 있다. Meter scale 전산모사 대상으로 대형 소재의 온도분포, 변형거동 등을 들 수 있고 (대표적인 전산모사기법: Finite Element Method), micro scale에서는 소재 상변화 또는 미세조직의 발현을 들 수 있으며 (Phase Field Method, Kinetic Monte Carlo), nano 및 sub-nano scale에서는 원자, 전자 구조의 계산을 예로 들 수 있다 (Atomistic Simulation, First Principles Calculation). 각 scale에서의 전산모사 기법은 단독으로 소재 연구에 활용되기도 하지만 작은 scale의 전산모사 결과를 큰 scale의 전산모사 기법의 input data로 활용하는 multi-scale 전산모사 기법을 개발, 활용하는 것이 현재의 연구 추세이다. 이는 First-Principles Calculation (양자역학계산)을 제외한 모든 전산모사 기법에서 input data로서 모델 상수 값을 주게 되는데 대형 전산모사 결과의 신뢰성을 좌우하는 것이 모델 상수 값의 정확도이기 때문이다. 전산모사를 통해 정성적인 결과만을 요구하는 수준에서는 적절히 가정된 모델 상수 값으로도 충분하지만 전산모사 결과의 정확성에 대한 요구 수준이 높아짐에 따라 보다 정확한 모델 상수 값을 필요로 하게 된다. 예를 들어 대형 금속구조재료의 변형 거동을 보다 정확히 예측하기 위해서는 과거 연속체 모델을 사용하던 한계를 벗어나 재료의 미세조직과 각종 결함을 고려하여야 한다. 재료의 미세조직은 대형 재료에서는 제조 조건이 균일하지 못함으로 인해 부분마다 달라지는데 다른 제조 조건으로 달라지는 미세조직을 별도의 전산모사 기법을 이용해 예측하게 된다. 미세조직을 정확하게 예측하기 위해서는 평형 상 분포, 확산, 계면 에너지 등 기초 특성에 대한 수치 정보를 필요로 하며 이는 상평형

열역학 계산 기법 (Computational Thermodynamic) 또는 원자단위 전산모사 (Atomistic Simulation) 기법에 의존하게 된다. 이들 기법의 모델 상수는 다시 기초 물리특성에 대한 실험 자료를 기반으로 결정되는데 필요한 실험 정보가 없는 경우 가장 정확한 물성 예측 기법으로 인정되고 있는 제일원리계산 (First-Principles Calculation) 기법을 활용하는 것이다. 위와 같은 소재 연구 분야의 multi-scale 전산모사 기법의 유기적 관계를 도식화하면 그림 1과 같다.

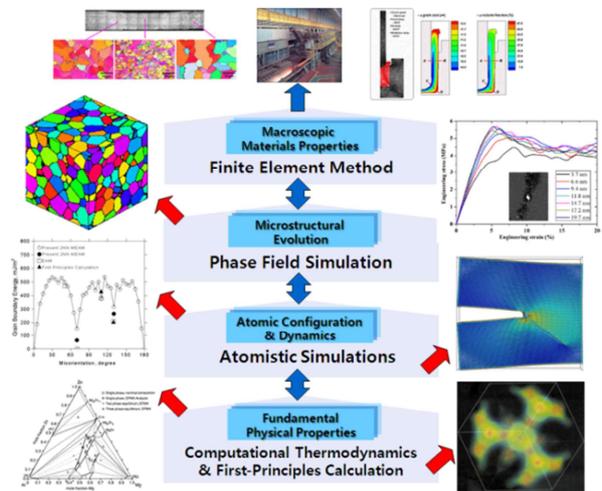


Fig. 1 Multi-scale computational approaches

전산재료과학 연구실

포항공과대학교 신소재공학과 전산재료과학 연구실은 실험정보 또는 제일원리계산을 기초로, 해당 소재 열역학 특성을 예측하는 열역학 계산, 원자구조 특성을 예측하는 원자단위 전산모사 기법을 핵심 기술로 개발하고 있다. 벌크 소재의 경우 Phase Field 또는 kinetic Monte Carlo 등을 접목한 multi-scale simulation을 통해 미세조직의 발현을 예측하고, 다양한 대형 scale 전산재료공학 기법 연구팀과의 공동 연구를 통해 그 기계적 특성을 예측해 냄으로써 기술 개발이 완성된다. Scale이 작은 나노 소재/소자의 경우는 제일원리 계산과 원자단위 전산모사를 통해 소재/소자 특성의 분석, 예측, 제어를 목적으로 하는 또 다른 차원의 이론 연구 체계를 완성해 나가고 있다.

Computational Materials Science

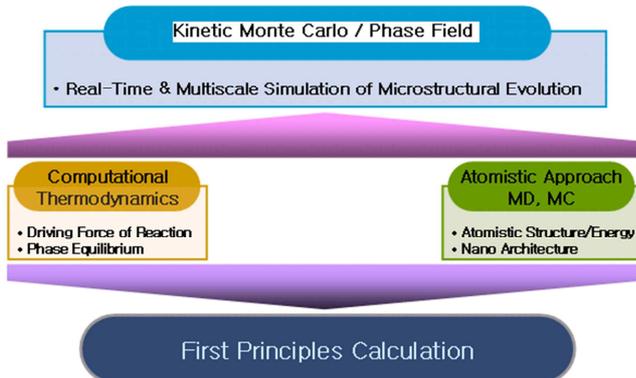


Fig. 2 Computational Approaches in the CMSE Lab

주요 연구 결과

전산재료과학 연구는 소재의 기초 특성을 예측하는 단계를 넘어서, 실험으로는 분석이 어려운 다양한 원자 scale의 소재 현상을 이해하며, 이를 바탕으로 새로운 소재와 공정을 개발하는 단계에서 연구가 진행되고 있다. 최근 당 연구실에서 이루어진 전산 소재·공정 설계 연구의 대표적인 예를 아래에 소개한다.

열역학 계산 기법을 통한 고엔트로피 합금 설계

고 엔트로피 합금은 주 원소, 합금원소의 구분 없이 5 개 이상의 원소가 서로 비슷한 비율로 혼합되어 있음에도 FCC 또는 BCC 단상으로 구성된 합금으로, 고온안정성 (느린 확산), 저온 강도와 연성 및 내식성 면에서 타의 추종을 불허하는 성능을 보이면서 최근 폭발적인 연구 관심이 집중되고 있는 소재이다. 5원 고합금계에서 FCC 단상 영역을 실험적으로 탐색하는 것은 많은 시행오차를 필요로 하지만, 열역학 계산 기법을 활용할 경우 탐색 시간을 크게 단축시킬 수 있다. 그림 3은 Co-Cr-Fe-Mn-Ni-X 6원 합금계에서 Fe, Ni, Mn 성분량에 따른 fcc 단상 영역 범위 및 선택한 조성에서의 온도에 따른 평형 상분포를 열역학 계산으로 예측한 결과이다.

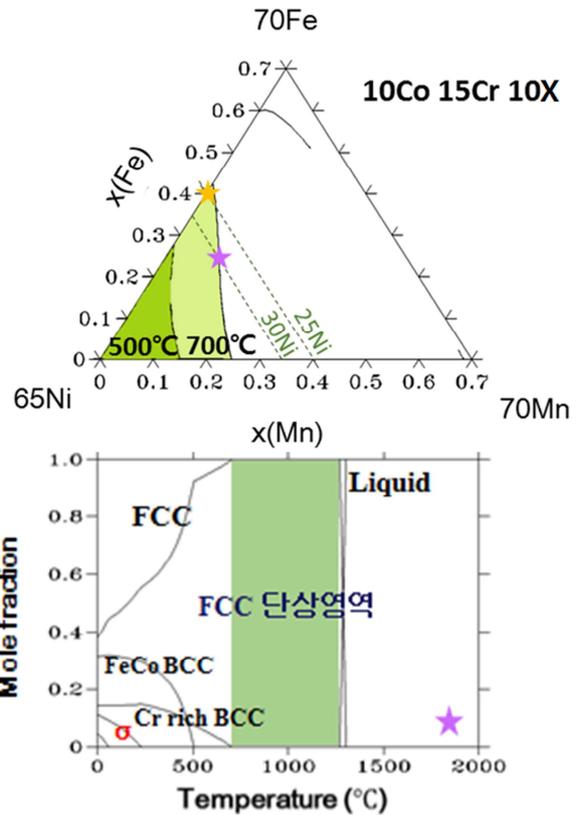


Fig. 3 Co-Cr-Fe-Mn-Ni-X 6원 합금계에서 상태도 및 선택 조성에서의 온도에 따른 상분포 예측

위와 같은 방법으로 대여섯 종의 새로운 HEA합금을 설계하고 이를 실험 연구팀과의 공동연구를 통해 제조한 결과 800°C 열처리에서 모두 FCC 단상이 얻어짐을 확인할 수 있었으며, 합금 조성과 열처리 공정이 아직 최적화되지 않은 예비 실험 단계에서도 기존 대표적 FCC 고엔트로피 합금인 Cantor 합금에 버금가는 성능을 얻을 수 있었다.

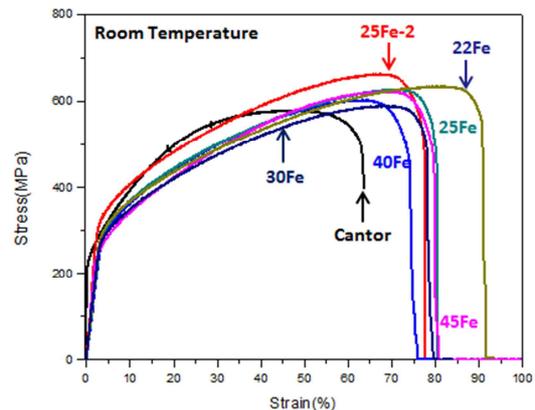


Fig. 4 Tensile property of CoCrFeMnNiX HEA alloys

고부가가치 {100} 집합조직 강판 제조

고부가가치를 지닌 전기강판은 현재 {110}<001> Goss 집합조직을 가진 강판이 사용되고 있으나, 자성 특성으로 인하여 {100} 집합조직을 유도할 수 있다면 전기강판으로서의 기능이 훨씬 향상된다고 알려져 있다. BCC 금속은 {110} 표면이 가장 낮은 에너지를 가지기 때문에 박판을 열처리할 경우 {110} 표면을 가진 입자들이 자연적으로 성장하며, {100} 표면 입자를 성장시키는 것은 수월하지 않다. 본 연구팀은, 표면에 불순물 원자들의 편석이 발생할 때, 상대적으로 안정한 {110} 표면에 편석이 덜 발생하고 {100} 표면에 편석이 더 발생하며 (그림 5), 이 경우 {110} 표면보다 {100} 표면에 에너지가 더 낮아질 수 있다는 것을 원자단위 simulation을 통해 발견 하였다.

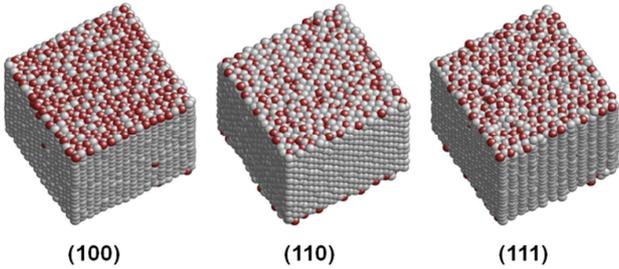


Fig. 5 Monte Carlo simulation of surface segregation

또한, 이와 같은 표면에너지의 변화가 {100} 집합조직의 형성을 실제로 야기할 수 있는지, 있다면 어떠한 조건이 최적의 조건이 될지를 meso-scale (Phase Field) simulation을 통해 분석하였다. 이 simulation을 통해서도 표면편석과 입자성장이 동시에 시작되는 조건 (Fig. 6a)보다는 표면편석이 먼저 발생하여 표면에너지가 재조정되고 이후 입자성장이 발생하는 조건 (Fig. 6b)에서 {100} 집합조직이 더 수월하게 형성될 수 있다는 것을 알 수 있었다. 후자의 조건을 실험적으로 구현하는 것은 재결정온도 이하에서 1차 열처리 (표면확산 유도)를 하고 재결정온도 이상에서 2차 열처리 (입자성장 유도)를 실행하는 것이었다. 이러한 결론 하에 공동연구팀에서 실험을 실시하였으며 별도의

시행오차 과정을 거치지 않고, 기존 Goss 집합조직 강판보다 훨씬 단순한 공정을 통해, 강력한 {100} 집합조직을 가지는 강판을 얻을 수 있었다 (Fig. 7).

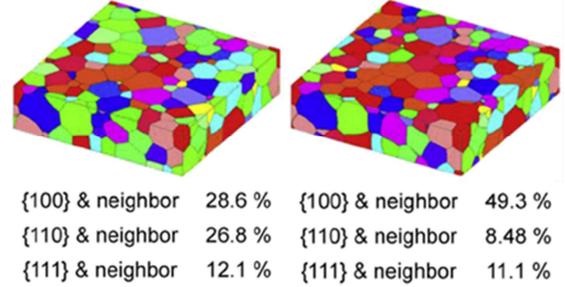


Fig. 6 표면편석과 입자성장이 동시에 일어날 때 (좌)와 순차적으로 일어날 때(우)의 미세조직 발현 simulation 결과

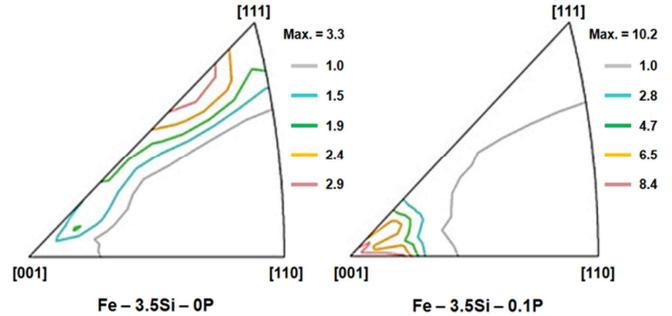


Fig. 7 불순물 (P) 표면편석을 유도하지 않은 경우와 유도한 경우의 실험제조 강판에서의 집합조직

고성형성 Mg 합금 설계

Mg은 가장 가벼운 구조용 금속 원소로, 소재 경량화에서 대표적으로 거론되는 원소이다. Mg 합금을 가격 경쟁력을 갖춘 구조용 소재로 활용할 수 있기 위해서는 상온 성형성을 개선하는 것이 핵심 이슈이다. Mg 합금의 성형성은 슬립 시스템이 상대적으로 덜 발달한 HCP 구조에서 연유하며 (non-basal slip계 부족), 이를 개선하기 위해 수많은 합금원소가 첨가되어 왔고, 최근 Y 등 고가의 RE 원소 첨가 시 성형성 개선 가능성이 발표된 바 있다.

본 연구팀은 Mg-Y 합금 소성변형 과정에 대한 atomistic simulation을 통해, Y은 non-basal slip 보다 basal slip에 상대적으로 강한 고용강화효과를

야기함으로써, basal과 non-basal slip 저항성을 비슷하게 만듦으로써 연성을 향상시킨다는 것을 발견하였다 (Fig. 8). 그리고 그러한 작용을 하는 근본 원인이 dislocation과 solute atom 간의 binding에 근원을 가지고 있으며, 더 나아가 size mismatch로 인해 dislocation과의 binding을 야기할 수 있는 모든 합금원소들이 동일한 메커니즘으로 연성을 향상시킬 수 있는 잠재력이 있다는 결론을 내리게 되었다. 이를 증명하기 위한 방안으로, 또한 보다 가격 경쟁력을 가진 고성형성 Mg 합금 개발을 목표로, 지금까지 전혀 연성을 개선시키는 원소로 알려진 바가 없는 commercial 원소들을 첨가할 경우에도 합금량 조절을 통해 연성개선 효과를 얻을 수 있음을 실험적으로 구현하기 위한 공동연구를 수행하고 있다.

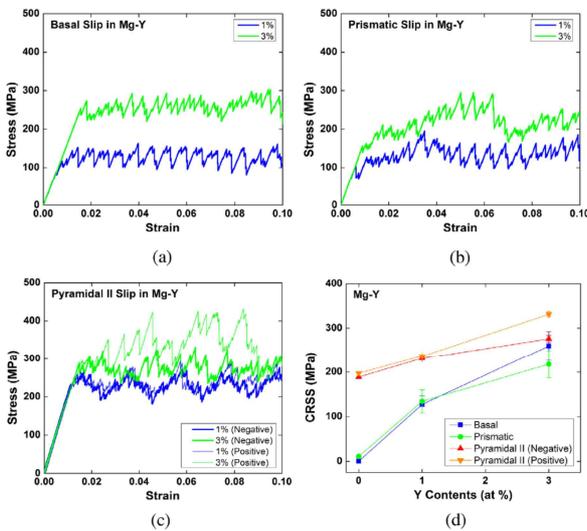


Fig. 8 Mg basal, non-basal slip 거동에 미치는 Y 첨가 영향

리튬이온전지 양극소재 최적화

리튬이온전지 (LIB) 양극소재는 용량 증가는 물론 반응 속도, 안정성 확보를 목표로 꾸준한 소재, 공정의 개발 연구가 진행되고 있다. 본 연구팀은 최근 금속 결합, 공유결합, 이온결합 특성을 동시에 가지고 있는 물질계에 대한 atomistic simulation을 가능하게 하는 interatomic potential model을 개발한 바 있으며, 이를 Li-(Mn,Co,Ni)-O 5 원계에 적용하여, Li

확산 및 Lithiation/Delithiation 반응 중 원자구조의 변화, 결합 형성 거동 면에서 최적의 조성 (Mn, Co, Ni 비율)을 도출하기 위한 연구를 수행하고 있다. 그림 9는 Li-Mn-O 3원 양극 소재에서 Li 성분량에 따라 안정성이 달라지는 산화물 구조들을 나타낸다.

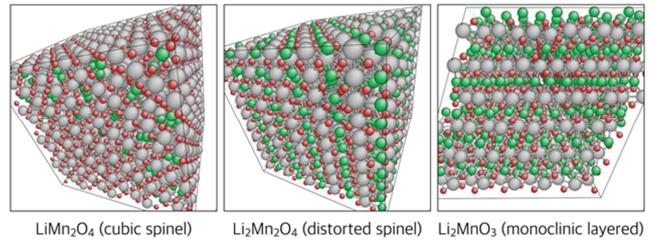


Fig. 9 Li-Mn-O compounds as anode materials for LIB

당 연구실에서 개발한 interatomic potential model은 multicomponent metallic oxide system에 대해서는, 기존 개발된 어떤 potential model보다 우수한 성능을 보이는 model로서, 폭넓은 소재 군에 대해 atomistic approach를 활용한 기초 특성의 이해 및 소재-공정 개발 연구를 선도하게 해 줄 것이다.

연구실 운영 철학 및 첫 학기 교육 과정

전산재료과학 연구실은 직접적인 소재 개발보다는 훗날 있게 될 다양한 첨단 소재의 연구개발 수행 기초 능력 배양이 가장 중요하다는 교육 철학을 가지고 운영되고 있다. 당 연구실은 computational thermodynamics 및 atomistic simulation을 주력 연구 수단으로 하며, 그 출발점이 되는 thermodynamic/interatomic potential database 개발 분야에서 국제적인 경쟁력을 갖추고 있다. 이를 기반으로 atomistic approach를 통해 나노 구조물 또는 나노 소재의 구조 및 기계 특성, first principles calculation과의 결합을 통해 나노 소재/소자의 기능 특성, phase field 또는 kinetic Monte Carlo simulation과의 결합을 통해 구조 재료의 미세조직 특성 등을 분석/예측하고 design하는 연구를 수행하고 있다. 학위과정 중에는 다양한 실험 연구 그룹과의 공동 연구를 통해 학제간 공동 연구 수행 경험, 이론 연구 결과의 실제 활용 경험을 쌓게 된다.

위와 같은 연구 수행을 위해 전산재료과학 연구실에서 첫 학기를 시작하는 대학원 신입생들이 공부하게 되는 내용을 요약한다. 석사 첫 학기에는 Computational Thermodynamics, Atomistic Simulation의 ABC를 이해한 후 ThermoCalc, KissMD&MC 등 관련 프로그램 사용 방법을 완벽히 숙지하는 것을 목표로 한다. 첫 학기 후 방학 기간에는 기초 과제 수행을 통해 보고서/논문 작성법과 presentation 기법 등을 훈련하며, 2학기부터는 본격적인 개인 연구 과제와 기초를 다지기 위한 공부(강의 수강)를 시작한다.

전산재료과학 연구실에서 Computational Thermodynamics와 Atomistic Simulation 기법은 필수이며, 개인 성향에 따라 First-Principles Calculation 또는 Phase Field / Kinetic Monte Carlo Simulation을 병합하여 개인 차원의 전산재료과학 연구체계를 완성해 나간다.

1. 개강 전 (입학 전 방학 2개월)

1.1. Introduction to computational thermodynamics

- "전산재료과학" 홍릉과학출판사 part 1
- "Computational thermodynamics" Cambridge
- Thermodynamic Assessment를 통해 ThermoCalc 사용법 Master

2. 학기 중

2.1. Fundamentals of Atomistic Simulation

- "전산재료과학" 홍릉과학출판사 part 2
- "Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods" John Wiley & Sons, Inc.

2.2. Atomistic Simulation

- 기본 기법 및 code 이해
- KISSMD, KISSMC 사용법 Master
- Atomic Potential (MEAM) 이해

3. 첫 학기 후 방학 중

- 3.1 기초 과제 수행, 보고서 작성
- 3.2 보고서, 논문 작성 방법, Presentation 기법 훈련
- 3.3 첫 학기 연구 경험을 통해 분야를 선택하고, 해당 분야에서 스스로 부족한 학술 분야의 강의 수강 계획 작성

4. 두번째 학기 이후

- 4.1 연구원으로서의 기초 능력 확장 (강의 수강)
- 4.2 개인 연구 과제 수행 (주 1회 지도교수 면담)
- 4.3 연 4회 term paper 작성, Lab 세미나 발표

