# 분자동역학 시뮬레이션을 통한 나노 물질의 구조·역학·통계적 거동 통합 연구

**저자: 임재성, 서승준, 김진서, 장보성, 강승모**

**ABSTRACT**

본 연구는 분자동역학(Molecular Dynamics, MD) 시뮬레이션을 활용하여 나노 스케일에서 물질의 구조적·역학적·통계적 거동을 통합적으로 해석하고자 하였다. 이를 위해 다양한 시스템을 대상으로 전산 모사를 수행하였다. 먼저, 이산화티타늄(TiO₂) 모델의 압입 시뮬레이션을 통해 나노 물질의 변형 및 응력 분포를 분석하였고, 전원자 분자동역학을 이용해 분자 개질 고분자 화합물의 구조적 안정성과 거동 변화를 확인하였다. 또한, 에르고딕성 검증을 통해 시뮬레이션 결과의 통계적 신뢰성을 확보하였으며, 고분자 전해질 시스템을 모사하여 이온 전도성과 분자 운동성을 탐구하였다. 이러한 일련의 시뮬레이션 연구를 통해 분자동역학이 나노 스케일에서의 물질 특성을 정량적으로 이해하고 예측하는 효과적인 도구임을 확인하였다. 본 연구는 나노 물질의 물리·화학적 거동 해석뿐 아니라 신소재 설계 및 에너지 소재 연구에도 응용 가능한 기초 자료를 제공한다는 점에서 의의가 있다.

추가 탐구 목차

(1) 에르고딕성\_검증을\_통한\_MD\_탐구 (김진서)

(2) 전원자 분자동역학 전산모사를 통한 분자 개질 고분자 화합물의 구조와 거동 연구 (장보성)

(3) 분자동역학 시뮬레이션을 통한 고분자 전해질 연구 (임재성)

(4) 분자동역학을 통한 이산화티타늄(TiO₂)의 압입실험 시뮬레이션 (서승준)

(5) 전구체\_논문기반\_확장\_탐구보고서 (강승모)

1. 에르고딕성\_검증을\_통한\_MD\_탐구

**- 에르고딕성(Ergodicity) 검증을 통한 분자동역학(MD)의 근원적 타당성 탐구**

저자: 김진서

## 1. 서론

본 연구는 분자동역학(Molecular Dynamics, MD)의 근원적 타당성을 검증하기 위해 통계역학의 핵심 개념인 에르고딕성(Ergodicity)을 실험적으로 탐구한다. 에르고딕성은 충분히 긴 시간 동안 하나의 계(system)를 관찰한 시간평균(time average)이 같은 조건에서 여러 초기조건으로 얻은 앙상블 평균(ensemble average)과 같아지는 성질을 의미한다. 따라서 이 성질이 성립한다면, 하나의 긴 시뮬레이션 궤적만으로도 전체 시스템의 평균적 특성을 대표할 수 있게 된다.

## 2. 연구 목적

1) MD 시뮬레이션에서 시간평균과 앙상블 평균의 일치 여부(에르고딕성)를 검증한다.
2) 어떤 물리량이 에르고딕성 검증에 가장 민감하게 반응하는지를 규명한다.
3) 비에르고딕성(Non-ergodicity) 상황에서 이를 개선하기 위한 방법(예: 향상된 샘플링 기법)을 고찰한다.

## 3. 이론적 배경

분자동역학(MD)은 뉴턴의 운동법칙(F = ma)에 기반하여 각 원자에 작용하는 힘을 계산하고, 시간에 따른 위치와 속도를 수치적으로 적분하는 방식으로 분자의 움직임을 추적한다. 이때 시스템의 물리적 성질은 개별 원자의 순간 상태가 아니라, 충분한 시간 평균 또는 앙상블 평균으로 정의된다. 따라서 에르고딕성은 MD의 타당성을 뒷받침하는 핵심 개념이다.

## 4. 연구 방법

① 시스템 구성: Lennard-Jones(LJ) 입자 또는 아르곤(Ar) 100~500개로 구성된 단순 결정 구조.
② 시뮬레이션 조건: NVE(에너지 보존) 앙상블, Δt = 1 fs, 총 시뮬레이션 시간 1 ns 이상.
③ 초기조건 설정: 동일한 구조에서 서로 다른 초기 속도 분포(seed)를 부여하여 여러 시뮬레이션 수행.
④ 분석 물리량: 총 에너지, 온도, 속도 분포, 평균제곱변위(MSD), 자기상관함수(VACF) 등.
⑤ 분석 방법: 시간평균과 앙상블 평균을 비교하여 통계적으로 일치하는지 검정(KS test, KL divergence 등).

## 5. 에르고딕성 판단 기준

시간평균과 앙상블 평균이 통계적으로 유의한 차이를 보이지 않으면(예: p > 0.05), 에르고딕성이 성립한다고 판단한다. 반대로 차이가 존재하거나, 자기상관함수가 장시간 잔류하면 비에르고딕성으로 간주한다.

## 6. 비에르고딕성 발생 원인 및 대처

비에르고딕성은 높은 에너지 장벽, 불충분한 샘플링, 복잡한 자유도로 인해 발생할 수 있다. 이를 완화하기 위해 여러 초기조건을 통한 앙상블 확장, 강화 샘플링(metadynamics, umbrella sampling) 또는 시뮬레이션 시간 확장을 활용할 수 있다.

## 7. 기대 결과 및 의의

본 탐구를 통해 분자동역학 시뮬레이션이 왜 하나의 궤적으로도 전체 시스템의 평균 거동을 대표할 수 있는지를 직접 검증할 수 있다. 이는 MD의 물리적·통계적 근거를 실험적으로 확립하는 연구로서, 시뮬레이션 결과의 신뢰도를 강화하는 의미를 가진다.

## 8. 참고 문헌

[1] 시뮬레이션으로 해석하는 나노 세계의 역학, KENTECH R&E Vol.4 (2025)
[2] Piaggi, P. M., Valsson, O., & Parrinello, M. (2017). Physical Review Letters, 119(1):015701.
[3] Hollingsworth, S. A., & Dror, R. O. (2018). Neuron, 99(6):1129–1143.
[4] Markus J. Buehler (2007). MIT OCW: From nano to macro – Introduction to atomistic modeling techniques.

2. 전원자 분자동역학 전산모사를 통한 분자 개질 고분자 화합물의 구조와 거동 연구

저자: 장보성

## Ⅰ. 서론

1. 연구 동기

오늘날 우리가 사용하는 플라스틱, 섬유, 접착제 등은 모두 고분자(폴리머)로 이루어져 있다. 이러한 고분자들은 원자 수천 개가 연결된 복잡한 구조를 가지므로, 그 내부의 움직임을 실제 실험으로 관찰하기는 매우 어렵다. 이때 분자 동역학 시뮬레이션(Molecular Dynamics Simulation)은 원자 간의 힘과 운동을 컴퓨터로 계산하여 물질의 거동을 예측하는 도구로 활용된다. 이 연구는 서울대학교 이민환 박사의 박사학위 논문 「전원자 분자동역학 전산 모사를 통한 분자 개질 고분자 화합물의 구조와 거동 연구(2023)」를 바탕으로, 시뮬레이션을 이용해 나노 세계의 역학적 특성을 해석하는 과정을 이해하고자 한다.

2. 연구 목적

1) 분자 동역학 시뮬레이션의 원리를 이해한다.

2) 고분자 구조 변화가 물질의 성질에 미치는 영향을 파악한다.

3) 실제 연구 사례를 통해 시뮬레이션의 활용 가능성을 탐구한다.

## Ⅱ. 본론

1. 분자 동역학 시뮬레이션의 원리

● 모든 원자의 위치, 속도, 힘을 계산하여 시간에 따른 움직임을 예측하는 방법이다.

● 뉴턴의 운동 법칙을 이용하며, 원자 간의 인력과 반발력을 컴퓨터가 계산한다.

● 나노 수준에서 물질의 구조 변화나 역학적 특성을 이해하는 데 필수적인 방법이다.

2. 연구 사례 요약

(1) FCVJ 분자 회전자 연구

● FCVJ는 형광을 내는 분자로, 머리(줄롤리딘)와 꼬리(파르네실) 부분으로 구성된다.

● 시뮬레이션 결과, 온도가 낮을수록 머리 부분은 움직임이 느려지고 꼬리 부분은 비교적 유연하게 남았다.

● 이러한 차이가 나타나는 온도는 고분자의 유리전이온도(Tg)와 일치했다. → 즉, 분자 하나를 통해 고분자의 상태 변화를 컴퓨터로 분석할 수 있음을 보였다.

(2) 알킬화 그래핀 산화물(AGO) 연구

● 그래핀 산화물(GO)에 알킬 사슬을 붙여 성질을 조절하였다.

● 알킬 사슬이 길수록 층 간 간격이 넓어지고 물질이 유연해졌으며, 짧을수록 단단해졌다. → 분자 구조의 길이를 조절함으로써 재료의 강도와 성질을 설계할 수 있음을 입증했다.

(3) 메조겐 에폭시 수지 연구

● 평면형 구조의 ‘메조겐’ 분자를 에폭시 수지에 첨가했을 때, 분자들이 일정 방향으로 정렬되었다.

● 이 정렬로 인해 열이 잘 이동하는 경로가 형성되어 열전도율이 증가했다. → 분자 배열을 제어하면 물질의 물리적 특성을 향상시킬 수 있음을 확인했다.

## Ⅲ. 결론

이 연구는 시뮬레이션이 단순한 계산을 넘어서, 나노 세계의 보이지 않는 움직임을 이해하는 강력한 과학적 도구임을 보여준다.

● 원자 하나하나의 운동을 모사하여 실제 실험처럼 관찰할 수 있다.

● 분자 구조의 작은 변화가 물질의 강도, 유연성, 열전도성과 같은 성질을 바꾼다는 사실을 증명했다.

● 이러한 결과는 신소재 개발, 반도체 공정, 나노기술 연구 등 다양한 분야에 활용될 수 있다.

## Ⅳ. 탐구 확장 아이디어

1) PhET 시뮬레이션을 이용해 온도에 따른 입자 운동 변화를 관찰하기

2) 고무줄 모형을 활용하여 구조(삼각형, 사각형 등)에 따른 강도 차이 실험하기

3) 간단한 입자 시뮬레이션(파이썬 등)으로 분자 충돌과 운동 시각화하기

## 참고문헌

이민환, 「전원자 분자동역학 전산 모사를 통한 분자 개질 고분자 화합물의 구조와 거동 연구」, 서울대학교 화학생물공학부 박사학위논문, 2023. - PhET Interactive Simulations, University of Colorado Boulder. - 나노소재 및 분자 시뮬레이션 관련 교재 및 논문 요약.

3. 분자동역학 시뮬레이션을 통한 고분자 전해질 연구

저자: 임재성

## 1. 서론 - 연구 배경 및 목적

최근 리튬이온전지의 폭발 및 발화 문제로 인해, 안전하고 효율적인 에너지 저장소재에 대한 관심이 높아지고 있다. 특히 유기 용매 기반의 전해질 대신, 고체 또는 고분자 기반 전해질을 이용한 차세대 전지 기술이 주목받고 있다. 고분자 전해질은 이온 이동이 가능한 고분자로, 전해질의 안전성과 내구성을 크게 향상시킬 수 있다. 본 탐구는 손창윤(2021)의 논문 「분자동역학 시뮬레이션을 통한 고분자 전해질 연구」를 분석하여, 분자동역학 시뮬레이션(Molecular Dynamics, MD)을 통해 고분자 전해질 내 이온 이동 메커니즘을 이해하고 그 구조적 특성과 물성의 관계를 탐구하는 것을 목적으로 한다.

## 2. 이론적 배경 - 분자동역학 시뮬레이션과 고분자 전해질의 기본 개념

분자동역학 시뮬레이션(MD)은 원자와 분자의 위치와 속도를 시간에 따라 계산함으로써 물질의 동역학적 거동을 예측하는 방법이다. 이를 통해 실험적으로 관찰하기 어려운 나노 수준의 물리 현상을 분석할 수 있다. 고분자 전해질(Polymer Electrolyte)은 고분자 사슬 내에서 이온이 이동할 수 있는 구조를 가지며, 대표적으로 PEO(폴리에틸렌옥사이드)-LiTFSI 시스템이 있다. 이 시스템에서는 리튬 이온이 고분자의 산소 원자와 결합하여 이동하며, 이온 이동은 고분자의 구조적 움직임과 밀접하게 연결되어 있다.

MD 연구에는 여러 스케일의 모델이 사용된다.

① Kremer–Grest 모델: 고분자를 단순 입자-스프링 형태로 표현하여 엉킴과 사슬 운동을 재현.

② 원자 단위 모델(atomistic): 모든 원자를 개별적으로 표현해 실제 결합과 구조 변화를 세밀하게 모사.

③ 대단위화(coarse-grained) 모델: 여러 원자를 하나의 입자로 단순화해 넓은 시공간을 효율적으로 해석. 각 모델은 정확도와 계산 효율성에서 차이를 가지며, 연구 목적에 따라 선택된다.

## 3. 연구 방법 - 시뮬레이션 모델 비교 및 해석 절차

① 문헌 분석 단계: DBpia에서 분자동역학 및 고분자 전해질 관련 논문을 검색하여, 손창윤(2021)의 총설 논문을 중심으로 주요 개념과 결과를 정리하였다.
② 모델 비교 단계: 논문에 제시된 세 가지 시뮬레이션 모델의 적용 범위와 특징을 표로 정리하였다.
③ 이온 이동 메커니즘 분석: Figure 3~5의 사례를 참고하여, 리튬 이온의 이동 경로(사슬 내부 이동, 호핑, 공동 이동)를 비교 분석하였다.
④ 구조-물성 관계 해석: 고분자의 구조적 변화(사슬 길이, 곁가지, 전하 분포)가 전기전도도에 미치는 영향을 도식화하였다.
⑤ 결론 도출: 모델 간의 차이와 시뮬레이션 결과의 시사점을 요약하고, 신소재공학적 응용 가능성을 정리하였다.

## 4. 분석 결과 - 이온 이동 메커니즘과 구조-물성 관계

PEO-LiTFSI 시스템의 시뮬레이션을 통해 세 가지 주요 이온 이동 메커니즘이 제시되었다:
① Intra-chain 이동: 리튬 이온이 같은 고분자 사슬 내부의 산소 원자들을 따라 이동.
② Inter-segmental 호핑: 인접한 고분자 사슬 간의 이온 점프 이동.
③ Co-diffusion: 고분자 사슬이 움직이며 이온이 함께 이동.
이 세 가지 이동 경로는 온도, 고분자 유연성, 전하 분포 등에 따라 상대적 비중이 달라진다.

또한 대단위화 모델을 이용한 연구에서는 전하 간격, 고분자 사슬의 길이, 이온 클러스터의 형성 정도가 전기전도도에 큰 영향을 미친다는 점이 확인되었다. 이는 고분자 전해질의 화학적 구조를 조절함으로써 전도성을 향상시킬 수 있음을 시사한다.

## 5. 결론 - 탐구 결과 요약 및 시사점

본 탐구를 통해 분자동역학 시뮬레이션이 나노 수준에서 고분자 전해질의 이온 이동 현상을 분석하는 데 매우 유용한 도구임을 확인하였다. 시뮬레이션은 실험적으로 직접 관찰하기 어려운 분자 간 상호작용과 구조 변화를 해석할 수 있으며, 고분자 전해질의 설계 및 전도도 향상에 필요한 기초 정보를 제공한다. 이 연구는 차세대 리튬이온전지와 같은 에너지 소재 개발에 중요한 기여를 할 수 있다.

## 참고문헌

손창윤 (2021). 분자동역학 시뮬레이션을 통한 고분자 전해질 연구. Polymer Science and Technology, 32(3), 234–238. DBpia.

4. 분자동역학을 통한 이산화티타늄(TiO₂)의 압입실험 시뮬레이션

**- 「분자동역학 시뮬레이션으로 구현된 나노 스케일의 압입 시험을 통한 TiO₂ 나노튜브의 물성치」**

저자: 서승준

## 용어설명

**1. 분자동역학 (Molecular Dynamics, MD)**

의미: 원자나 분자의 움직임을 시간에 따라 계산하는 컴퓨터 시뮬레이션 기법.

원리: 각 원자에 작용하는 힘(포텐셜)을 계산해서 뉴턴의 운동방정식으로 위치와 속도를 갱신함.

용도: 실제로 실험하기 어려운 나노 크기 물질의 거동을 모사할 때 사용.

(예: 나노튜브, 단결정, 단백질 접힘 등.)

**2. 압입시험 (Indentation Test)**

의미: 날카로운 압입기(indenter)를 재료 표면에 눌러 넣어, 그 반응(힘, 변형)을 측정하는 실험.

용도: 재료의 경도, 탄성계수, 강도 등을 계산할 수 있음.

나노 압입시험: 원자 수준(나노미터 크기)의 압입기로 물질의 미세한 기계적 성질을 측정.

**3. TiO₂ (이산화 티타늄, Titanium Dioxide)**

구성: 티타늄(Ti)과 산소(O)로 이루어진 화합물.

특징: 매우 단단하고 화학적으로 안정함. 광촉매 작용이 뛰어나 자정유리나 태양전지에 쓰임.

나노튜브 형태로 만들면 가볍고 강한 구조체로 활용 가능.

**4. 나노튜브 (Nanotube)**

의미: 아주 미세한 관(튜브) 모양의 나노 구조체.

크기: 지름이 수 나노미터(1nm = 10⁻⁹m) 수준.

특징: 강도는 강철보다 높고, 전기적·열적 성질이 우수함.

TiO₂ 나노튜브는 세라믹 기반의 나노 구조체로, 내열성과 내식성이 좋음.

**5. 아나테이즈 (Anatase) 상(Phase)**

TiO₂의 결정 구조 중 하나.

TiO₂는 주로 3가지 결정형을 가짐

-아나테이즈(anatase) – 결정이 가볍고 광활성이 높음.

-루틸(rutile) – 안정하고 밀도가 높음.

-브루카이트(brookite) – 드물고 복잡한 구조.

본 연구에서는 아나테이즈 상의 TiO₂ 나노튜브를 시뮬레이션함.

**6. 포텐셜 함수 (Potential Function)**

의미: 원자 간 힘(인력, 반발력)을 수학적으로 표현한 식.

MD 시뮬레이션의 핵심으로, 어떤 포텐셜을 쓰느냐에 따라 결과가 달라짐.

-MEAM 포텐셜 (Modified Embedded Atom Method): 금속 원자들 사이의 결합과 상호작용을 표현하는 포텐셜 함수. 원자의 위치뿐만 아니라 주변 원자들의 밀도까지 고려해서 더 현실적인 금속 거동을 모사함. TiO₂처럼 금속 성분이 포함된 재료에 적합.

-AIREBO 포텐셜 (Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order): 탄소 기반 물질에 사용되는 포텐셜. 결합이 생기거나 끊어지는 화학 반응형 포텐셜로, 다이아몬드, 그래핀, 압입기(다이아몬드 팁) 등에 사용됨.

-Lennard-Jones (LJ) 포텐셜: 두 입자 간의 짧은 거리 반발력 + 긴 거리 인력을 단순하게 표현한 고전 포텐셜.

## 1. 연구 목적

나노 크기의 TiO₂ 나노튜브는 실제 실험으로 물성치를 측정하기 어렵다. 본 연구는 분자동역학(Molecular Dynamics, MD) 시뮬레이션을 활용해 나노 압입 시험을 구현하고, 이를 통해 이산화티타늄(TiO₂) 나노튜브의 강도와 강성 등 물성치를 계산하는 것을 목표로 한다.

## 2. 시뮬레이션 개요

1. 모델 구조: 삼각뿔 형태의 압입기가 TiO₂ 나노튜브 표면을 누르는 형태로 모델링

2. TiO₂ 결정상: 아나테이즈(anatase) 구조, (100)면 기준

3. 포텐셜 함수

-TiO₂ 나노튜브: MEAM 포텐셜

-압입기: AIREBO 포텐셜

-상호작용: Lennard-Jones (12-6 LJ) 포텐셜

4. 시뮬레이션 조건

-앙상블: NPT

-압입 속도: 10 m/s

-침투 깊이: 6 Å (옹스트롬)

## 3. 결과 및 분석

-시뮬레이션을 통해 힘(Force)–거리(Displacement) 곡선을 도출.

-하중(Loading)과 언로딩(Unloading) 과정이 명확히 구분됨.

다음 식을 이용하여 TiO₂ 나노튜브의 강성(Stiffness) 계산:

-계산 결과, TiO₂ 나노튜브의 강성은 약 25 N/m으로 나타남.

이는 TiO₂ 나노튜브가 높은 탄성 복원력을 가지며, 나노 구조체로서 안정적인 기계적 특성을 가짐을 의미함.

## 4. 결론

-분자동역학 시뮬레이션 기반의 나노 압입 시험을 통해 실제 제작이 어려운 TiO₂ 나노튜브의 물성치를 정량적으로 예측할 수 있었다.

-본 연구는 나노스케일 구조체의 물성 측정 방법으로 활용 가능성이 높으며, 향후 나노소재 설계 및 분석 분야에서 중요한 기초 데이터로 활용될 수 있다.

## 참고문헌

-Gheewala et al. (2008), Nanoindentation and nanoscratching of rutile and anatase TiO₂, J. Phys. Condens. Matter, Vol.20.

-Pharr et al. (1992), On the generality of the relationship among contact stiffness, contact area, and elastic modulus during indentation, J. Mater. Res., Vol.7.

-Analysis Material Properties of TiO2 Nanotube through Realized Nano Indentation Test using Molecular Dynamics Simulation

Jung-sik Choi, Seung-jun Lee and Gil-ho Yoon

5. 전구체\_논문기반\_확장\_탐구보고서

**전구체 종류에 따른 환원 효율 및 입자 크기 차이 분석**

저자: 강승모

## Abstract

본 보고서는 신용욱(2020) 박사학위논문 "Experimental and numerical investigation of nickel nano-particle synthesis by plasma-assisted hydrogen reduction using 2.45 GHz microwave plasma"에 실제로 기재된 사실들만을 근거로 하여 작성되었다. 논문에 따르면 NiCl₂, NiCO₃, Ni(OH)₂를 전구체로 하여 기화된 전구체를 2.45 GHz 마이크로파 플라즈마 환경의 H₂/N₂ 혼합가스에 주입함으로써 수소 환원에 의해 니켈 나노입자를 합성하였다. 실험 결과, 직경 100 nm 미만의 구형 고순도 Ni 나노입자가 합성되었고, 동일 주입량 조건에서 NiCO₃ 전구체를 사용했을 때 NiCl₂보다 더 작은 입자가 관찰되었다. 또한 퀜칭 가스가 없을 경우 입자 크기가 증가하고 형태가 불규칙해지는 경향이 보고되었다. 수치해석(ANSYS CFX)을 통해 유동장·온도장·화학종 분포 및 핵생성, 입자 성장, 응집 현상을 모사하였고, 모델 검증을 통해 핵 형성 속도 상수 0.007 m³/(kmol·s) 및 충돌 효율 상수 7.1×10⁻⁶이 도출되었다.

## 1. 연구 배경 및 목적

니켈 나노입자는 전기적·자기적 특성으로 인해 전자재료(예: MLCC 내부전극), 촉매 등 다양한 응용 분야에서 연구되고 있다. 신용욱(2020)은 이러한 응용을 염두에 두고, 마이크로파 플라즈마 보조 수소 환원법으로 니켈 나노입자를 합성하고, 공정 내 물리·화학 거동을 이해하기 위해 실험과 전산유체역학(CFD) 기반 모델링을 결합하였다. 본 보고서는 논문 본문에 기재된 사실만을 근거로 전구체 종류가 합성 결과(입자 크기·형태 등)에 미친 영향을 정리하고, 논문에서 제시한 수치와 관찰 결과를 통합적으로 설명한다.

## 2. 연구 대상 및 사용된 방법(논문 기재 사실)

• 전구체: NiCl₂, NiCO₃, Ni(OH)₂.
• 합성 방법(요약): 기화된 전구체를 2.45 GHz 마이크로파 플라즈마 장치의 H₂/N₂ 혼합가스 흐름에 주입하여 수소 환원을 유도, 생성된 니켈 나노입자를 수집.
• 수치해석: ANSYS CFX를 사용하여 유동, 열, 화학종 전달 방정식과 함께 핵생성(nucleation), 입자 성장(growth), 응집(coagulation) 모델을 포함하여 반응기 내부의 거동을 계산함. 모델 파라미터는 실험 데이터와의 비교를 통해 조정 및 검증됨.

## 3. 논문에서 보고된 주요 관찰 및 수치(사실)

• 합성 결과: 직경 100 nm 미만의 구형 고순도 니켈 나노입자 합성.
• 전구체별 비교: 동일 투입량 조건에서 NiCO₃ 전구체 사용 시 NiCl₂보다 더 작은 입자가 관찰됨.
• 퀜칭 가스 영향: 퀜칭 가스(냉각/불활성 가스)가 없을 경우 입자 크기가 증가하고 입자 형태가 불규칙해지는 경향을 관찰함.
• 모델 검증 수치: 실험과 가장 잘 일치한 매개변수로 핵 형성 속도 상수 = 0.007 m³/(kmol·s), 충돌(응집) 효율 상수 = 7.1×10⁻⁶을 도출.

## 4. 논문이 제시한 모델의 구성요소(요약)

논문은 반응기 내부의 다중 물리현상을 설명하기 위해 유동장(속도분포), 온도장, 화학종 농도분포 및 입자거동(핵생성, 성장, 응집)을 함께 고려하였다. 이러한 요소들을 통합한 전산모델을 통해 입자 크기 분포 예측 및 실험과의 비교를 수행하였다고 본문에 명시되어 있다.

## 5. 추가 규명이 필요한 부분(논문이 남긴 질문들)

논문 자체에서 관찰된 사실들을 바탕으로 다음과 같은 미해결·추가연구 항목이 논문에 의해 시사되었다

• NiCO₃에서 더 작은 입자가 생성된 원인(예: 전구체의 분해 메커니즘, 기화 특성, 환원 반응 경로 등)의 규명 필요.
• 퀜칭 가스의 세부 조건(유량, 냉각 속도 등)에 따른 정량적 영향 분석의 부재.
• 플라즈마 전력, H₂/N₂ 비율 등 주요 공정 변수의 체계적 변화에 따른 전구체별 반응성 매핑의 한계.

## 6. 논문 사실만으로 구성한 해석적 논의

아래 논의는 모두 논문에 기재된 사실만을 이용하여 논리적으로 전개한 것이다. 어떠한 추정이나 외부 자료의 도입 없이 논문 본문에 기재된 관찰과 모델 수치를 연결하여 기술한다.

첫째, NiCO₃ 전구체에서 더 작은 입자가 관찰되었다는 사실과 퀜칭 가스 유무에 따른 입자 크기 변화 관찰은 전구체의 물리·화학적 특성(기화 용이성, 분해 경로 등)과 반응기 내 열·질량 전달 상황이 입자 생성에 영향을 미쳤음을 시사한다. 논문은 이들 요인을 직접적으로 규명하지는 않았으나, 실험적 관찰(전구체별 크기 차이·퀜칭 영향)과 CFD 기반 온도/유동/종 분포 계산을 결합하여 전구체별 및 공정 변수별 거동을 분석할 수 있는 기초를 마련했다고 본문에 기술되어 있다. 둘째, 모델 검증을 통해 도출된 핵 형성 속도 상수와 충돌 효율 상수는 논문에서 제시된 조건하에서 실험 데이터를 재현하는 데 사용된 양적 파라미터이다. 따라서 논문에서 보고한 수치들은 해당 공정 조건에서의 입자 형성 동역학을 기술하는 데 활용되었음을 명확히 할 수 있다.

## 7. 결론

본 보고서는 신용욱(2020) 박사학위논문에 실제로 기재된 사실들만을 근거로 하여 전구체 종류가 플라즈마 보조 수소 환원 공정에서 생성되는 니켈 나노입자에 미친 영향을 정리·확장하였다. 논문은 전구체에 따른 입자 크기 차이(특히 NiCO₃에서 더 작은 입자 관찰), 퀜칭 가스의 영향, 그리고 CFD 기반의 수치모델과 실험 간의 일치성을 보고하였다. 동시에 전구체의 물리·화학적 특성 규명, 퀜칭 세부 조건에 대한 정량적 분석 등은 후속 연구 과제로 남아 있음을 논문이 시사하고 있다.

## 참고문헌

신용욱. (2020). Experimental and numerical investigation of nickel nano-particle synthesis by plasma-assisted hydrogen reduction using 2.45 GHz microwave plasma. 한동대학교 박사학위논문. (RISS 학위논문 상세 페이지에 기재된 본문 사실에 근거하여 작성됨)