

# 나노입자의 크기효과와 체적분율 효과를 동시 고려한 나노복합재의 멀티스케일 브리징 해석기법에 관한 연구

## A Study on the Development of Multiscale Bridging Method Considering the Particle Size and Concentration Effect of Nanocomposites

양 승 화\*      유 수 영\*      조 맹 효†  
Yang, Seunghwa      Yu, Suyoung      Cho, Maenghyo  
(논문접수일 : 2009년 6월 5일 ; 심사종료일 : 2009년 7월 15일)

### 요 지

본 연구에서는 분자동역학 전산모사와 미시역학 모델을 이용하여 나노입자의 체적분율이 높은 경우 나노 입자의 크기효과와 체적분율 효과가 나노복합재의 기계적 물성에 미치는 영향을 효과적으로 묘사할 수 있는 순차적 브리징 해석기법을 제안하였다. 체적분율이 12%로 고정된 상태에서 나노입자의 크기변화에 따른 영률과 전단계수를 분자동역학 전산모사를 통해 예측한 후, 이를 연속체 모델에서 구현하기 위해 다중입자모델을 적용하였다. 나노입자의 크기효과를 반영하기 위해 입자와 기지 사이에 유효계면을 추가적인 상으로 도입하였고, 12%의 체적분율 조건에서 나타날 수 있는 체적분율 효과는 나노복합재를 둘러싸는 가상의 영역인 무한영역의 물성값의 변화를 통해 조절되도록 하였다. 유효계면과 무한영역의 물성을 입자의 반경에 대한 함수로 근사한 후 다양한 입자의 크기에서 나타나는 나노복합재의 물성변화의 예측이 가능하도록 하였다. 제안된 브리징 해석기법의 적용을 통해 분자동역학 해석결과와 잘 일치하는 결과를 연속체 모델에서 효율적이고 정확하게 얻을 수 있었다. 또한 유효계면의 두께와 물성 변화가 나노복합재의 기계적 물성에 미치는 영향을 고찰하였다.

**핵심용어** : 나노복합재, 멀티스케일, 분자동역학, 크기효과, 유효계면

### Abstract

In this study, an efficient sequential bridging method to characterize both the particle size effect and concentration effect on the mechanical properties of nanocomposites at high volume fraction is suggested through a molecular dynamics(MD) simulations and micromechanics of composites materials. The Young's modulus and the shear modulus of the nanocomposites at various particle radius and at 12% volume fraction were obtained from MD simulations and multi-inclusion model was adopted to describe both modulus in continuum model. In order to describe the particle size effect, an additional phase, effective interface, was adopted as characteristic phase and the non-dilute concentration effect which appears at 12% volume fraction was describe via the variation of the elastic modulus of the infinite medium. Both the elastic modulus of the interface and infinite medium were fitted into functions of particle radius for the applicability of the present bridging method at various particle radii. Using the present bridging method the elastic modulus of the nanocomposites was efficiently obtained with accuracy. In addition, the effect of the interface thickness and modulus on the elastic modulus of the nanocomposite was investigated.

**Keywords** : *nanocomposites, multiscale, molecular dynamics, size effect, effective interface*

### 1. 서 론

최근 수 나노미터에서 수십 나노미터의 크기를 가진 미세 구조물의 제조기술이 비약적으로 발전함에 따라 이러한 크기

를 가진 미세재료를 고분자 기지 내에 강화재로 첨가한 나노 복합재에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다(Edelstein and Cammarta, 2006). 고분자 기지내에 분산된 강화입자의 크기가 수 나노미터 수준으로 감소하게 될 경우, 입자의 표면

† 책임저자, 종신회원 · 서울대학교 기계항공공학부 교수  
Tel: 02-880-1693 ; Fax: 02-886-1693  
E-mail: mhcho@snu.ac.kr

\* 서울대학교 기계항공공학부 박사과정

• 이 논문에 대한 토론을 2009년 10월 31일까지 본 학회에 보내주시면 2009년 12월호에 그 결과를 게재하겠습니다.

적 대 체적비가 크게 증가하게 되고, 이로 인해 미량의 나노입자를 첨가하는 것만으로도 순수한 폴리머 기지의 강성과 강도를 높일 수 있다. 또한 기계적 물성 뿐만 아니라 열팽창 특성(Goyal 등, 2008) 등도 향상시킬 수 있기 때문에, 나노입자를 첨가한 복합재는 다기능성 재료로 활용될 잠재적 가치가 매우 높다.

실험적으로는 알루미늄 강화입자의 크기가 수 나노미터에서부터 수십 마이크로 미터에 이르는 경우에 대해 기계적 물성이 변화하는 것을 관찰한 결과, 입자의 크기가 나노미터 영역인 경우 강화입자의 크기가 작아질수록 강화효과가 커지는 것이 보고되었다(Cho 등, 2006). 또한 실리카 나노입자를 폴리실록세인(polysiloxane) 기지에 첨가한 경우에서도 나노입자의 크기가 작을수록 기계적 물성이 증가함이 확인되었다(Douce 등, 2004). 이러한 실험적 접근법 이외에도, 크기가 다른 실리카 나노입자를 폴리이미드 기지에 첨가한 경우(Yang 등, 2008; Tsai 등, 2008), 알루미늄 입자를 에폭시 기지에 첨가한 경우(Yu 등, 2009)에 대한 분자동역학 전산해석을 통해, 나노입자의 크기가 감소할 경우 동일한 체적분율 조건 하에서도 보다 향상된 강화효과가 나타남이 보고되었다.

나노복합재의 크기효과를 묘사하기 위해서는 주로 분자동역학 전산모사와 같은 원자수준에서의 해석기법이 사용되어 왔으나, 분자동역학 해석기법은 과도한 연산시간을 필요로 한다는 단점으로 인해 반복적인 계산이나 나노복합재의 설계 문제에 직접적으로 적용될 수 없다는 단점을 가지고 있다. 이에 따라 나노입자의 크기효과가 기계적 물성에 미치는 영향을 분자동역학 해석을 통해 예측한 후, 이를 미시역학 모델에 전달하는 순차적 브리징 해석기법이 제안되었다(Yang 등, 2008; Yu 등, 2009). 이러한 브리징 해석기법은 나노입자의 체적분율이 5% 수준의 매우 낮은 경우에 대한 데이터를 고려하였기 때문에, 브리징 해석에 적용된 모델이 높은 체적분율에서 나타날 수 있는 입자간 상호작용을 묘사하는데

있어서 한계점을 가지고 있다. 특히 나노입자의 크기효과를 묘사하기 위해 입자와 기지간에 유효계면(effective interface)을 도입할 경우, 입자와 계면의 체적분율을 모두 고려해야 하므로 희박분포 조건(dilute concentration condition)을 적용할 수 없게 된다.

따라서 본 연구에서는 높은 체적분율을 가진 나노복합재의 기계적 물성을 예측하기 위한 순차적 브리징 모델을 제안하였다. 나노입자의 체적분율이 고정되고 입자의 크기가 서로 다른 5개의 경우에 대해 영률과 전단계수를 분자동역학 전산모사(그림 1a)를 통해 예측하였고, 이를 연속체 모델에서 묘사하기 위해 다중입자 모델(multi inclusion model)을 적용하였다. 기존의 연구에서와 마찬가지로 입자의 크기효과를 고려하기 위해 유효계면(그림 1b)을 추가적인 상으로 도입하였고, 나노입자의 체적분율 효과를 묘사하기 위해 나노복합재를 둘러싸는 무한영역의 물성을 상수값이 아닌 입자의 크기에 따라 변화하는 형태로 가정하였다. 또한 유효계면의 물성을 미시역학 브리징 모델과 분자동역학 해석결과로부터 계산하였고, 유효계면의 두께와 물성변화에 따른 나노복합재의 강화효과를 고찰하였다.

## 2. 분자동역학 전산모사

본 연구에서는 구형의 실리카 나노입자와 폴리이미드(polyimide)를 각각 강화재와 기지재로 고려하였으며, 하나의 폴리이미드 사슬은 10개의 이미드 단량체로 구성되어 있다. 높은 체적분율을 하에서 나타나는 나노입자의 크기효과를 예측하기 위해 입자의 체적분율이 12%로 고정된 상태에서 입자의 반경이 9.97Å에서부터 12.56Å까지 변화하는 5개의 단위 셀 구조를 고려하였다. 나노복합재 단위셀의 조성 관련 정보는 표 1에 정리하였다. 분자모델링과 앙상블 전산모사는 분자동역학 해석 상용 프로그램인 Accelrys사의 Material Studio 4.2®(Accelrys Inc.) 프로그램을 사용하였으며, COMPASS 포스필드를 사용하였다.

나노복합재 초기 셀 구조는 비정질 폴리이미드 기지의 정중앙에 실리카 입자가 위치하도록 하였고, 나노복합재 분자구조의 에너지가 최소화 되도록 하기 위해 conjugate gradient

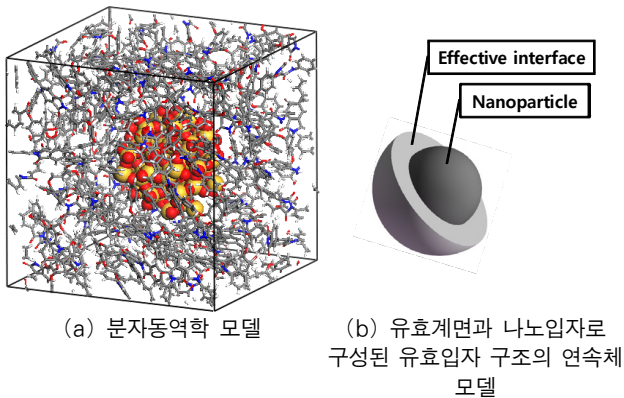


그림 1 나노복합재 구조

표 1 나노복합재의 조성

입자반경(Å)	체적분율	셀 크기(Å)	사슬개수
9.97	0.12	32.64	4
10.74	0.12	35.16	5
11.41	0.12	37.36	6
12.01	0.12	39.32	7
12.56	0.12	41.04	8

표 2 분자동역학 해석 결과

입자반경 (Å)	E(GPa)	G(GPa)	체적분율
9.97	4.66	1.74	0.12
10.74	4.20	1.54	0.12
11.41	3.99	1.45	0.12
12.01	3.81	1.38	0.12
12.56	3.60	1.30	0.12
Mori-Tanaka	3.21	1.17	0.12

방법으로 단위 셀(unit cell)의 포텐셜 에너지가 최소값이 될 때까지 원자들의 위치를 변화시켜가며 안정화 시켰다. 이후 나노복합재 내부 원자들이 충분한 운동에너지를 가지도록 600K 과 1기압 조건하에서 100피코 초(pico second)동안 등온과 등압 조건을 묘사할 수 있는 NPT(isothermal isobaric) (Andersen 1980; Berendsen 등, 1984) 앙상블 전산모사를 수행하였으며, 최종적으로 상온과 대기압에서의 평형상태를 얻기 위해 300K과 1기압 조건하에서 NPT 앙상블 전산모사를 900 피코 초 동안 수행하였다.

나노복합재의 영률과 전단계수는 Parrinello-Rahman의 섭동법(fluctuation method)(Parrinello and Rahman, 1982)을 적용하여 계산 하였으며, 600 피코 초 동안 수행된 NoT(constant stress) 앙상블 전산모사 과정에서 마지막 100피코 초 동안 저장된 10000개의 변형률 섭동값들을 이용하여 계산하였다. 분자동역학 전산모사를 통해 도출된 영률과 전단계수의 통계적 정확성을 위해 5번의 반복된 계산을 수행 하였으며, 이를 통해 도출된 값들의 평균값을 나노복합재의 영률과 전단계수로 결정하였다.

분자동역학 전산모사를 통해 계산된 나노복합재의 영률과 전단계수 값들은 표 2에 도시되어 있으며, 동일한 체적분율 조건 하에서도 나노입자의 크기가 작은 경우 영률과 전단계수가 훨씬 높아짐을 알 수 있다. 특히 분자동역학 해석결과를 Mori-Tanaka 예측모델(Benveniste, 1987)로 계산한 결과와 비교할 때 분자동역학 해석결과가 훨씬 크게 계산된 것을 알 수 있으며, 입자의 크기가 증가할수록 영률과 전단계수가 점근적으로 감소하기 때문에 입자의 크기가 어느 정도 이상으로 증가할 경우 나노복합재의 물성이 Mori-Tanaka 예측해와 비슷한 값으로 수렴하는 것을 예상할 수 있다.

3. 순차적 브리징 해석 기법

물성이 다른 둘 이상의 상(phase)으로 구성된 복합재의 유효물성을 예측하기 위해서는 일반적으로 고유변형률(eigenstrain)의 개념을 도입한 미시역학 모델이 널리 사용되어 왔다(이행기 등, 2008). 본 연구에서는 분자동역학 전산

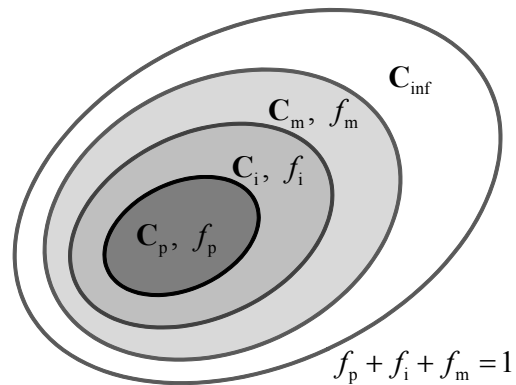


그림 2 입자, 계면, 기지로 구성된 다중입자 모델

표 3 입자크기에 따른 매개변수 계산결과

입자 반경 (Å)	9.97	10.74	11.41	12.01	12.56
D	1.45	1.31	1.24	1.19	1.12

모사를 통해 도출된 나노복합재의 영률과 전단계수를 연속체 모델에서 구현하기 위해서 다중입자 모델(multi inclusion model; Hori 등, 1993)을 고려하였다. 다중입자 모델은 여러 겹의 층으로 구성된 다중입자가 임의의 물성을 가진 가상의 무한영역(infinite medium)내에 심겨진 형태를 가정하며, 본 연구에서는 그림 2에서와 같이 다중입자를 입자, 계면, 기지로 구성된 3상의 구조로 가정하였다. Mori-Tanaka 모델과 같은 일반적인 미시역학 모델의 경우, 입자와 입자간의 상호작용이 복합재의 물성에 미치는 영향을 복합재의 유효강성행렬을 계산하는 식의 유도과정에서 적절한 가정을 통해 묘사하기 때문에 입자의 크기변화에 따라 달라질 수 있는 나노복합재의 체적분율 효과를 묘사하는 데는 한계가 있다. 그러나 다중입자 모델의 경우 입자의 체적분율 효과를 무한영역의 물성을 통해 묘사하게 되고, 무한영역의 물성은 기지 재료의 물성과 강화입자의 물성을 각각 하한값과 상한값으로 하여 임의로 설정될 수 있기 때문에 높은 체적분율에서 나타날 수 있는 체적분율의 영향을 효과적으로 묘사할 수 있다.

다중입자모델을 적용한 나노복합재의 유효강성행렬은 다음과 같이 주어진다(Hori 등, 1993).

$$C = C_{inf} \left[ I + (S - I) \left( \sum_{r=1}^N f_r \Phi_r \right) \right] \left[ I + S \left( \sum_{r=1}^N f_r \Phi_r \right) \right]^{-1} \quad (1)$$

여기서,  $C_{inf}$ 는 무한영역의 강성행렬이며,  $I$ 는 단위행렬 그리고  $S$ 는 Eshelby tensor(Eshelby, 1950)를 나타내며, 하첨자  $r$ 은 각각 입자( $p$ ), 계면( $i$ ), 기지( $m$ )를 나타낸다.  $f_r$ 은  $r$ 번째 상(phase)의 체적분율을 나타내며, 4차텐서인  $\Phi_r$ 는 다음과 같이 정의된다.

표 4 유효계면의 두께와 기계적 물성 계산 결과

입자반경 (Å)	E(GPa)	G(GPa)	계면두께 (Å)
9.97	4.34	1.64	6.60
10.74	3.89	1.41	6.58
11.41	3.70	1.31	6.56
12.01	3.47	1.22	6.51
12.56	3.14	1.11	6.86

$$\Phi_r = \left[ (C_{inf} - C_r)^{-1} C_{inf} - S \right]^{-1} \quad (2)$$

여기서,  $C_r$ 은  $r$ 번째 상의 강성행렬이다.

나노입자의 체적분율 효과를 묘사하기 위해서는 무한영역의 강성행렬  $C_{inf}$ 가 결정되어야 한다. 일반적으로 강화입자의 체적분율이 낮을 경우  $C_{inf}$ 를 기지의 강성행렬과 같은 값을 가지는 것으로 가정할 수 있으나, 본 연구에서는  $C_{inf}$ 를 다음과 같은 형태로 가정하였다.

$$C_{inf} = DC_{MD} \quad (3)$$

여기서,  $D$ 는 입자의 체적분율 효과를 묘사하는 매개변수이며,  $C_{MD}$ 는 분자동역학 전산모사를 통해 계산된 나노복합체의 강성행렬이다. 매개변수  $D$ 의 값은 분자동역학 전산모사를 통해 구해진 영률과 나노입자의 크기효과가 없는 경우의 Mori-Tanaka 예측해와의 비로 계산 하였다.

5개의 분자동역학 전산모사 결과로부터 5개의  $D$ 값을 계산할 수 있으며 이는 표 2에 주어지 있다. 나노입자의 크기가 증가하여 나노입자의 크기효과가 소멸되는 경우에는 입자의 체적분율 효과도 없어지게 되므로, 무한영역의 강성은 입자의 크기가 증가함에 따라 나노복합체의 강성행렬값과 동일한 형태로 수렴하는 즉, 매개변수  $D$ 의 값이 1로 수렴하는 형태로 근사할 수 있다. 따라서 매개변수  $D$ 를 최소자승법을 이용하여 입자의 반경에 대한 함수인  $D=1+56.64\exp(-0.48r_p)$ 의 형태로 근사하여 다양한 입자의 크기에서 적용될 수 있도록 하였다.

유효계면의 체적분율을 계산하기 위해 유효계면의 두께를 기지를 구성하는 고분자 구조의 밀도분포로부터 계산하였으며, 자세한 방법론은 참고문헌(Yang 등, 2008)을 통해 확인할 수 있다. 유효계면의 두께값은 표 4에 주어지 있으며, 입자의 크기변화와 무관하게 7Å에 가까운 값을 가지고 있으므로 7Å으로 고정하였다.

유효계면의 두께를 통해 체적분율을 계산한 이후 유효계면의 물성은 식 (1)과 (2)를 유효계면의 강성에 대한 식으로 정리한 다음의 식으로부터 계산될 수 있다.

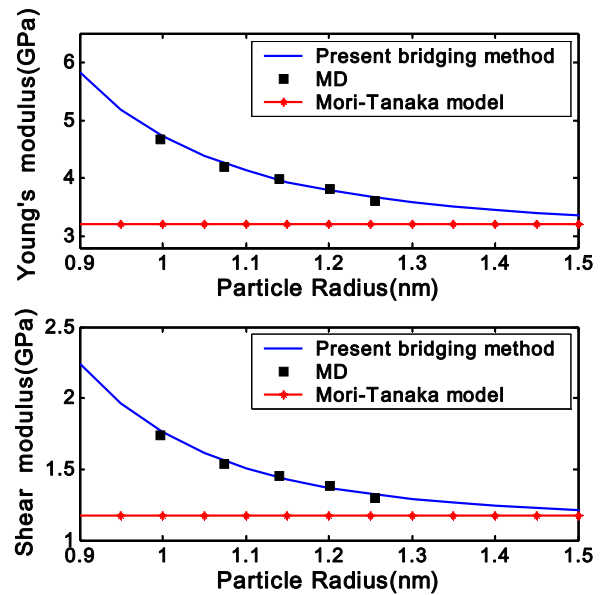


그림 3 브리징 해석모델을 이용한 나노복합체의 물성 해석결과

$$C_i = C_{inf} \left[ I - (f_p B^{-1} (C_{inf}^{-1} C S - S + I) + S) \right] \quad (3)$$

$$B = I + (S - I)(f_p \Phi_p + f_m \Phi_m) - C_{inf}^{-1} C (I + S(f_p \Phi_p + f_m \Phi_m)) \quad (4)$$

유효계면이 등방성이라는 가정하에 영률과 전단계수를 계산하였으며, 입자의 크기에 따른 유효계면의 영률과 전단계수는 표 4에 주어지 있다. 매개변수  $D$ 와 마찬가지로 유효계면의 영률과 전단계수를 입자의 반경에 대한 함수로 표현하였으며, 각각  $E_f = 2.44 + 70.2\exp(-0.358r_p)$ 와  $G_f = 0.88 + 60.05\exp(-0.437r_p)$ 로 근사하였다. 브리징 해석을 통해 근사된 매개변수  $D$ 값과 유효계면의 물성을 식 (1)에 대입하여 나노복합체의 영률과 전단계수를 계산하였다. 이 때 무한영역의 물성이 식 (3)에서와 같이 정의되었기 때문에, 무한영역과 유효계면의 물성을 근사한 이후 나노복합체의 물성을 브리징 모델을 통해 계산하는 과정은 Self-consistent 모델에서와 마찬가지로 수치적 계산을 수행해야 한다. 제안된 브리징 해석기법을 통해 계산된 나노복합체의 영률과 전단계수를 분자동역학 해석결과와 함께 그림 3에 도시하였으며, 나노입자의 크기효과가 기계적 물성에 미치는 영향을 잘 반영하고 있음을 확인할 수 있다. 반면 Mori-Tanaka 모델의 경우 입자의 체적분율만을 고려하기 때문에, 입자의 체적분율이 고정된 상태에서는 입자의 크기가 변화하는 경우라고 해도 동일한 예측해를 제공하게 되어 나노입자의 크기효과를 정확히 묘사하지 못하는 결과를 나타내었다.

유효계면의 두께변화에 따라 나타나는 유효계면의 물성변

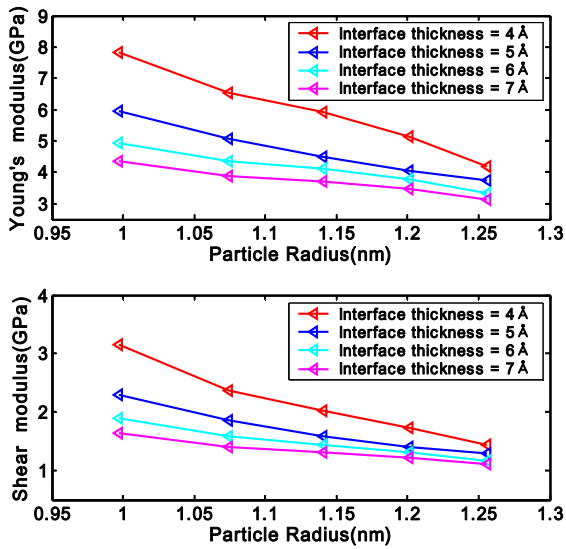


그림 4 유효계면의 두께변화에 따른 유효계면의 물성 변화

표 5 유효계면의 두께에 따른 나노복합재의 영률(단위 : GPa)

입자반경 (Å)	계면두께 (Å)			
	4	5	6	7
9.97	4.74	4.70	4.73	4.74
10.74	4.24	4.21	4.24	4.25
11.41	3.96	3.94	3.96	3.96
12.01	3.78	3.76	3.78	3.78
12.56	3.67	3.65	3.66	3.66

화와 이에 따른 나노복합재의 물성 변화를 보다 자세히 관찰하기 위해 유효계면의 두께를 4Å에서부터 7Å까지 변화시켜가며 유효계면의 영률과 전단계수를 계산하였다. 계면 두께 변화에 따른 계면의 영률과 전단계수 값은 그림 4에 도시하였으며, 유효계면의 두께가 작아지는 경우, 유효계면의 영률과 전단계수가 점차 증가하게 됨을 알 수 있다. 이는 유효계면의 두께에 따라 유효계면이 되는 상을 체적분율이 높고 강성이 낮은 영역, 또는 체적분율이 낮고 강성이 높은 영역으로 묘사할 수 있음을 의미한다. 그러나 유효계면의 물성이 나노복합재의 물성을 계산하는 식으로부터 계산되었기 때문에, 표 5에 도시된 바와 같이 계면의 두께와 물성의 조합은 나노복합재의 물성에는 영향을 미치지 않게 된다.

나노복합재를 구성하는 입자와 기지의 물성은 입자의 체적분율과는 무관하게 고정되어 있는 값이 된다. 따라서 나노복합재의 물성을 결정하는데 있어 가장 중요한 부분은 유효계면의 두께와 강성이라 할 수 있다. 유효계면의 두께와 물성의 영향을 보다 자세히 고찰하기 위해 입자의 크기가 20Å인 경우에 대해 유효계면의 두께와 물성을 다양하게 변화시켜 보았다. 유효계면의 물성을 기지의 물성에서부터 선형으로 변화시킨 경우(그림 5), 나노복합재의 물성은 초기에는 급격

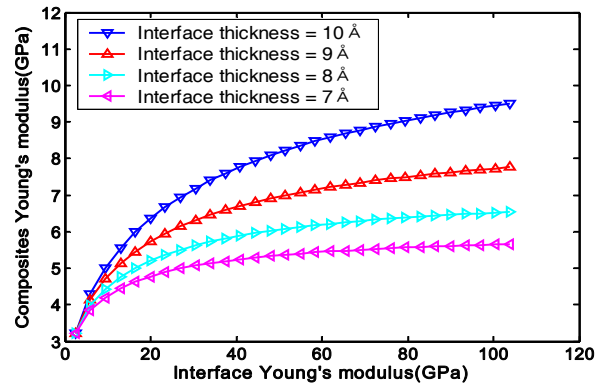


그림 5 유효계면의 물성변화에 따른 나노복합재의 영률 변화

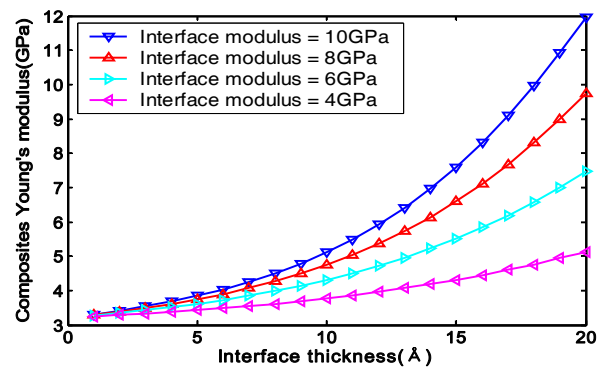


그림 6 유효계면의 두께변화에 따른 나노복합재의 물성 변화

한 증가를 보이지만 이후 증가폭이 점차 감소하는 결과를 보였으며, 이러한 경향성은 계면의 두께가 달라지는 경우에도 그대로 나타난다. 이와는 반대로 유효계면의 두께가 변화하는 경우(그림 6), 나노복합재의 물성은 유효계면의 두께가 증가함에 따라 점차 급격한 증가를 보이게 된다. 특히 유효계면의 물성이 큰 경우 복합재의 물성변화율이 더 커지는 결과를 보였다. 이로부터 나노복합재의 물성은 유효계면의 물성보다는 체적분율 변화에 보다 민감하게 변화하는 것을 알 수 있다. 위 결과들로부터 나노입자의 크기와 모양을 적절히 조절하거나 나노입자의 표면처리 등을 통해 나노입자 주위에 지지재료 사슬들이 보다 두껍고 높은 밀도로 분포할 수 있도록 하는 미세구조를 설계할 경우 보다 향상된 강화효과를 얻을 수 있음을 예측할 수 있다.

### 3. 결 론

본 연구에서는 높은 체적분율을 가진 나노복합재에서 나노입자의 크기 변화가 기계적 물성에 미치는 영향을 분자동역학 전산모사를 통해 예측하였고, 이를 반영할 수 있는 순차적 브리징 해석기법을 제안하였다. 나노복합재의 영률과 전단계수는 동일한 체적분율 조건에서도 나노입자의 크기가 작

아질수록 증가하는 결과를 보였고, 이를 미시역학 모델에서 묘사하기 위해 다중입자모델을 적용하였다. 분자동역학 전산 모사로부터 유효계면과 무한영역의 물성을 입자의 크기에 대한 함수로 근사하는 브리징 방법론을 적용하여 나노복합재의 물성을 미시역학모델에서 예측한 결과, 분자동역학 해석결과와 잘 일치하는 결과를 얻을 수 있었다. 제안된 브리징 해석 기법은 유한요소해석과 균질화 해석기법을 통한 나노복합재 설계기법을 적용하는데 있어 유용한 연속체 모델링 기법으로 적용될 수 있을 것으로 기대된다. 또한 유효계면의 두께와 물성변화에 따른 강화효과를 고찰하였고, 유효계면이 보다 두껍고 높은 강성을 가지게 될 경우 높은 강화효과를 얻을 수 있음을 확인하였다.

### 감사의 글

본 연구는 과학기술부에서 주관하는 국가지정연구실 사업 (ROA-2008-000-20109-0)의 연구비 지원을 받아 수행되었습니다.

### 참 고 문 헌

**이행기, 표석훈, 김형기** (2008) 계면손상과 미세균열을 고려한 입자강화 복합재료의 미세역학 단성구성모델, 한국전산구조공학회논문집, 21(1), pp.51~58.

**Accelrys Inc**, San Diego, www.accelrys.com.

**Andersen. H** (1980) Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature, *J. Chem. Phys.*, 72(4), pp.2384~2393.

**Benveniste. Y** (1987) A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composites materials, *Mech. Mater.*, 6, pp.147~157.

**Berendsen. H.J.C, Postma, J.P.M, Van Gusteren. W.F, DiNola. A, Haak. J.R** (1984) Molecular dynamics with coupling to an external bath, *J. Chem. Phys.*, 81, pp.3684~3690.

**Cho. J, Josh. M.S, Sun. C.T** (2006) Effect of inclusion size on mechanical properties of polymeric composites with micro and nanoparticles, *Compos. Sci. Technol.*, 66(13), pp.1941~1952.

**Douce. J, Boilot. J.P, Biteau. J, Scodellaro. L, Jimenz. A** (2004) Effect of filler size and surface condition of nano-sized silica particles in polysiloxane coatings, *Thin Solid Films*, 466, pp.114~122.

**Edelstein. A.S, Cammarta. R.C** (2006) *Nanomaterials: Synthesis, properties and applications*, Bristol : Institute of Physics Publishing.

**Eshelby. J.D** (1957) The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems, *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A*, 241, pp.241~398.

**Goyal. R.K, Tiwari. A.N, Mulik.U.P, Negi. Y.S** (2008) Thermal expansion behavior of high performance PEEK matrix composites, *J. Phys. D:Appl. Phys.*, 41, 085403.

**Hori. M, Nemat-Nasser. S** (1993) Double inclusion model and overall moduli of multi-phase composites, *Mech. Mater.*, 14, pp.189~206.

**Parrinello. M, Rahman. A** (1982) Strain fluctuations and elastic constants, *J. Chem. Phys.*, 76, pp.2662~2666.

**Tsai. J.L, Tzeng. S.H** (2008) Characterizing mechanical properties of particulate nanocomposites using micromechanical approach, *J. Coms. Mat'l*, 42, pp.2345~2361.

**Yang. S, Cho. M** (2008) Scale bridging method to characterize mechanical properties of nanoparticle/polymer nanocomposites, *Appl. Phys. Lett.*, 93, 043111.

**Yu. S, Yang. S, Cho. M** (2009) Multi-scale modeling of cross-linked epoxy nanocomposites, *Polymer*, 50, pp.945~952.