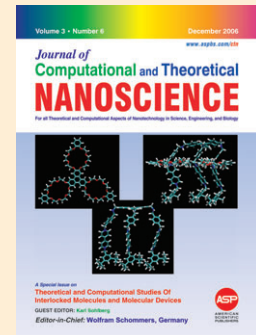


# 계산나노과학의 연구현황

글 \_ 이기호 · 고등과학원 계산과학부 연구원



**계산나노과학**은 대부분 국립연구소나 대학들을 중심으로 이루어지고 있다. 미국의 경우 이러한 개별적인 연구들을 연결시키기 위해 2002년에 발족한 Network for Computational Nanotechnology (NCN, <http://www.ncn.purdue.edu/>)라는 기구가 흥미롭다. 이 기구에서는 미국국립과학재단으로부터 10년간 지원(초기 5년간 받은 지원액은 총 \$ 18,250,000)을 받아 네트워크를 이용한 계산나노과학 연구를 진행한다. 또한 일반인들도 자신들의 자원에 접근하여 전산모사를 할 수 있게 계정을 발급함으로써 계산나노과학에 대한 이해를 쉽게 하는 교육적인 역할도 병행한다. 여기에는 퍼듀대학, 캘리포니아대(버클리), 일리노이대(어바나-샴페인), 노스웨스턴 대학 등에서 공동참여하며 nanoHub (<http://www.nanohub.org/>)라는 네트워크 인터페이스를 통해 누구나 교육을 받고 전산모사를 해볼 수 있도록 한다. 2007년 9월 당시 매월 3000명의 회원이 이용 중이며 연간 220,000개의 전산작업이 실시된 것으로 알려졌다. 독일의 경우 Forschungszentrum Jülich와 Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY가 공동재단으로 설립한 John von Neumann Institute for Computing (NIC)를 통해 슈퍼컴퓨터를 이용한 연구에 지원을 해주고 있는데 생물학, 수학, 나노과학 등이 대상이다. (<http://www.fz-juelich.de/conference/wscn>)

국내에서는 한국과학기술연구원 계산과학센터

내 계산나노과학연구팀(<http://diamond.kist.re.kr/CSC/>)에서 분자동역학 및 제일원리계산 이용하여 탄소동소체, 금속, 산화박막 등에 관한 연구를 하고 있으며, 미국 NCN과 같은 역할을 하기 위해 많은 노력을 기울이고 있다. 한국화학연구원 융합바이오기술연구센터(<http://nbalink.kriect.re.kr/>)에서는 실험과 계산과학을 동시에 수행함으로써 시너지효과를 얻고 있으며, 주로 나노표면의 특성화, 나노센서, 나노-바이오 계면 등에 관한 연구에 주력하고 있다.

다른 과학분야와 마찬가지로 계산나노과학분야에서도 국제적인 심포지엄을 통해 학문적인 교류가 활발히 이루어지고 있다. 2009년 8월 2일에서 7일까지 영국 Galsgow에서 있을 42차 IUPAC congress (<http://www.rsc.org/ConferencesAndEvents/RSCConferences/IUPAC2009/>) 중에 computational nanoscience 심포지엄이 있을 예정이다. Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS, <http://www-lab.imr.edu/~accms/>) 5차 컨퍼런스가 베트남에서 2009년에 열린 예정인데, 자세한 일정은 아직 미정이다. 이 컨퍼런스는 2007년 9월 12일에서 16일까지 서울 한국과학기술연구원에서 개최된 바 있다.

최근의 연구 동향은 그 외에도 Journal of Computational and Theoretical Nanoscience (<http://www.aspbs.com/ctn/>)를 통해 접할 수 있다. [KIAS](#)