

# 나노입자 크기를 고려한 나노복합체의 역학적 특성 예측을 위한 마이크로/나노 해석 모델

## Micro/nano analysis model for prediction of mechanical properties of the nanocomposite considering nano-particle size

김 봉 래\* · 양 범 주\*\* · 이 행 기\*\*\*

Kim, Bong-Rae · Yang, Beom-Joo · Lee, Haeng-Ki

### 요 약

일반적으로 나노입자의 크기는 나노복합체의 역학적 특성에 상당한 영향을 미친다. 이에 본 연구에서는 나노입자 크기를 고려한 나노복합체 재료 구성모델 (Kim et al., 2011)을 소개하고자 한다. Kim et al. (2011)에 의해서 나노입자 크기효과를 위한 Size-dependent Eshelby tensor가 미세역학 모델에 적용되었으며, 나노스케일 해석과 함께 다양한 수치해석을 수행하였다. 특히, 본 연구에서는 이를 활용하여 SiO<sub>2</sub>/Epoxy 나노복합체의 역학적 특성을 예측해 보았다.

**keywords** : 나노복합체, 나노입자 크기효과, 역학적 특성, 마이크로/나노 해석 모델, 수치해석

### 1. 서 론

나노복합체 (Nanocomposites)는 0.1-100nm로 이루어진 나노입자로 이루어진 복합체로서 그 잠재적 응용가능성이 매우 높아 이를 활용한 연구가 다양하게 진행되고 있다 (여민규 등, 2008). 특히 나노기술과 고분자 공학이 결합되어 탄생한 고분자 나노복합체는 나노 사이즈의 입자, 튜브 등을 고분자수지에 분산시켜 제조한 것으로, 이러한 복합체는 적은 함량의 충전제로도 높은 비표면적과 입자 간 거리의 극소화로 인해 전체적인 재료의 물성을 효율적으로 향상시킬 수 있다 (Cho et al., 2006; 변준형, 2007). 일반적으로 복합체 내의 강화입자 크기가 나노스케일로 줄어들게 되면, 비표면적의 증가로 인해 전체 복합체의 역학적 거동에 영향을 미치게 되며 이는 기존의 해석방법만으로는 예측하기가 어렵다 (Cho et al., 2006; Chen et al., 2007). 이에 나노복합체의 공학적 특성을 정확하고 신뢰성 있게 표현할 수 있는 재료 구성 모델 개발이 선행될 필요가 있다.

이에 본 연구에서는 나노입자 크기를 고려한 나노복합체의 역학적 특성 예측을 위한 마이크로/나노 해석 모델 (Kim et al., 2011)을 소개하고자 한다. 특히, Kim et al. (2011)에서는 나노복합체의 해석 모델을 위해 Size-dependent Eshelby tensor를 적용한 미세역학 모델을 제안하였으며, 나노스케일 해석과 함께 다양한 수치해석을 수행하였다. 본 연구에서는 이를 활용하여 SiO<sub>2</sub>/Epoxy 나노복합체에 대한 역학적 특성을 위한 수치해석을 수행하였다.

\* 한국과학기술원 건설 및 환경공학과 박사 후 과정 bong-ida@kaist.ac.kr

\*\* 한국과학기술원 건설 및 환경공학과 석사과정 bumjoo@kaist.ac.kr

\*\*\* 정희원 · 한국과학기술원 건설 및 환경공학과 교수 leeh@kaist.ac.kr

## 2. 나노복합체의 특성 예측을 위한 구성 모델

본 연구에서 나노복합체 재료 구성모델을 위해 Size-dependent Eshelby tensor를 적용하였으며, 이를 Ensemble-volume average method (Ju and Chen, 1994)에 근간으로 한 마이크로 역학 모델에 적용하였다. 나노복합체는 매트릭스(matrix, phase 0)와 매트릭스 내 랜덤하게 분포되어 있는 나노입자(nanoparticle, phase 1)로 구성되어 있으며, 이러한 나노복합체의 유효 탄성 모델은 다음과 같이 나타낼 수 있다 (cf. Ju and Chen, 1994).

$$\mathbf{C}^* = \mathbf{C}_0 \cdot [\mathbf{I} + \phi_1 (\mathbf{S} + \mathbf{A}_1)^{-1} \cdot \{\mathbf{I} - \phi_1 \mathbf{S} \cdot (\mathbf{S} + \mathbf{A}_1)^{-1}\}^{-1}] \quad (1)$$

여기서,  $\mathbf{C}_0$ 는 매트릭스의 탄성계수,  $\mathbf{I}$ 는 4차 단위텐서,  $\mathbf{A}_1 = [\mathbf{C}_1 - \mathbf{C}_0]^{-1} \cdot \mathbf{C}_0$ 이며,  $\phi_1$ 는 나노입자의 체적비를 나타낸다. 특히,  $\mathbf{S}$ 는 기존의 Eshelby tensor와는 차별되는 Size-dependent Eshelby tensor로 표현된다. Size-dependent Eshelby tensor에 관한 내용은 Duan et al. (2005)에 나타나 있으면, 이는 Kim et al. (2011)에 의해 volume-averaged Eshelby tensor로 표현되었다. 최종적인 나노복합체의 유효 구성 모델은 Kim et al. (2011)에 자세히 나타나 있다.

## 3. 마이크로/나노 기반 수치해석

본 연구에서는 제안된 나노복합체 재료 구성모델을 활용하여, SiO<sub>2</sub>/Epoxy 나노복합체의 역학적 특성을 예측해 보았다. 본 수치해석을 위해서 SiO<sub>2</sub> 및 Epoxy에 대한 물성값은 나노해석을 통해 결정하였다. 본 나노해석에서는 분자동역학(Molecular Dynamic) 시뮬레이션이 수행되었으며, 이는 물체의 내부에너지에 의해 변화하는 분자들 간의 상호작용(Intermolecular interaction)을 통해 재료특성을 도출해 내는 방법으로 나노 크기의 재료 특성을 파악하는 연구에 적합한 것으로 알려져 있다 (여민규, 장용훈, 2008). SiO<sub>2</sub>의 경우 밀도함수이론(Density Function Theory)기반의 CASTEP모듈을 사용하였으며, Epoxy의 경우 cross-linked된 고분자 사슬 형태(Yu et al., 2009)를 이용하여 Amorphous cell 모듈을 통해 수행하였다. 그림 1은 SiO<sub>2</sub> 및 Epoxy의 나노해석 모델링을 나타내고 있다.

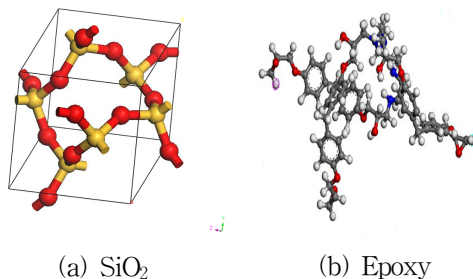


그림 1 SiO<sub>2</sub> 및 Epoxy의 나노해석 모델링

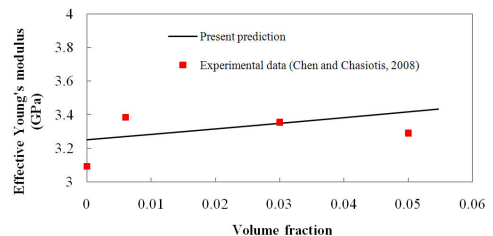


그림 2 수치해석 결과와 실험값과의 비교

본 나노해석을 통해 도출된 재료의 물성치를 제안된 나노복합체 재료 구성모델에 적용하여 다양한 수치해

석을 수행하였다. 특히 다양한 체적비에 따른 탄성계수 측정 실험결과 (Chen et al., 2008)와 본 연구에서 제안한 나노복합체 모델해석과의 비교수행 결과 적절한 예측 값을 보여주었으며, 이를 통해 본 모델의 타당성을 검증할 수 있었다.

#### 4. 결론

본 연구에서는 나노입자 강화 복합재료의 미세역학 기반 모델이 소개되었다. 나노입자 크기가 재료에 미치는 영향을 고려하기 위해 Size-dependent Eshelby tensor가 미세역학 기반의 나노복합재료 구성모델 (Kim et al., 2011)에 적용되었다. 나노스케일 해석을 위한 다양한 수치해석을 수행하였고, 제안된 모델의 타당성을 검증하기 위해 실험값 (Chen et al., 2008)과 비교 수행하였다. 향후 본 연구에서는 보다 다양한 나노 복합체와의 비교연구를 통해 모델을 검증하는 해석을 수행할 계획이다.

#### 감사의 글

본 연구는 국토해양부 건설기술혁신연구개발사업의 연구비 지원(08기술혁신D01)에 의해 수행되었습니다.

#### 참고문헌

- 변준형 (2007) 기능성 복합재료에 대한 연구동향 조사, KOSEN.
- 여민규, 장용훈 (2008) 분자 동역학 시뮬레이션을 이용한 나노 층의 미끄러짐 시스템에 대한 연구, *대한기계학회 CAE 및 응용역학부문 춘계학술대회 논문집*, pp. 1-6
- Cho, J., Joshi, M.S., and Sun, C.T. (2006), "Effect of inclusion size on mechanical properties of polymeric composites with micro and nano particles," *Composites Science and Technology*, 66, pp. 1941-1952.
- Chen, T., Dvorak, G.J., and Yu, C.C. (2007), "Size-dependent elastic properties of unidirectional nano-composites with interface stresses," *Acta Mechanica*, 188, pp. 39-54.
- Chen, Q., Chasiotis, I., Chen, C., and Roy, A. (2008), "Nanoscale and effective mechanical behavior and fracture of silica nanocomposites", *Composites Science and Technology*, 68, pp.3137-3144
- Duan, H.L., Wang, J., Huang, Z.P., and Kalihaloo, B.L. (2005), "Eshelby formalism for nano-inhomogeneities," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 461, pp. 3335-3353.
- Ju, J.W. and Chen, T.M. (1994), "Micromechanics and effective moduli of elastic composites containing randomly dispersed ellipsoidal inhomogeneities," *Acta Mechanica*, 103, pp. 103-121.
- Kim, B.R., Pyo, S.H., Lemaire, G., Lee, H.K. (2011), "Multiscale approach to predict the effective elastic behavior of nanoparticle-reinforced polymer composites," *Interaction and Multiscale Mechanics, An International*, submitted for publication.
- Yu, S., Yang, S., and Cho, M. (2009) "Multi-scale modeling of cross-linked epoxy nanocomposites," *Polymer*, 50, pp. 945-952