Composites Research

Vol. 30, No. 4, 247-253 (2017)
DOI: http://dx.doi.org/10.7234/composres.2017.30.4.247
ISSN 2288-2103(Print), ISSN 2288-2111(Online)

Paper

분자동역학 전산모사와 미시역학 모델을 이용한 질화붕소 나노튜브/고분자 복합재의 역학적 물성 및 계면특성 예측

최서연* · 양승화*†

Molecular Dynamics and Micromechanics Study on Mechanical Behavior and Interfacial Properties of BNNT/Polymer Nanocomposites

Seoyeon Choi*, Seunghwa Yang*†

ABSTRACT: In this study, the mechanical behavior and interface properties of boron nitride nanotube-poly(methyl methacrylate) nanocomposites are predicted using the molecular dynamics simulations and the double inclusion model. After modeling nanocomposite unit cell embedding single-walled nanotube and polymer, the stiffness matrix is determined from uniaxial tension and shear tests. Through the orientation average of the transversely isotropic stiffness matrix, the effective isotropic elastic constants of randomly dispersed microstructure of nanocomposites. Compared with the double inclusion model solution with a perfect interfacial condition, it is found that the interface between boron nitride nanotube and polymer matrix is weak in nature. To characterize the interphase surrounding the nanotube, the two step domain decomposition method incorporating a linear spring model at the interface is adopted. As a result, various combinations of the interfacial compliance and the interphase elastic constants are successfully determined from an inverse analysis.

초 록: 본 연구에서는 분자동역학 전산모사와 이중 입자 모델을 이용하여 질화붕소 나노튜브-폴리메틸메타크릴레이트 나노복합재의 기계적 물성과 계면특성을 규명하였다. 단일 벽 나노튜브가 고분자 기지에 함침된 가로등방성 나노복합재 단위 셀 구조를 모델링한 후, 각 방향으로의 일축인장 및 전단 전산모사를 통해 나노복합재의 강성행렬을 예측하였다. 또한 강성행렬의 방향 평균을 취해 나노튜브가 기지 내에 랜덤 분포하는 경우의 등방성 탄성계수를 도출하였다. 분자동역학 해석 결과를 계면의 완전 결합을 가정한 이중 입자 모델 예측해와 비교한 결과, 질화붕소 나노튜브와 고분자 기지간의 계면이 불완전한 것으로 확인되었다. 나노튜브 주위에 형성되는 흡착계면의 물성을 예측하기 위해 2단계 영역 분할 기법을 도입하였고 계면의 불완전 결합을 선형 스프링으로 묘사하였다. 그 결과 다양한 스프링 컴플라이언스 값에 따른 흡착계면의 물성을 역 해석을 통해 확인할 수 있었다.

Key Words: 질화붕소 나노튜브(Boron nitride nanotube), 나노복합재(Nanocomposites), 분자동역학 전산모사(Molecular dynamics simulation), 이중 입자 모델(Double inclusion model)

Received29 June 2017, received in revised form 23 August 2017, accepted 31 August 2017

*School of Energy Systems Engineering, Mechanical Engineering Division, Chung-Ang University
*†School of Energy Systems Engineering, Mechanical Engineering Division, Chung-Ang University, Corresponding author (E-mail: fafala@cau.ac.kr)

1. 서 론

1995년 실험적으로 처음 발견된 질화붕소 나노튜브[1]는 원자 배열 구조적으로는 탄소 나노튜브와 매우 유사하지만 탄소 대신 육방정 구조를 가진 질소와 붕소 원자들로 구성되어 있다. 탄소 나노튜브와는 달리 반도체적인 특성만을 가지고 있으며, 영률은 탄소 나노튜브에 근접한 수준이고 열전도도 또한 매우 높다[2]. 뿐만 아니라 질화붕소 나노튜브는 약 1000 K의 온도까지 안정성이 유지되기 때문에[3], 약 700 K까지 안정성이 유지되는 탄소 나노튜브에 비해 우수한 열적 안정성을 지닌다. 또한, 중성자 차폐기능[4]을 가지고 있기 때문에 원자력 및 항공 우주 산업에서 고온 경량 구조재로 활용될 잠재성이 매우 높다. 그러나 질화붕소 나노튜브의 생산 단가가 매우 높기 때문에, 대량 생산을 위한 합성 방법의 확보와 고순도의 품질을 얻기 위한 핵심 기술의 개발은 여전히 난제로 남아 있다.

현재까지 질화붕소 나노튜브 자체의 물성과 관련한 연구는 실험적 연구뿐만 아니라 분자스케일 전산모사를 이용한 연구들이 꾸준히 진행되어 왔기 때문에 많은 연구 결과가 보고되었다. 탄소 나노튜브의 탄소 원자들을 질소와 붕소로 치환하여 예측한 결과에 따르면 질화붕소 나노튜브의 영률은 탄소 나노튜브의 97% 수준이다[5]. 또한 탄소 나노튜브와 마찬가지로 질화붕소 나노튜브의 물성 역시 나노튜브의 직경에 따라 달라진다[2,6].

질화붕소 나노튜브는 매우 큰 세장비를 가지면서도 직경이 수십 나노미터 미만인 튜브 구조이기 때문에 구조용 재료나 차폐용 재료로 적용될 경우 필연적으로 고분자나 금속기지 내에 첨가된 복합재의 형태로 쓰인다. 따라서 질화붕소 나노튜브와 고분자 수지 간 계면특성에 관한 이해와 더불어 복합재로 제조되었을 경우의 물성을 이론적으로 예측하는 연구가 반드시 필요하다. 그러나 현재까지의 연구들은 질화붕소 나노튜브와 고분자 간 상호작용 특성에 대한 분자동역학 전산모사 수준의 연구에 그치고 있다. 또한 고순도의 질화붕소 나노튜브 생산의 어려움을 비롯하여 분산성 문제, 생산과정에서 육방정 질화붕소의 분리, 나노튜브 형상의 유지 등 이상적인 나노복합재 제조의 걸림돌이 되는 인자들이 다양하게 존재한다. 따라서 나노복합재의 기초물성 및 강화효과와 관련된 실험적 연구에는 많은 제약이 따른다. 그러므로 분자동역학 전산모사와 미시역학 모델에 기반한 연구를 통해 상기한 인자들의 영향을 배제할 수 있는 이론적 물성 예측 기법의 개발과 적용이 필요하다[7].

본 연구에서는 분자동역학 전산모사를 이용하여 질화붕소 나노튜브가 강화재로 첨가된 고분자 나노복합재의 기계적 물성 강화 효과를 예측하였다. 나노튜브가 곧은 형태로 잘 분산된 가로등방성 분자모델로부터 탄성계수를 예측하였고, 이를 미시역학 모델과 비교하여 계면특성을 평가하였다. 또한 멀티스케일 역해석 기법을 이용하여 질화붕소 나노튜브를 둘러싸는 고분자 수지가 형성하는 흡착계면(Adsorption interphase)의 물성을 결정하였다.

2. 분자동역학 전산모사

2.1 분자모델링

본 연구에서는 (10,0) 카이랄성의 질화붕소 나노튜브와 폴리메틸메타크릴레이트로 구성된 가로등방성 나노복합재 단위 셀을 고려하였다(Fig. 1). 질화붕소 나노튜브의 체적분율은 3.7%로 고정하였고, 가장 이상적인 조건에서의 물성 예측을 위해 나노튜브에는 어떠한 결함도 존재하지 않는 것으로 구성하였다. 질소와 붕소원자의 부분전하는 전하 평형 방법(Charge equilibrium method, QEq)[8]으로 계산하였으며, 각각 0.42, -0.42 쿨롱이다. 나노튜브의 외경은 유효벽두께 3.4 Å을 포함하여 11.343 Å이다.

고분자 기지인 폴리메틸메타크릴레이트는 비정질 구조를 가지며, 10개의 단량체가 중합된 사슬 56개가 나노복합재 단위 셀을 구성하고 있다. 질화붕소 나노튜브는 고분자 기지 내 중앙에 위치하며, 나노튜브의 양단은 개방되도록 하였다. 또한 나노복합재 단위 셀의 모든 방향으로 주기경계조건을 부여하였고, 이에 따라 나노튜브는 무한히 긴 형태를 가진다. 나노복합재 단위 셀 구조는 X, Y, Z 각 방향으로 42.6 Å × 46 Å × 46 Å의 크기를 가지도록 하였다. 또한 질화붕소 나노튜브와 고분자 기지 사이의 결합은 오직 반데

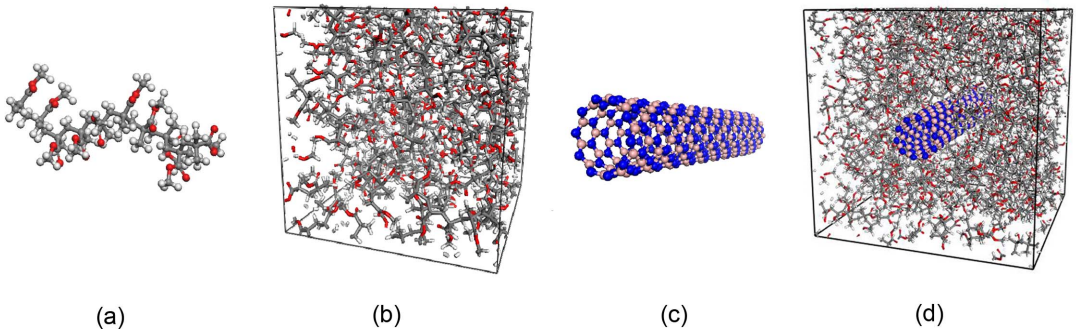

Fig. 1. Molecular models of : (a) PMMA chain (b) PMMA unit cell (c) BNNT (d) BNNT-PMMA nanocomposites unit cell

르발스 상호작용과 정전기적 힘에만 영향을 받는 것으로 가정하였다.

나노복합재의 강화 효과를 비교하기 위해 고분자 기지인 폴리메틸메타크릴레이트로만 구성된 단위 셀과 질화붕소 나노튜브만 존재하는 단위 셀을 각각 모델링하였다. 폴리메틸메타크릴레이트는 나노복합재에 적용된 고분자 사슬과 동일한 것으로 구성하였고 총 20개의 사슬로 비정질 단위 셀을 형성하였다. 질화붕소 나노튜브의 경우 나노복합재에 적용된 나노튜브와 동일한 크기와 구조를 가지는 단위 셀로 모델링하였다. 모든 단위 셀의 모델링은 Accelrys 社의 Material Studio 5.5를 사용하여 진행하였다.

2.2 전산모사 과정

가로등방성 나노복합재가 구성된 이후 conjugate gradient 방법을 이용하여 전체 포텐셜 에너지를 최소화하였다. 300 K의 온도, 대기압(1 atm) 조건에서의 기계적 거동을 관찰하기 위해 Nosé-Hoover 방법에 따른 등온-등압 앙상블[9,10]을 3 나노초 동안 진행하였다. 이때 각 방향으로의 압력 조절을 위한 정압기는 비등방으로 적용되도록 하였다.

300 K의 온도 조건에서 안정화된 모든 나노복합재 셀들에 대해 각 방향(X, Y, Z)으로의 일축인장과 각 평면(XY, YZ, ZX)에서의 전단 테스트를 수행하였다. 이때 진변형도율은 0.0001/psec로 설정하여 셀이 1 피코초 당 0.0001의 진 변형률을 가지도록 변형을 부과하였다. 일축인장의 경우 하중과 직교하는 방향으로는 대기압 조건을 적용하여 포아송 효과가 발생하도록 하였다. 매 2000 스텝 마다 변형을 부여한 이후 이에 따른 비리얼 응력(Virial stress)을 계산하여 응력-변형률 선도를 도출하였다. 결과의 신뢰성을 높이기 위해 각각의 인장과 전단 테스트는 3회 반복하였으며, 가로등방성 셀의 특징을 고려하여 동일한 거동을 보이는 방향에서의 응력-변형률 선도를 평균하였다. 순수한 폴리메틸메타크릴레이트 기지에 대해서도 동일한 방법으로 응력-변형률 선도를 도출하였다. 폴리메틸메타크릴레이트는 등방성이기 때문에 3번의 인장시험 결과와 전단시험 결과에서 얻어진 각각의 평균적인 응력-변형률 선도로부터 등방성 영률과 전단계수를 결정하였다. 등온 등압 평형화 과정과 인장 및 전단 전산모사는 상용 프로그램인 LAMMPS를 사용하였다.

질화붕소 나노튜브의 물성은 기존의 나노튜브 관련 연구에서와 마찬가지로 가로등방성을 가정하였으며, 나노튜브의 등가 연속체 모델은 속이 채워진 실린더 형태로 간주하였다. 질화붕소 나노튜브의 탄성계수는 변형에너지 밀도-탄성계수 관계식을 이용하였으며, 분자역학(Molecular mechanics, MM) 계산을 이용하였다. 나노튜브의 길이방향 인장, 길이방향 전단, 면내 전단, 면내 팽창 변형을 부과하였으며, 이에 따른 나노튜브의 형상변화와 포텐셜 에너지 변화로부터 총 5개의 서로 다른 독립적인 탄성계수를 도출하였다. 보다 자세한 방법론은 참고문헌 [11]을 통해 확인할 수 있다.

3. 미시역학 모델

3.1 이중 입자 모델(Double inclusion model)

본 연구에서는 질화붕소 나노튜브 첨가에 따른 나노복합재의 유효 물성과 나노튜브-기지 간 계면 특성 파악을 위한 미시역학 모델로 이중 입자 모델을 제시한다[12]. 이중 입자 모델에서는 강화재와 기지로 구성된 영역 R이 임의의 물성을 가진 무한 영역 B로 둘러싸여 있는 미세 구조를 고려한다(Fig. 2). 무한 영역 B는 체적분율을 가지지 않는 가상의 상으로써 복합재 내부에서의 입자-입자 상호작용과 입자-기지 상호작용 효과에 따른 기지 내부 변형율 섭동(Fluctuation)을 묘사하기 위해 도입된다. 무한 영역의 강성은 기지의 강성 값과 강화재의 강성 값을 각각 하한 값과 상한 값으로 가질 수 있으며, 각각의 경우에 해당하는 복합재의 물성은 Hashin-Shtrikman bounds의 하한 값과 상한 값에 정확히 일치한다[13]. 일반적으로 강화재가 낮은 체적분율을 가지는 경우에는 무한 영역의 물성을 기지의 물성에 가깝게 설정하며, 높은 체적분율의 경우에는 강화재의 물성에 가깝게 설정한다. 본 연구에서는 질화붕소 나노튜브의 체적분율이 3.7%이므로, 이에 따라 무한 영역의 강성을 폴리메틸메타크릴레이트의 강성행렬과 동일한 것으로 설정하였다.

강화재와 기지 간 결합이 완전 결합일 경우 복합재의 강성행렬은 다음과 같이 정의되며,

$$\mathbf{C}=\mathbf{C}_{\text{inf}}:\left[\mathbf{I}+\left(\mathbf{S}-\mathbf{I}\right):\left(f_{\text{f}}\mathbf{\Phi}_{\text{f}}+f_{\text{m}}\mathbf{\Phi}_{\text{m}}\right)\right]:\left[\mathbf{I}+\mathbf{S}:\left(f_{\text{f}}\mathbf{\Phi}_{\text{f}}+f_{\text{m}}\mathbf{\Phi}_{\text{m}}\right)\right]^{-1} \quad (1)$$

여기서 **C**는 강성행렬, **I**는 등방행렬, **S**는 Eshelby 텐서이다. 또한 하 첨자 inf, f, m은 각각 무한 영역, 나노튜브, 기지 영역을 의미한다. 4차 텐서인 $\mathbf{\Phi}_{\text{f}}$와 $\mathbf{\Phi}_{\text{m}}$는 각각 강화재와 기지의 고유 변형율 집중 텐서이다. 강화재와 기지 간 결합이 불완전한 경우 복합재의 강성 행렬은 다음과 같으며,

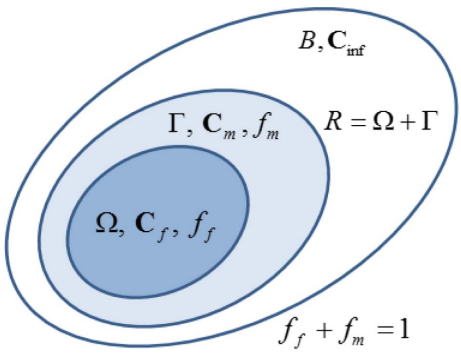

Fig. 2. Microstructure of the double inclusion model

$$\mathbf{C}=\mathbf{C}_{\text{inf}}:\left[\mathbf{I}+\left(\mathbf{S}-\mathbf{I}\right):\left(f_{\text{f}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{f}}+f_{\text{m}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{m}}\right)\right]:\left[\mathbf{I}+\mathbf{S}:\left(f_{\text{f}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{f}}+f_{\text{m}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{m}}\right)+f_{\text{f}}\mathbf{R}:\mathbf{C}_{\text{p}}:\left(\mathbf{I}+\mathbf{S}:\boldsymbol{\Phi}_{\text{f}}\right)\right]^{-1} \quad (2)$$

여기서 4차 텐서 **R**은 나노튜브와 기지 간 계면의 불완전 결합을 묘사하기 위한 탄성 스프링의 컴플라이언스이다[14].

나노튜브가 임의의 방향으로 랜덤 분포하게 되는 경우, 식 (1)과 (2)에서 텐서의 방향 평균을 고려하게 되면 복합재의 유효강성을 나타내는 식은 각각 다음과 같으며[15],

$$\mathbf{C}=\left\langle\mathbf{C}_{\text{inf}}\left[\mathbf{I}+\left(\mathbf{S}-\mathbf{I}\right):\left(f_{\text{f}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{f}}+f_{\text{m}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{m}}\right)\right]\right\rangle:\left\langle\mathbf{I}+\mathbf{S}:\left(f_{\text{f}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{f}}+f_{\text{m}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{m}}\right)\right\rangle^{-1} \quad (3)$$

$$\mathbf{C}=\left\langle\mathbf{C}_{\text{inf}}\left[\mathbf{I}+\left(\mathbf{S}-\mathbf{I}\right):\left(f_{\text{f}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{f}}+f_{\text{m}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{m}}\right)\right]\right\rangle:\left\langle\mathbf{I}+\mathbf{S}:\left(f_{\text{f}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{f}}+f_{\text{m}}\boldsymbol{\Phi}_{\text{m}}\right)+f_{\text{f}}\mathbf{R}:\mathbf{C}_{\text{p}}:\left(\mathbf{I}+\mathbf{S}:\boldsymbol{\Phi}_{\text{f}}\right)\right\rangle^{-1} \quad (4)$$

여기서 $\langle\bullet\rangle$는 텐서의 방향 평균을 의미한다.

3.2 흡착계면물성의 역해석

질화붕소 나노튜브를 둘러싸는 흡착계면의 물성을 예측하기 위해서 2단계 영역 분할 기법을 도입하였다[16]. 이 방법은 흡착계면과 기지 영역을 포함하는 유효기지(effective matrix)를 정의하는 상위 스케일 해석과, 유효기지의 물성으로부터 흡착계면의 물성을 역으로 도출하는 하위 스케일 해석으로 구분된다. 먼저 상위 스케일 해석에서는 분자동역학 전산모사에서 도출된 나노복합재의 강성행렬이 나노튜브-유효기지로 구성된 이중입자 모델에서의 예측해와 동일하다는 가정으로부터 유효기지의 물성을 역으로 도출한다. 이후 하위 스케일 해석에서는 상위 스케일 해석에서 도출된 유효기지의 물성이 흡착계면과 순수기지로 구성된 이중입자 모델 예측해와 동일하다는 조건으로부터 흡착계면의 물성을 역으로 도출한다. 이 때 상위 스케일 해석에서는 나노튜브와 유효기지 간 계면의 불완전 조건을 고려하기 때문에 식 (4)를 이용하여 유효기지의 물성을 수치적으로 도출한다. 반면 하위스케일 해석의 경우 유효기지와 순수기지는 모두 폴리메틸메타크릴레이트로 구성되어 있기 때문에 입자 상에 해당하는 흡착계면과 순수기지 간 계면이 완전한 조건인 식 (3)을 이용한다.

4. 결과 및 토의

4.1 분자동역학 및 미시역학 모델 예측 결과

분자역학 계산을 통해 도출한 질화붕소 나노튜브의 탄성계수는 Table 1에 제시되어 있다. 길이방향 영률의 경우 동일한 직경을 가진 탄소 나노튜브에 비해 약간 낮은 약 800 GPa 정도이며, 가로방향 영률을 비롯한 전단계수는 탄소 나노튜브와 유사한 수준이다. Table 1에 제시된 결과와

Table 1. Elastic constants of boron nitride nanotube and polymethylmethacrylates

[Unit : GPa]

	E_L	E_T	G_L	G_T
BNNT	827	417	420	163
PMMA	2.5		0.9	

주 포아송 비를 이용하여 질화붕소 나노튜브의 강성행렬을 구할 수 있으며, 탄성론에 의한 아래의 관계식을 이용하였다. 여기서 E_L는 길이방향 영률, E_T는 가로방향 영률, G_T는 면내 전단계수, K_T는 면내 팽창계수, ν_{LT}는 주 포아송 비를 의미한다.

$$E_L = C_{11} - \frac{2C_{12}^2}{C_{22}+C_{23}} \quad (5\text{-}1)$$

$$E_T = C_{22} - \frac{C_{12}^2\left(C_{22}-2C_{23}\right)+C_{11}C_{23}^2}{C_{11}C_{22}-C_{12}^2} \quad (5\text{-}2)$$

$$G_T = \frac{1}{2}\left(C_{22}-C_{23}\right) \quad (5\text{-}3)$$

$$K_T = \frac{1}{2}\left(C_{22}+C_{23}\right) \quad (5\text{-}4)$$

$$\nu_{LT} = \frac{C_{12}}{C_{22}+C_{23}} \quad (5\text{-}5)$$

분자동역학 전산모사를 통해 도출한 질화붕소 나노튜브-폴리메틸메타크릴레이트 나노복합재의 각 방향으로의 일축인장 및 전단에 따른 응력-변형률 선도는 Fig. 3에 도시되어있다. 나노복합재의 길이방향 인장의 경우 변형률이 증가함에 따라 나노복합재의 응력이 급격히 상승한다. 이는 길이방향 인장 시 높은 강성을 지니는 나노튜브가 하중을 충분히 지지하기 때문이다. 이러한 결과는 나노복합재를 가로등방성 구조로 모델링하고 주기경계조건을 부여한 기존의 연구 결과들에서도 나타나는 경향이다[11,16]. 그러나 가로방향 물성의 경우 고분자 수지에서 나노튜브로의 하중 전달이 반데르발스 결합에 의해 충분치 못하기 때문에 순수한 기지와 비교하였을 때 강화 효과가 두드러지지 않는다. 특히 나노복합재와 고분자 기지의 응력-변형률 선도가 거의 유사한 형태로 나타나기 때문에 계면에서의 결합이 불완전하다는 것을 짐작할 수 있으며, 이에 대해서는 미시역학 모델과의 비교를 통해 추후 논의한다. 나노복합재의 전단 변형의 경우 가로방향 인장에서와 마찬가지로 나노튜브의 변형으로 인한 두드러진 응력 증가 없이 기지의 거동이 지배적으로 나타난다. 이는 나노튜브와 고분자 기지 간 계면에서 박리와 미끄러짐이 발생하기 때문이다.

Fig. 3에 도시된 응력-변형률 선도로부터 2%의 변형률 구

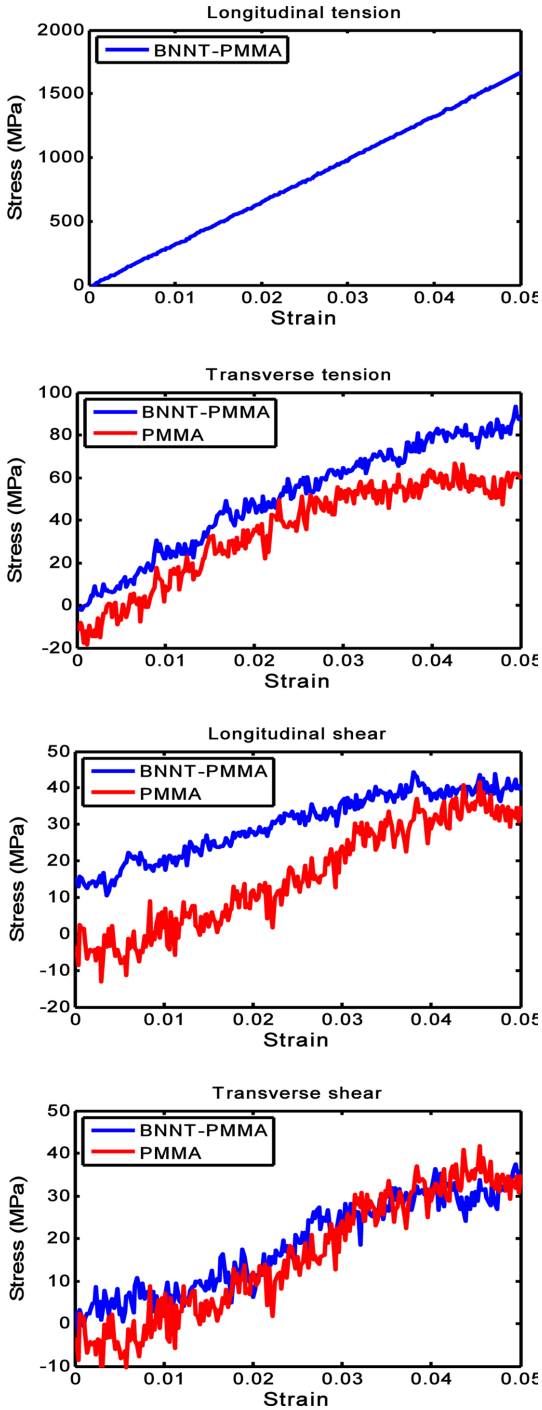

Fig. 3. Transversely isotropic stress-strain curves of nanocomposites

Table 2. Elastic constants of nanocomposites determined from molecular dynamics and double inclusion model

[Unit : GPa]

Method	E_L	E_T	G_L	G_T	E	G
MD	33.1	2.50	0.74	0.49	7.32	2.88
D-I	33.0	2.94	1.01	0.99	7.92	3.09

간에서 탄성계수와 전단계수를 결정하였으며, 이를 이중입자 모델 예측해와 비교한 결과를 Table 2에 제시하였다. 나노복합재의 길이방향 탄성계수의 경우 분자동역학 전산모사 결과와 미시역학 모델 결과가 거의 동일하다. 이는 길이방향 인장 시 나노튜브의 변형과 나노복합재의 변형이 동일하게 발생하므로 계면의 불완전 결합 효과가 나타나지 않기 때문이다. 반면 가로방향 탄성계수 및 전단계수의 경우 분자동역학 전산모사 결과가 미시역학 모델 결과에 비해 낮게 도출되었다. Table 2에서 하첨자가 없는 E 와 G는 각각 나노튜브가 랜덤한 방향으로 분포하는 미시구조에 대한 유효 등방성 영률과 전단계수를 나타낸다. 이 경우, 분자동역학 결과가 미시역학 모델 결과에 비해 약간 낮게 도출되었다. 미시역학 모델에서는 계면의 완전 결합을 가정하였기 때문에, 이로부터 질화붕소 나노튜브와 폴리메틸메타크릴레이트의 계면은 불완전 결합 상태임을 확인할 수 있다.

4.2 계면물성 역해석 결과

상위 스케일 해석에서는 나노복합재의 분자동역학 전산모사 결과가 이중 입자 모델 예측해와 동일하다는 조건으로부터 유효기지의 물성을 역으로 도출하였다. 계면의 불완전 결합을 묘사하는 컴플라이언스 값에 따른 유효기지의 영률과 전단계수 변화는 Fig. 4에 제시되어 있다. 컴플라이언스가 0인 경우는 완전 결합에 해당하며 유효기지의 영률이 순수한 폴리메틸메타크릴레이트의 영률보다 작게 도출된다. 반면 컴플라이언스 값이 증가할수록 유효기지의 영률은 점진적으로 증가하면서 수렴하는 결과를 보인다. 특히 폴리메틸메타크릴레이트의 영률이 2.5 GPa이기 때문에, 흡착계면을 포함하는 유효기지의 영률은 이 값보다는 크게 나타나야 한다. 그러므로 질화붕소 나노튜브와 기지 간의 계면 컴플라이언스는 2 nm/GPa 이상이 되어야 함을 알 수 있다. 보다 정확한 계면 컴플라이언스 값의 예측을 위해서는 모드I 계면 파괴 전산모사가 필요하다.

Fig. 4에 주어진 유효계면의 물성을 입력 값으로 설정하여 하위 스케일에서 도출된 흡착계면의 영률과 전단계수

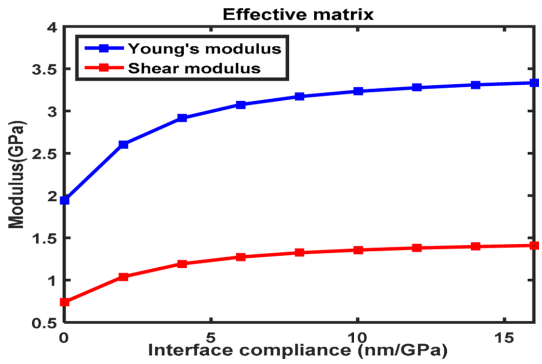

Fig. 4. Young's modulus of effective matrix determined from upper-level analysis

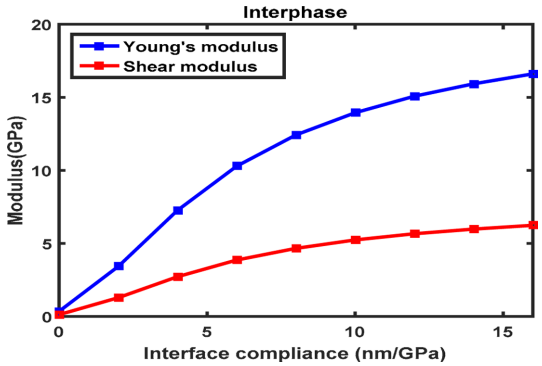

Fig. 5. Young's modulus of adsorption interphase determined from lower-level analysis

는 Fig. 5에 주어져 있다. 계면의 컴플라이언스가 증가함에 따라 흡착 계면의 영률과 전단계수는 증가하며, 컴플라이언스가 10 nm/GPa 이상인 경우 영률과 전단계수는 각각 15 GPa과 5 GPa 이상의 값을 가진다. 흡착 계면은 순수한 기지 영역에 비해 밀도가 높기 때문에 이러한 결과는 타당하다고 볼 수 있다[17]. 흡착계면의 물성이 주어지게 되면 질화붕소 나노튜브의 다양한 체적분율 조건 하에서 유효기지의 물성을 하위 스케일 해석을 통해 예측할 수 있다. 이후 상위 스케일 해석을 통해 유효기지의 물성과 질화붕소 나노튜브의 물성으로부터 다양한 체적분율 조건에서 나노복합재의 물성을 쉽게 예측할 수 있다.

5. 결 론

본 연구에서는 질화붕소 나노튜브-폴리메틸메타크릴레이트 나노복합재의 기계적 물성을 분자동역학 전산모사를 통해 도출하였고, 이를 이중 입자 모델 예측해와 비교하였다. 길이방향 탄성계수의 경우 두 방법으로부터 도출된 결과가 거의 동일한 반면, 가로방향 탄성계수 및 전단계수의 경우 분자동역학 전산모사 결과가 더 낮은 값을 나타내었다. 특히 나노튜브의 랜덤 분포를 고려한 유효 등방성 영률과 전단계수의 경우 분자동역학 전산모사 결과가 이중 입자 모델 예측해보다 낮은 값을 보였다. 이로부터 질화붕소 나노튜브와 고분자 기지 간의 계면 특성이 좋지 않은 것을 확인할 수 있었다. 따라서 질화붕소 나노튜브를 이용한 고분자 나노복합재의 경우 효과적인 하중 전달을 위해서는 그래프팅 가공이나 나노튜브 표면 기능기와 같은 추가적인 공정이 필요하다.

질화붕소 나노튜브를 둘러싸며 생성되는 흡착계면의 물성을 예측하기 위해 미시역학 모델 기반의 역해석 기법을 도입하였다. 2단계 영역 분할 기법을 통해 다양한 계면 컴플라이언스 값에 따른 유효기지와 흡착계면의 영률과 전단계수의 조합을 도출할 수 있었다. 이로부터 나노튜브의 다양한 체적분율 조건에서 나노복합재의 물성을 쉽게 예측할 수 있는 방법을 제시하였다. 질화붕소 나노튜브는 탄소 나노튜브와 마찬가지로 결함, 튜브의 응집, 굽힘 현상 등 다양한 인자에 의해 강화 효과가 저하된다. 따라서 향후 연구에서는 본 연구에서 제시한 방법론과 흡착계면 물성을 바탕으로 하여 상기한 인자들이 나노복합재의 물성에 미치는 영향을 효율적으로 고려할 수 있는 멀티스케일 해석 모델로 확장할 계획이다.

후 기

본 연구는 방사청 주관 국방순수기초연구사업(UD160052BD)의 지원으로 수행되었으며 이에 감사 드립니다. 본 연구의 교신저자인 양승화는 학부연구원임에도 불구하고 뛰어난 열정과 연구역량을 통해 본 논문의 1저자로 참여 한 최서연에게 깊이 감사 드립니다.

REFERENCES

1. Chopra, N.G., Luyken, R.J., Cherrey, K., Crespi, V.H., Cohen, M.L., Louie, S.G., and Zettle, A., "Boron Nitride Nanotubes," *Science*, Vol. 269, No. 5226, 1995, pp. 966-967.
2. Chang, C.W., Fennimore, A.M., Afanasiev, A., Okawa, D., Ikuno, T., Garcia, H., Li, D., Majumdar, A., and Zettle, A., "Isotope Effect on the Thermal Conductivity of Boron Nitride Nanotubes," *Physical Review Letters*, Vol. 97, 2006, 085901.
3. Simard, B., "Industrialization of Boron Nitride Nanotubes: From Synthesis to Applications," Proceeding of TechConnect World Innovation, Washington DC, US, Jun. 2014.
4. Cohen, M.L., and Zettle, A., "The Physics of Boron Nitride Nanotubes," *Physics Today*, Vol. 63, No. 11, 2010, pp. 34-38.
5. Yuan, J., and Liew, K.M., "Effects of Boron Nitride Impurities on the Elastic Properties of Carbon Nanotubes," *Nanotechnology*, Vol. 19, 2008, 445703.
6. Verma, V., Jindal, V.K., and Dharamvir, K., "Elastic Moduli of a Boron Nitride Nanotube," *Nanotechnology*, Vol. 18, 2007, 435711.
7. Jin, J., and Yang, S., "Molecular Dynamics Study on Mechanical Behavior and Load Transfer of CNT/PET Nanocomposites : the Effects of Covalent Grafting," *Composites Research*, Under Review, 2017.
8. Rappe, A.K., and GoddardIII, W.A., "Charge Equilibration for Molecular Dynamics Simulations," *Journal of Physical Chemistry*, Vol. 95, No. 8, 1991, pp. 3358-3363.
9. Hoover, W.G., "Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-space Distributions," *Physical Review A*, Vol. 31, 1985, pp. 1695-1697.
10. Hoover, W.G., "Constant-pressure Equations of Motion," *Physical Review A*, Vol. 34, 1986, pp. 2499-2500.
11. Yang, S., Yu, S., Kyoung, W., Hahn, D.S., and Cho, M., "Multiscale Modeling of Size-dependent Elastic Properties of Carbon Nanotube/polymer Nanocomposites with Interfacial Imperfections," *Polymer*, Vol. 5, No. 2, 2012, pp. 623-633.
12. Hori, M., and Nemat-Nasser, S., "Double-Inclusion Model and

Overall Moduli of Multi-Phase Composites," *Mechanical of Materials*, Vol. 14, 1993, pp. 189-206.
13. Li, J.Y., "Thermoelastic Behavior of Composites With Functionally Graded Interphase: a Multi-Inclusion Model," *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 37, 2000, pp. 5579-5597.
14. Qu, J., "Eshelby Tensor for an Elastic Inclusion with Slightly Weakened Interface," *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 60, No. 4, 1993, pp. 1048-1050.
15. Hu, G.K., and Weng, G.J., "The Connections Between the Double-Iinclusion Model and the Ponte Castaneda-Wills, Mori-Tanaka, and Kuster-Toksoz Models," *Mechanics of Materials*, Vol. 32, 2000, pp. 495-503.
16. Yang, S., Yu, S., Ryu, J., Cho, J.M., Kyoung, W., Han, D.S., and Cho, M., "Nonlinear Multiscale Modeling Approach to Characterize Elastoplastic Behavior of CNT/Polymer Nanocomposites Considering the Interphase and Interfacial Imperfection," *International Journal of Plasticity*, Vol. 41, 2013, pp. 124-146.
17. Yang, S., and Cho, M., "Scale Bridging Method to Characterize Mechanical Properties of Nanoparticle/Polymer Nanocomposites," *Applied Physics Letters*, Vol. 93, No. 4, 2008, 043111.