

23. 학사논문 지도교수: 조 맹 효

23-1. 분자동역학 전산모사를 이용한 나노구조물 해석

23-2. 양자역학 전산모사를 이용한 멀티피직스-멀티스케일 해석

23-3. 지능재료를 이용한 작동기 해석·제작·설계에 대한 연구

23-4. 차원 축소 및 균질화법을 이용한 구조물 해석

교수 연락처 전화: (02) 880-1693, E-mail: mhcho@snu.ac.kr

실험실: 지능구조설계 연구실(Smart Structures & Design Lab.)

연락처 전화: (02) 877-1645, 담당조교: 이 용 희, E-mail: wickyguy@snu.ac.kr

연구실 홈페이지: <http://ssnd.snu.ac.kr>

23-1. 분자동역학 전산모사를 이용한 나노구조물 해석

학사논문 지도교수: 조 맹 효

최근 나노 스케일에서의 물리적 현상 규명에 관련한 연구가 활발히 진행됨에 따라 이러한 스케일에 대한 전산해석의 필요성이 크게 대두되고 있다. 이에 따라 순수과학 분야에서 주로 이용되었던 양자역학과 분자동역학 등의 전산모사 해석 기법이 기계공학 분야에서도 적극적으로 도입, 연구되고 있다. 이 중에서도 분자동역학은 분자규모의 미시적인 모형을 해석하는데 있어서 매우 효과적인 방법으로, 원자 간의 상호작용 포텐셜에 의한 분자의 동역학적인 거동을 해석하고 이를 통해 시스템에 대한 특성을 규명하는 방법이다. 이를 위해서 동일한 거시적 성질을 공유하는 수 많은 시스템의 집합체인 앙상블 전산모사를 수행하게 된다. 앙상블 시뮬레이션에는 전체 원자 수와 부피 그리고 에너지가 보존되는 NVE 앙상블, 전체 원자 수와 부피 그리고 온도가 일정하게 유지되는 NVT 앙상블 등이 있으며, 특히 기계적 물성을 구하기 위한 분자동역학 전산모사의 경우 시뮬레이션 대상의 원자 수, 온도 그리고 응력이 일정하게 유지되는 $N\sigma T$ 앙상블 시스템을 구현해야 한다. 이러한 시스템들로부터 기계공학분야에서 요구하는 응력-변형률 관계를 도출하기 위해, 모델링한 분자 시스템에 일정한 하중을 부과하면서 시간에 따른 원자들의 위치와 속도를 연속적으로 적분하여 시스템의 시간 종속적인 거동변화를 얻어낸다. 이때 구조물의 Bulk 효과를 구현할 수 있도록 주기경계조건을 부과하며, 적은 수의 원자만으로도 거시적 성질을 구현할 수 있도록 Virial 이론을 도입한다. 본 연구에서는, 분자동역학의 기본 개념에 대한 이해에서 출발하여, 금속재료 및 고분자화합물 소재의 원자구조에 대한 이해와 포텐셜 관계식으로서의 확장 그리고 실제적 프로그래밍과 해석결과 도출을 목표로 하며, 도출된 결과를 실험을 통해 얻어진 일반적인 데이터와 정량적으로 비교하여 해석 방법론의 타당성 및 효용성을 평가한다.

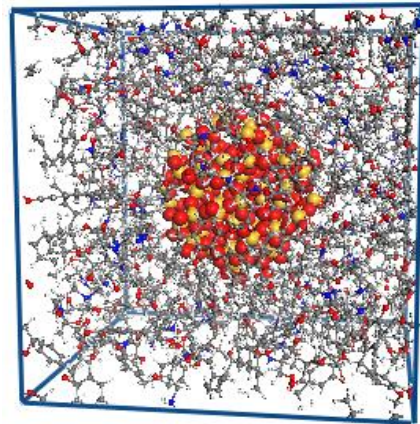


그림1. 나노복합재 구조물의 물성 해석을 위한 RVE (Representative Volume Element)

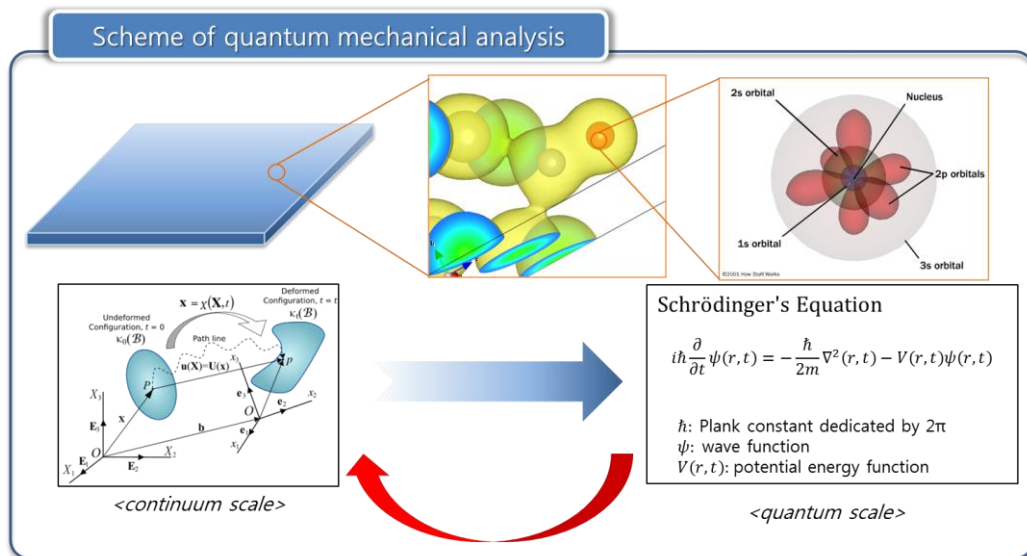
담당조교 : 신 현 성 (p2530@snu.ac.kr)

23-2. 양자역학 전산모사를 이용한 멀티피직스-멀티스케일 해석

학사논문 지도교수: 조 맹 효

2000년도 이전의 구조물에 대한 멀티스케일 해석은 분자동역학 수준에서 머물러 있었다. 비록 양자단위의 전산모사가 가능하긴 했지만 전산 처리 능력의 한계로 양자역학 수준의 전산모사는 그 쓰임새에 한계가 있었다. 하지만 2000년도 이후로 전산 처리 능력이 향상됨에 따라 보다 정밀한 멀티스케일 해석을 위해 양자역학, 분자동역학, 연속체역학을 아우르는 멀티스케일 해석의 기반이 완성되었고, 이와 관련된 연구들이 전 세계적으로 진행되기 시작했다. 뿐만 아니라 Piezoelectricity의 성질을 가지는 재료의 해석, 연료전지의 전해질 부분에서의 균열 해석, Li-ion 배터리 내부에서의 Li분자의 확산 해석 등, 최근의 구조와 관련된 연구들에서는 전기적·화학적 변화가 혼합된 상황에서의 구조물의 변화를 해석해야 하는 상황이 발생하기 시작하였다.

본 연구에서는 양자역학 전산모사 기법 중의 하나인 Density Functional Theory(DFT) 기법을 이용하여 연구를 진행할 예정이다. DFT 기법을 이용하여 구조물 내부에서의 전기적 혹은 화학적 변화가 구조물의 물성과 거동에 어떤 영향을 주는지를 파악하거나, 반대로 구조물의 거동이 구조물 내부의 전기적 혹은 기계적 양상에 어떠한 영향을 주는지를 파악하는 것에 중점을 둘 예정이다. 또한 연구를 통해 밝혀진 연관관계를 이용하여 기존의 멀티스케일 해석에서 더 나아가, 전기·자기·화학적 요소가 가미된 멀티피직스-멀티스케일 해석을 진행할 예정이다.



담당조교 : 임 진 명 (jmlim0227@snu.ac.kr)

23-3. 지능재료를 이용한 작동기 해석·제작·설계에 대한 연구

학사논문 지도교수: 조 맹 효

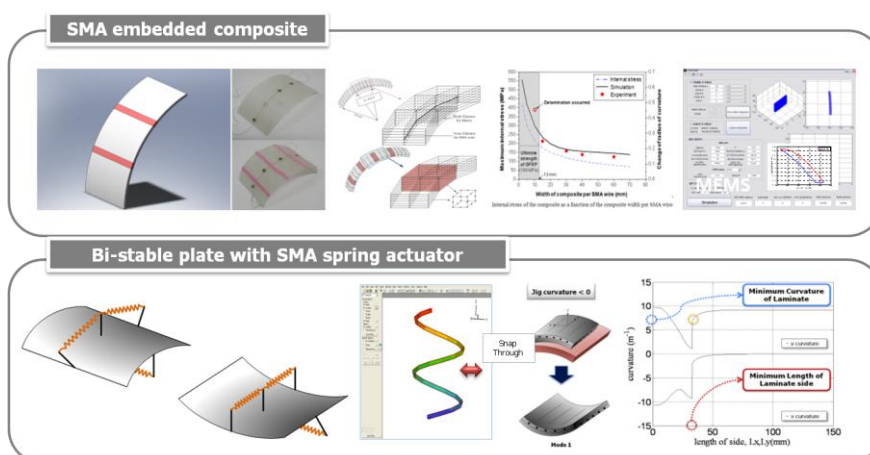
지능재료는 재료 자체에 센서기능과 작동기능을 가짐과 동시에 감지된 외부환경에 반응하도록 하는 프로세스 기능을 가진 능동적인 재료로, 형상기억합금(SMA), 압전소자(piezo), 열전소자등이 있다. 그 중 대표적인 지능재료가 형상기억합금이다.

형상기억합금은 상 변이에 의해서 열-기계적 변형이 발생한다. 형상기억합금의 온도를 제어하여 상 변형 후 형상과 상 변형 전 형상으로 형상기억합금의 형상을 제어할 수 있다. 이러한 특성 때문에 형상기억합금은 광범위한 지능구조물에 적용되고 있으며 국내외적으로 활발히 연구가 진행 중이다.

형상기억합금에는 두 가지 상[Phase : 마텐사이트(저온특성), 오스테나이트(고온특성)]이 있는데 이들은 온도와 응력의 변화에 상 변이 또는 변형을 일으킨다. 이런 상 변이 또는 변형양상에 따라 다섯 가지 중요한 현상이 있는데 이들 중 우리는 형상기억합금효과 즉, SME 현상을 바탕으로 복합재료의 Actuator로서의 효과를 관찰하고자 한다. 여기서 SME란 일정 온도 하에서 응력을 증가시키면 큰 변형을 일으키는 상 변이가 발생하며 다시 전기적으로 열을 가하면 원래의 형상으로 복귀하는 현상이다.

형상기억합금을 사용한 작동기는 구조가 아주 간단하면서 큰 힘을 내도록 할 수 있으며, 작동기를 가볍게 만들 수 있어서 구조물의 경량화에도 큰 역할을 한다.

응용의 예들로는 우주선 안테나의 형상제어, 항공기 날개의 형상제어 및 진동제어, 잠수함 고물(stern)의 형상제어 등에 사용이 가능하다.



담당조교 : 이 종 구 (jjonggul2@snu.ac.kr)

23-4. 차원 축소 및 균질화법을 이용한 구조물 해석

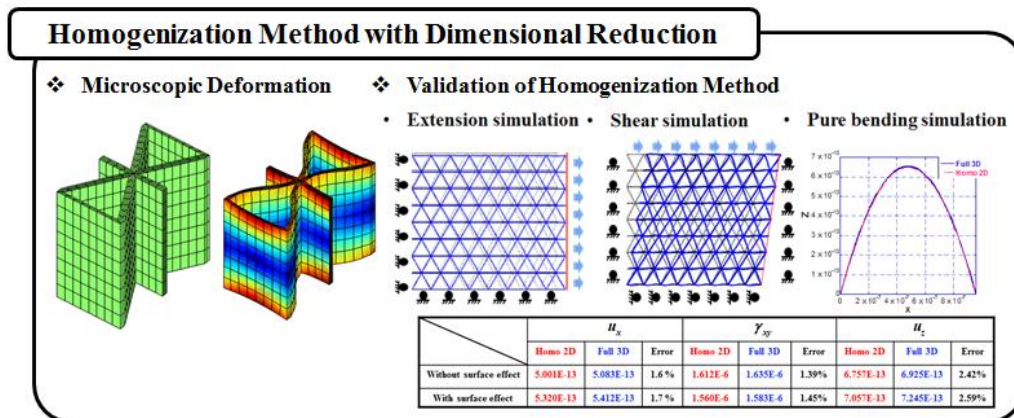
학사논문 지도교수: 조 맹 효

구조물은 그 자체의 독특한 형상에 따라 다양한 기계적 물성을 가지게 되며, 이를 이용하기 위해 다양한 형태의 구조물이 개발되었다. 이에 따라 구조물의 설계 및 제작을 위해 구조물의 물성을 얻는 방법의 필요성이 대두되고 있으며, 대표적인 방법 중 한가지로 균질화법에 대한 연구가 예전부터 활발하게 이루어져 왔다.

균질화법은 구조물의 단위셀에 대한 등가의 강성을 산출하여 계산 효율성을 증대하는 것을 목적으로 하며, 크게 해석적 접근법과 수치적 접근법으로 분류될 수 있다. 해석적 방법의 경우, 셀구조의 거동에 대한 해석해를 구하기 위해 많은 연구들이 진행되어 왔으나, 유도 과정에서 도입된 가정으로 다소 부정확한 결과를 초래하게 되며 복잡한 형상에 적용하기 어려운 한계를 지니고 있다.

반면 수치적 균질화 기법은 유한요소법을 이용하여 보다 정확한 결과를 예측할 수 있다. 또한 수치적 균질화 기법은 구조물의 단위셀이 주기성을 유지할 경우 구조물의 형태에 상관없이 등가의 강성을 쉽게 구할 수 있으며, 해석적 방법과 비교해 높은 정확성과 효율성을 제공한다. 추가적으로, Kirchhoff 판 이론을 접목하여 내면방향 주기성이 있는 3차원 구조물을 등가의 물성을 갖는 2차원 평판으로 대체함으로써 더욱 효율적인 계산을 할 수 있다.

본 연구는 앞서 제기된 방법들을 이용하여 다양한 구조물(honeycomb, isogrid, lattice)의 등가의 물성을 얻고, 이를 직접적인 수치 계산과 비교하여 수치적 균질화법에 대해 연구하고자 한다.



담당조교 : 이 용 희 (wickyguy@snu.ac.kr)