

나노카본-고분자 복합재의 거시적 거동에 관한 미시적 고찰

Microscopic Investigation Towards Macroscopic behavior of Nanocarbon-Polymer Composites

1. 서 론

최근 비약적인 발전을 거듭한 나노소재의 제조, 평가, 분석 및 해석 기술은 이제 20여년이 넘는 역사를 뛰어넘어, 소비자들의 다양한 기호를 충족시키고 궁극적으로는 인류의 보다 나은 삶을 가능케 하는 다양한 고부가가치 상품들이 시장에 등장하게 되는 ‘나노의 상품화’를 향해 전력질주를 하고 있다. 특히 이른 바 ‘C-상품’이라는 신 조어를 만들어 낸 탄소관련 소재 산업은 카본블랙 → 탄소섬유 → 탄소나노섬유를 거쳐 이른 바 제 4세대 탄소재료로 꼽히는 플러렌, 탄소나노튜브, 그래핀의 등장과 함께 현대 제조기술에 있어서 단연코 가장 큰 주목을 받고 있는 분야이다. 또한 탄소 소재는 이미 오랜 역사를 통해 경량화와 구조적 안정성이라는 상반된 목표를 동시에 달성할 수 있는 복합재료 분야에서 꾸준히 연구가 되어왔으며, 탄소섬유를 비롯한 다양한 공업용 고분자 소재들 간의 혼화성과 혼합에 따른 유효물성 예측기술 개발, 대량생산을 위한 혁신적인 공정기술 개발은 여전히 매우 활발한 연구개발 투자가 필요한 ‘현재 진행형’ 분야이다.

나노카본 재료들은 앞서 언급한 탄소나노튜브나 그래핀 등을 두루 포함하는 개념이며, 이들 재료는 일반적으로 ~TPa 수준의 높은 강성과 ~100GPa 수준의 극한강도, ~1000W/mK 수준의 열전도성, ~10000S/Cm수준의 전기전도성을 가지기 때문에, 기존의 탄소섬유나 유리섬유 등을 대체하거나 이들 재료의 강화재로서의 성능을 극대화 할 수 있는 보조적 상(auxiliary phase)을 형성시킬 수 있는 나노복합재료의 응용 가능성이 무궁무진하다. 1994년 Ajayan에 의해 탄소나노튜브가 첨가된 고분자 복합재가 최초로 보고된 직후 나노복합재 제조를 위한 연구는 상당한 기대감 속에서 진행되었으나, 제조된 복합재의 물성이 혼합물 법칙이나 Halpin-Tsai 모델로 예측한 결과에는 턱없이 미치지 못하는 실망스러운 결과들이 대부분이었다. 이에 따라 나노복합재의 물성에 영향을 미치는 다양한 인자들에 대한 탐구가 자연스럽게 주목을 받게 되었고, 나노카본의 분산성, 나노카본과 고분자 수지 간 계면(interface)강도의 확보, π - π 적층을 통한 고분자 수지의 자기조립 및 흡착계면(adsorption interphase) 형성, 나노카본의 형상 및 결합 등이 매우 중요한 인자들임이 밝혀졌다. 이러한 인자들은 서로 독립적인 것들이 아니어서, 예를 들어 고분자 수지 내에 첨가된 탄소나노튜브가 효과적으로 분산되지 못하면 자연스럽게 고분자 수지 간 계면의 형성이 저해되고, 이로 인해 충분한 계면 강도의 확보가 어려워진다.

또한 고분자 수지의 흡착현상 역시, 나노카본의 응집으로 인해 나노카본과 고분자 수지 간 물리적 접촉이 제한되는 상황에서는 기대하기 어렵다 할 수 있다. 나노튜브



조 맹 효

서울대학교 기계항공공학부 교수



양 승 화

동아대학교 기계공학과 조교수

나 그래핀이 고분자 수지 내에서 구부러진 형태 역시 나노카본의 결합이 원인이 되기 때문에 재료 계면강도와 분리시켜 접근해서는 안 된다. 여기서 한 가지 알 수 있는 것은, 상기한 여러 인자들은 결국 ‘나노카본-고분자 간 계면결합력’ 문제와 ‘나노크기의 첨가제로 인해 기대할 수 있는 고분자 흡착계면 형성효과’의 문제로 귀결된다는 것이다. 이러한 관점에서 봤을 때, 나노복합재가 우수한 물성을 나타내도록 하는 방법은 결국 나노카본과 고분자가 최대한 넓은 면적에 걸쳐서 매우 강하게 접촉될 수 있도록 혼합하는 것이다.

본 기사에서는 대표적인 나노카본인 탄소나노튜브가 첨가된 고분자 복합재의 거시적 물성을 지배하는 미시적 인자인 계면결합력과 고분자 흡착계면의 상대적인 영향력을 규명하고, 이들 각각이 거시적 거동에 어떠한 영향을 미치는지를 고찰하기 위한 다중스케일적 접근법에 대해 다루고자 한다. 우선 물질간 근원적 접촉특성의 고려를 위해 분자동역학 전산모사를 도입하여 나노복합재의 탄소성 거동을 예측하는 방법을 간략히 소개하고, 계면결합력과 흡착계면의 상대적 영향을 비교하기 위해 강화재와 기지 간 결합강도를 선형스프링으로 근사하는 비선형 미시역학 모델과의 순차적인 브릿징을 시도하는 방법에 대해 설명한다. 특히, 미시역학 모델에서는 2단계 역 해석 기법을 통해 흡착계면의 탄소성 거동을 분자동역학 전산모사와 미시역학 모델로부터 예측한 결과를 제시한다.

2. 분자모델링과 분자동역학 전산모사

분자동역학 전산모사는 원자 간 근원적 포텐셜을 정의하고, 통계역학적인 앙상블과 뉴턴의 운동방정식을 통해 관심의 대상이 되는 시스템의 열역학적 상태량 변화를 시간에 따라서 연속적으로 예측해내는 방법이다. 이 방법은 최근 10여년 동안 나노복합재의 물성예측과 미세구조 설계에 있어 매우 효과적으로 적용되어 왔다(Wei 등, 2004; Yang 등, 2012, 2013). 특히, 미세구조-거시적 물성 간 상관관계 규명과 그에 따른 구성방정식 모델 정립에 있어서 분자동역학 전산모사는 원자들 배열의 손쉬운 가시화 및 고분자 물리에서 사용되는 다양한 구조분석 방법의 제공, 평형분자동역학 전산모사와 Green-Kubo 관계식에 의한 손쉬운 물성예측, 비평형 과정에 대한 준정적 묘사에 대한 이점을 토대로 그 저변이 크게 확대되어 왔다. 본 절에서는 Yang 등(2013)에 의해 제시된 나노복합재 단위셀 구조 형성과 응력-변형률 곡선 도출을 통한 기계적 물성 예측 방법에 대해 간략히 다룬다.

다양한 탄소나노튜브 중에서도 (15,0)의 vector를 가지는 지

그재그 형 나노튜브와 폴리프로필렌을 각각 강화재와 기지재로 사용한 경우 이들의 분자구조는 그림 1에 주어져 있다. 나노튜브의 체적분율은 6.9%, 10.04% 그리고 17.17%인 세 가지 경우를 고려하였다. 폴리프로필렌은 일반적으로 유리전이온도가 상온보다 낮기 때문에 나노튜브 첨가로 인한 강화효과를 보다 잘 관찰하고 흡착계면층의 영향을 보다 명확히 분석하기 위해서 나노복합재의 물성예측은 200K의 온도조건에서 수행하였다.

나노복합재를 비롯한 일반적인 벌크 형 고분자 재료의 분자 모델링 과정은 대부분이 유사한데, 먼저 초기 구조를 형성한 이후에는 공액경사기법(conjugate gradient method)등을 이용하여 전체 포텐셜 에너지를 최소화하는 과정을 거친다. 이후 최종적인 물성예측을 위한 온도 및 압력 조건에서 등온-등압 전산모사를 거쳐 해당 조건에서의 밀도에 이르도록 하는데, 본 연구에서는 Nosé-Hoover의 확장된 해밀토니안 방법을 적용한 등온-등압 전산모사를 3 나노 초 동안 1펨토 초의 시간 스텝으로 수행하였다.

평형상태에 이른 나노복합재의 기계적 거동은 변형률을 정의한 이후 비리얼 이론을 통해 그에 상응하는 응력을 계산하는 방법을 적용하거나, 이와는 반대로 응력텐서의 성분을 사전에 정의하고 이에 따른 셀 길이벡터로부터 응력-변형률 곡선을 연속적으로 얻을 수 있다. 전자의 방법을 이용하여 0.0002/ps의 변형도율로 인장과 전단 테스트를 수행하였으며, 인장/전단 테스트는 나노복합재의 진변형률이 15%에 이를 때까지 수행하였다.

그림 1의 나노복합재 분자모델은 나노튜브가 한 방향으로 정렬되어 있기 때문에 가로등방성을 나타내게 된다. 따라서 각 방향으로의 인장과 각 면에서의 전단테스트 결과를 변형률-시

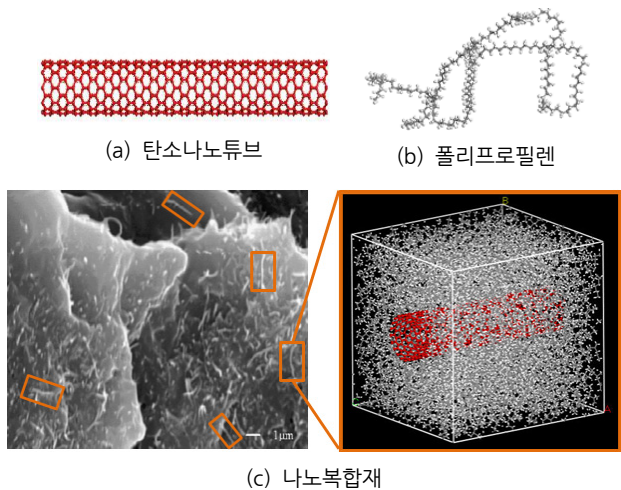


그림 1 분자동역학 전산모사를 위한 분자모델 (Yang 등; 2013)

킨트 계수 관계의 데이터로 변환하여 각각의 변형률에서의 가로등방성 시킨트 강성 행렬을 구성한 후, 이를 방향 평균한 유효등방성 강성행렬로부터 유효등방성 응력-변형률 데이터로 전환할 수 있다. 또한 분자동역학 전산모사에서 도출된 폴리프로필렌의 응력-변형률 선도는 다음과 같이 Ludwik 모델로 근사하여 미시역학 모델에서 사용될 수 있다.

$$\sigma_e = \sigma_y + h(\epsilon^P)^n \quad (1)$$

여기서 항복응력 σ_y 와 강도 계수 h 그리고 경화 지수 n 의 값은 분자동역학 결과를 비선형 최소자승법으로 근사하여 결정한다.

3. 비선형 미시역학 모델

나노복합재의 물성예측에 있어 Eshelby 해에 기반한 미시역학 모델은 분자스케일 해석을 유한요소 해석과 같은 완전한 연속체 스케일 해석기법과 연계하는 방법론으로 매우 효율적으로 적용될 수 있음이 Odegard 등(2005), Yang과 Cho(2008), Yu 등(2009), 양승화 등(2009)에 의해 보고되어 왔다. 또한 Cho(2011) 등과 Shin 등(2013)은 평균 장(mean field) 기반 미시역학 모델에서 농후분포(non-dilute distribution)에 따른 기지 내부 변형률 장의 경험적 가정이 야기할 수 있는 문제로부터 자유로우면서 미세구조상의 여러 불확실 인자들에 의한 산포를 고려할 수 있는 접근법으로, 수학적 균질화 기법과 분자동역학 전산모사기법을 직접 매칭하는 기법을 제안한 바 있다. 이러한 방법들은 모두 나노복합재를 나노입자, 기지, 흡착계면 3개의 상으로 구성된 미세구조로 모델링하는 방법이며, 따라서 어떠한 방법으로도 흡착계면의 물성을 도출해내야만 한다. Yang 등은(2013) 탄소나노튜브가 첨가된 복합재의 거시적 거동에 있어 흡착계면의 거동이 미치는 영향을 예측하기 위한 방법으로 2단계 해석 기법을 제안하였다. 이 방법은 Mori-Tanaka 모델을 시킨트 계수 방법과 장 섭동법과 연계하여 복합재의 비선형 거동으로부터 흡착계면의 비선형 거동을 역으로 도출하는 방법이다.

탄소성 거동을 예측하기 위한 미시역학 모델은 Qui와 Weng(1992)이 제안한 시킨트 계수 방법을 적용하였고, Mori-Tanaka 모델(1973)을 나노복합재의 탄성계수와 시킨트 계수를 계산하는 미시역학 모델로 도입하였다. 또한, 나노튜브와 폴리프로필렌 간의 불완전 결합상태를 고려하기 위해 Qu(1995)에 의해 제시된 변위 불연속 조건을 Mori-Tanaka 모델에 적용한

수정된 Mori-Tanaka 모델을 적용하였다. 수정된 Mori-Tanaka 모델에서 유효 등방성 탄성행렬은 다음과 같이 정의되며,

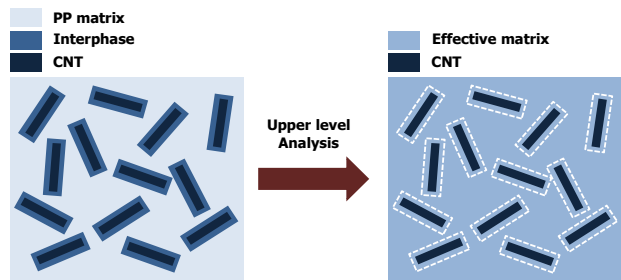
$$\{C\} = (f_m C_m + f_p \{C_p : A_p\}) : (f_m I + f_p \{A_p\} + f_p \{R : C_p : A_p\})^{-1} \quad (2)$$

여기서 f 와 C 는 각각 체적분율과 강성행렬, 하첨자 m 과 p 는 각각 기지와 강화재, A_p 는 강화재의 변형률 집중텐서, 그리고 R 은 불완전계면의 컴플라이언스 행렬로써 재료계면이 완전결합을 하는 경우에는 0이 된다. Hill의 표기법에 따르면(Hill; 1965), 복합재의 팽창계수와 전단계수는 각각 다음과 같이 표현된다.

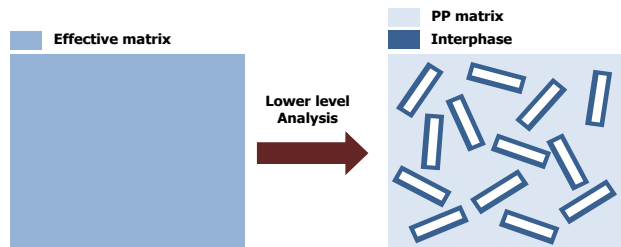
$$\kappa_c = \frac{f_m \kappa_m + f_p \xi^{CA}}{f_m + 3f_p \xi^{CA} + 3f_p \xi^{RCA}}, \quad \mu_c = \frac{f_m \mu_m + f_p \eta^{CA}}{f_m + 3f_p \xi^{CA} + 3f_p \eta^{RCA}} \quad (3)$$

여기서 ξ 와 η 는 강화재와 기지의 탄성계수 및 Eshelby 텐서 성분과 관련된 항들로서 Yang 등에 의해 잘 제시되어있다(Yang 등; 2013). 또한 식 (3)에서 상첨자 RCA가 들어간 항은 재료계면의 결합이 불완전 할 경우에만 정의되며, 완전결합을 할 경우에는 모두 0이 된다.

복합재의 시킨트 탄성계수들로부터 응력-변형률 선도를 도출하기 위해서는 시킨트 탄성계수에 해당하는 응력 값을 계산해야 한다. 이를 위해 본 연구에서는 Hu(1996)에 의해 제안된



(a) 상위 스케일 해석



(b) 하위 스케일 해석

그림 2 흡착계면의 탄소성 거동 예측을 위한 2단계 역해석 기법 개요 (Yang 등; 2013)

장 섭동법(field fluctuation)을 사용하였고, 복합재 내 기지의 von-Mises응력과 복합재의 von-Mises응력 및 정수압 응력과의 관계식은 다음과 같이 정의된다.

$$\bar{\sigma}^c = \left\{ \frac{1}{f_m} \left(3 \left(\frac{\mu_m}{\kappa_c} \right)^2 \frac{\partial \kappa_c}{\partial \mu_m} \bar{\sigma}^{m2} + \left(\frac{\mu_m}{\mu_c} \right)^2 \frac{\partial \mu_c}{\partial \mu_m} \bar{\sigma}^{e2} \right) \right\} \quad (4)$$

여기서 $\bar{\sigma}^m$ 과 $\bar{\sigma}^e$ 는 각각 복합재의 정수압 응력과 von-Mises 응력을 의미한다.

3.1 상위스케일 역 해석 모델

2단계 해석 중 먼저 상위스케일 해석에서는 그림 2(a)에 주어진 것처럼 나노튜브, 흡착계면, 기지로 구성된 3상의 나노복합재 미세 구조를 나노튜브와 유효기지로 구성된 2상의 나노복합재로 등가시킨다. 이 때 유효기지영역은 기지와 흡착계면을 모두 포함하는 영역이다. 따라서 식 (2~4)에서 하첨자 m은 유효기지에, 그리고 하첨자 p는 탄소나노튜브에 해당한다. 또한 식 (2)에서 컴플라이언스 R은 나노튜브와 유효기지가 상호 분리되는 거동과 미끄러지는 거동을 묘사하는 두 개의 컴플라이언스 값으로 구성되어 있다. 이 때 계면 컴플라이언스의 정확한 값을 알 수 없다고 해도, 유한한 몇 가지의 값을 가지도록 가정하면서 그에 따른 유효 기지의 응력-변형률 곡선을 역으로 예측하는 것은 가능하다.

상위스케일 역 해석에서는 분자동역학 전산모사로부터 도출된 응력-변형률 선도가 식 (2~4)를 이용해서 동일한 체적분율 조건에서 도출된 응력-변형률 선도와 같다고 가정한 후 이를 만족할 수 있는 유효기지의 응력-시컨트 계수 곡선을 역으로 도출하고 이로부터 다시 유효기지의 응력-변형률 곡선을 도출한다. 이 때 유효기지의 거동은 나노튜브와 흡착계면 간 불완전 계면결합을 묘사하는 컴플라이언스에 따라 달라지므로, 계면컴플라이언스에 따른 유효기지의 거동의 조합을 도출할 수 있다.

3.2 하위스케일 역 해석 모델

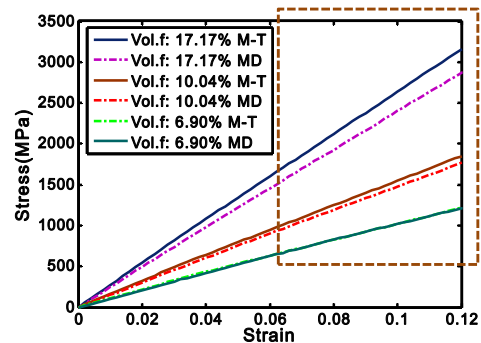
하위스케일 해석에서는 상위스케일에서 얻어진 계면 컴플라이언스-유효기지의 거동 조합으로부터 다시 계면 컴플라이언스-흡착계면의 거동 조합을 역으로 얻어낸다. 상위스케일에서 도입된 유효기지 영역은 흡착계면을 강화재로 그리고 폴리프로필렌을 기지재로 포함하는 하나의 가상의 복합재로 정의가

되었다. 따라서 하위스케일에서는 유효기지의 응력-변형률 관계와 폴리프로필렌의 응력-변형률 관계로부터 흡착 계면의 응력-변형률 관계를 역으로 도출한다. 따라서 식 (2~4)에서 하첨자 m은 순수한 폴리프로필렌에 해당하며 하첨자 p는 흡착계면에 해당된다. 또한 흡착계면과 폴리프로필렌은 동일한 재료로 구성된 도메인 내에서 단지 결정성과 밀도 차이에 의해 물리적으로 구분되어 정의되는 상이므로 서로 완전히 결합되었다고 보는 것이 타당하다. 따라서 하위스케일 해석에서는 식 (3)에 나타난 항 중에서 RCA를 첨자로 가지는 항들은 모두 0이 된다.

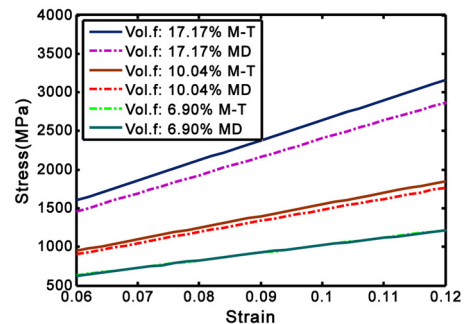
4. 결과 및 고찰

4.1 분자동역학 결과 및 미시적 인자의 상대적 영향

그림 3에는 분자동역학 전산모사로부터 도출된 나노복합재의 등방성 응력-변형률 선도가 도시되어 있으며, 계면의 불완전 결합이나 흡착계면의 영향을 전혀 고려하지 않은 Mori-Tanaka 모델 예측해도 함께 제시하였다. 분자동역학 전산모사에서는 단순히 탄소나노튜브와 폴리프로필렌이라는 서로 다른 두 가지 물질들만 고려를 하였기 때문에, 나노복합재의 응력-



(a) 12%까지의 거동



(b) 6%-12%구간 확대 비교

그림 3 분자동역학 전산모사와 Mori-Tanaka 모델로부터 도출된 나노복합재의 응력-변형률 곡선 변화 비교 (Yang 등; 2013)

변형을 거동에 있어 나노튜브와 고분자 간 계면 결합력이나 흡착계면의 영향이 구체적으로 어떻게 나타나는지는 파악할 수 없다. 그러나 두 인자에 대한 영향을 전혀 고려하지 않은 미시역학 모델 예측해와 분자동역학 전산모사 결과와의 비교를 통해 두 인자의 상대적 영향을 비교할 수 있게 된다.

나노튜브의 체적분율이 17.17%인 경우에는 Mori-Tanaka 예측해가 분자동역학 전산모사 결과보다 높은 응력을 가지는 것으로 나타내며, 이러한 경향은 체적분율이 10.04%인 경우에도 동일하게 관찰되었다. 그러나 두 방법으로부터 예측한 결과의 오차는 체적분율이 작아지는 경우 감소하는 것으로 나타났다. 흥미로운 것은 나노튜브의 체적분율이 6.9%로 더 작아지는 경우에는 오히려 분자동역학 전산모사 결과가 Mori-Tanaka 예측해보다 약간 더 큰 응력값을 가지는 것으로 예측되었다는 것이다. 이 결과는 나노튜브의 체적분율 변화에 따라서 어떠한 두 가지 서로 상반되는 인자가 영향을 미치고 있음을 의미한다.

먼저 그림 3의 결과에서 Mori-Tanaka 예측해는 나노튜브와 폴리프로필렌이 완전한 결합을 한다는 가정 하에서 도출된 결과이다. 따라서 체적분율이 높은 경우 Mori-Tanaka 예측해가 분자동역학 전산모사 결과보다 더 큰 응력을 나타내는 것은 나노튜브와 폴리프로필렌 간 근원적 결합자체가 미시역학에서의 변위 불연속 조건에 상응하는 불완전 결합상태임을 의미한다. 이러한 변위 불연속 조건은 두 모델로부터 도출된 결과에서 나타나는 오차가 나노튜브의 체적분율이 감소함에 따라 점차 작아지는 현상에 대한 설명을 가능하게 한다. 즉, 나노튜브의 체적분율이 감소하는 경우, 나노튜브와 고분자 간 계면(interface)의 상대적 체적분율은 그에 따라서 감소하기 때문에, 계면에서의 불완전 결합에 의한 영향도 상대적으로 감소하게 되어 두 모델 간 예측해의 오차가 줄어들게 된다.

그러나 나노튜브와 폴리프로필렌 간 결합이 불완전하다는 것만으로는 6.9%의 체적분율에서 분자동역학 전산모사 결과가 Mori-Tanaka 모델보다 높은 응력 값을 나타내는 현상에 대한 설명이 불가능하다. 이러한 차이는 흡착계면에 의해 나타나는 것으로 분석이 가능하다. 실제로 그림 1에 도시된 나노복합재 단위셀 구조에서 폴리프로필렌의 밀도분포를 살펴보면 그림 4와 같은데, 여기서 폴리프로필렌 내에 매우 높은 밀도를 가지는 영역이 존재한다. 폴리머의 탄성계수나 항복강도는 일반적으로 밀도에 비례하여 증가하기 때문에, 그림 4에서 높은 밀도를 가지는 영역은 동일한 변형률에서도 보다 높은 응력값을 나타내게 된다.

따라서 그림 3에 제시된 나노복합재의 거시적 거동에 대해 다음과 같은 미시적 고찰을 결론으로 제시할 수 있다.

- 1) 결합과 표면처리가 전혀 없는 순수한 나노튜브와 폴리프로필렌 간의 근원적 결합력은 미시역학에서의 완전결합 상태를 가정할 수 없다.
- 2) 탄소나노튜브가 폴리프로필렌에 첨가되는 경우 폴리프로필렌은 결정성을 가지고 흡착되며, 이 흡착 영역은 복합재의 기계적 거동을 향상시키는 인자로 작용하게 된다.

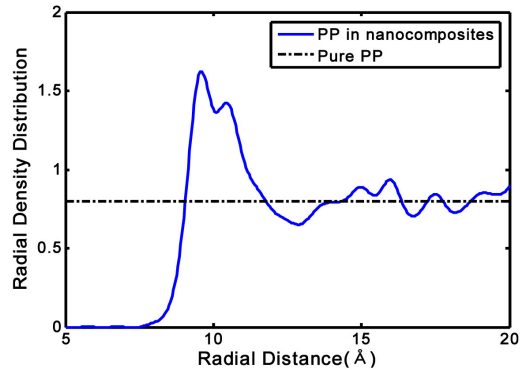
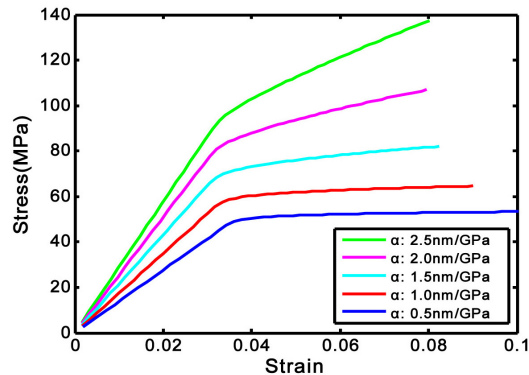
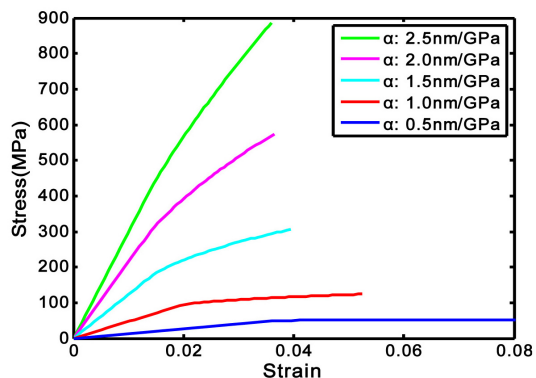


그림 4 탄소나노튜브를 둘러싸는 폴리프로필렌의 밀도분포 (Yang 등; 2013)



(a) 계면 컴플라이언스에 따른 유효 기지의 응력-변형률 곡선



(b) 계면 컴플라이언스에 따른 흡착계면의 응력-변형률 곡선

그림 5 2단계 역해석 기법을 통해 도출된 유효기지와 흡착계면의 응력-변형률 곡선(Yang 등; 2013)

- 3) 나노튜브-폴리프로필렌 간 계면(interface)와 흡착계면(adsorption interphase)는 복합재의 거시적 거동에 있어서 상반된 역할을 하게 되는데,
- 4) 나노튜브의 체적분율이 높은 경우에는 나노튜브와 고분자 간 불완전 결합특성이 지배적인 반면,
- 5) 나노튜브의 체적분율이 낮은 경우에는 흡착영역에 의한 물성향상 효과가 더욱 지배적으로 나타난다.

4.2 유효기지 및 흡착계면의 거동 예측 결과

탄소나노튜브와 폴리프로필렌 간 계면 컴플라이언스 값에 따른 유효기지와 흡착계면의 응력-변형률 선도는 그림 5에 주어져 있다. 먼저 유효기지의 거동은 유효 기지의 분리정도를 나타내는 컴플라이언스의 값을 높게 가정할수록 유효기지의 응력 값도 점차 증가하게 된다. 유효기지는 흡착계면을 포함하는 것으로 가정하였기 때문에, 실제로 유효기지가 순수한 폴리프로필렌보다 높은 강성을 가지는 것으로 예측되는 것은 타당하다고 볼 수 있다.

그림 5(a)에 제시한 유효기지의 거동에 해당하는 흡착계면의 응력 변형률 곡선은 그림 5(b)에 주어져 있으며, 계면 컴플라이언스에 따라서 약 1GPa 에 근접한 응력값을 나타낼 수도 있는 것으로 예측되었다. 현재로서는 계면 컴플라이언스의 값이 정확하게 주어진 상태가 아니므로 그림 5(b)에서 어떠한 결과가 실제에 가까우지는 알 수 없으며, 또한 흡착계면의 물성은 고분자 수지의 종류나 고분자 수지와 강화재 간 결합력에 의해서도 좌우될 수 있다. 이에 대해서는 흡착 영역을 대표할 수 있는 분자모델의 고려가 필요하겠으나, 흡착 영역은 높은 밀도를 가질 뿐만 아니라 결정성 또한 가지고 있기 때문에 분자모델 자체가 쉽지 않다. 따라서 본 연구에서 소개한 역 해석 방법은 흡착계면의 거동을 가늠하고 이러한 미시적 인자가 복합재의 거시적 거동에 미치는 영향을 가늠하는데 있어 매우 효율적인 방법이라고 볼 수 있다.


5. 향후 과제

이미 나노복합재의 탄성거동이나 열팽창, 열전도 등과 같이 비교적 접근이 쉬운 문제들에 대해서는 본 기사에서 소개한 ‘멀티스케일 해석’ 기법의 개발과 적용을 통해 어느 정도 이론이 확립되었다고 보여 진다. 그 간의 연구는 주로 ‘크기 효과’ 등에 의해 나타나는 물성의 예측에 오히려 더 초점이 맞춰졌다고 볼 수 있다. 그러나 우수한 물성을 나타내는 나노복합재

의 제조를 위해서 뛰어난 성능을 나타낼 수 있는 강화재의 첨가 뿐만 아니라 효과적인 하중전달이 가능한 계면의 설계 또한 매우 중요하다. 그래핀이나 탄소나노튜브와 같은 나노카본은 매우 뛰어난 물성을 가지고 있기 때문에 다기능성 복합재의 강화재로 이용되기에는 매우 매력적인 재료들이라 할 수 있으나, 정작 이들 재료와 일반적인 공업용 고분자 재료 간 계면특성은 좋지 못하다. 특히 공명구조를 가진 탄소동소체와 여러 종류의 고분자 간 상호작용 특성에 대한 정보는 여전히 얻기가 매우 힘든 상황이며, 탄소나노튜브와 같이 유한한 곡면을 가지는 경우에 대한 고찰, 계면의 분리와 미끄러짐 현상의 상대적 영향에 대한 정성적인 비교, 계면에서의 에너지 소산에 따른 복합재의 인성변화 등에 대해 여전히 많은 연구가 뒤따를 필요가 있다. 또한 이종재료 간 계면에서의 혼합모드 파괴 현상에 대한 전산해석이나 원자적 수준의 전산모사를 손상역학 모델과 연계하는 방법은, 그 방법론 자체적으로도 향후 복합재료 파괴역학 분야의 이론 확립에 있어 매우 중요한 가치가 있는 연구라 할 수 있다.

6. 참고문헌

1. Ajayan, P.M., Stephano, O., Colliex, C., Trauth, D. (1994) Aligned Carbon Nanotube Arrays Formed by Cutting a Polymer Resin-Nanotube Composites, *Science*, 265, pp. 1212-1214.
2. Wei, C.Y., Srivastava, D., Cho, K.(2004) Structural Ordering in Nanotube Polymer Composites, *Nano Letters*, 4, pp. 1949-1952.
3. Yang, S., Yu, S., Kyoung, W., Han, D.S., Cho, M. (2012) Multiscale Modeling of Size-dependent Elastic Properties of Carbon Nanotube/polymer nanocomposites with Interfacial Imperfections, *Polymer*, 53, pp. 623-633.
4. Odegard, G.M., Clancy, T.C., Gates, T.S.(2005) Modeling of the Mechanical Properties of Nano particle/ Polymer Composites, *Polymer*, 46. pp. 553-562.
5. Yang, S., Cho. (2008) Scale Bridging Method to Characterize Mechanical Properties of Nanoparticle/ Polymer nanocomposites, *Applied Physics Letters*, 93, 043111
6. Yu, S., Yang, S., Cho. (2009) Multiscale Modeling of Cross-linked Epoxy Nanocomposites, *Polymer*, 50, 945-952
7. 양승화, 유수영, 조맹효. (2009) 나노입자의 크기효과와 체적분율 효과를 동시 고려한 나노복합재의 멀티스케일

- 브리징 해석기법에 관한 연구, 한국전산구조공학회 논문집, 22(4), pp. 343-348.
8. Cho, M., S, Yang., S, Chang., Yu, S.(2011) A study on the prediction of mechanical properties of nanoparticulate composites using the homogenization method with the effective interface concept, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 85, 1564-1583.
 9. Shin, H., Yang, S., Chang, S., Yu, S., Cho, M.(2013) Multiscale homogenization modeling for thermal transport properties of polymer nanocomposites with Kapitza thermal resistance, *Polymer*, 54, 1543-1554.
 10. Qui, Y.P., Weng, G.J. (1992) Theory of Plasticity for Porous Materials and Particle-reinforced Composites, *Journal of Applied Mechanics*, 59, pp. 261-268.
 11. Mori, T., Tanaka, K. (1973) Average Stress in Matrix and Average Elastic Energy of Materials with Misfitting Inclusions, *Acta Metallurgica*, 21, pp. 571-574.
 12. Qu, J. (1993) Eshelby Tensor for Elastic Inclusion with Slightly Weakened Interface, *Journal of Applied Mechanics*, 60, pp. 1048-1050.
 13. Hill, R. (1965) Continuum Micro-mechanics of Elastoplastic Polycrystals, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 13, pp. 89-101.
 14. Hu, G.K. (1996) A method of Plasticity for General Aligned Spheroidal Void or Fiber-reinforced Composites, *International Journal of Plasticity*, 12, 439-449. 

[섭외: 양승화 편집위원]