

# 나노복합재료의 전기/역학적 특성과 예측을 위한 멀티스케일 모델링의 최신 연구 분석

길 태 건<sup>1</sup>·배 진 호<sup>2</sup>·윤 현 노<sup>1</sup>·이 행 기<sup>3†</sup>

<sup>1</sup>한국과학기술원 건설및환경공학과 박사후연구원, <sup>2</sup>한국과학기술원 건설및환경공학과 박사과정, <sup>3</sup>한국과학기술원 건설및환경공학과 교수

## Review of Recent Advances in the Electrical/Mechanical Characteristics of Nanocomposites and Multi-scale Modeling of Nanocomposites

Taegeon Kil<sup>1</sup>, Jin-Ho Bae<sup>2</sup>, Hyun-No Yoon<sup>1</sup> and Haeng-Ki Lee<sup>3†</sup>

<sup>1</sup>Postdoctoral Research Fellow, Department of Civil and Environmental Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology, Daejeon, 34141, Korea

<sup>2</sup>Graduate Student, Department of Civil and Environmental Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology, Daejeon, 34141, Korea

<sup>3</sup>Professor, Department of Civil and Environmental Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology, Daejeon, 34141, Korea

### Abstract

Nanocomposites have been considered innovative composite materials that have multi-functionality and high performance. Because the incorporation of nanoscale fillers may significantly improve the electrical, mechanical, and thermal properties of composites, numerous extensive studies on the characterization of nanocomposites with nanoscale fillers have been performed. In particular, the development of nanocomposites using carbon-based nanoscale fillers (e.g., carbon nanotubes, carbon black, graphene nanoplates) have attracted much interest in the composite field. This paper provides a review of recent advances in the electrical/mechanical characteristics of nanocomposites, which are essential for their practical applications. Furthermore, this paper revisits the recent research on multi-scale modeling, which is a promising approach for predicting the characteristics of nanocomposites. The current challenges and future development potentials for multi-scale modeling are also discussed.

**Keywords** : nanocomposites, electrical characteristics, mechanical characteristics, multi-scale modeling

### 1. 서론

나노복합재료는 고분자 모재에 나노 스케일의 필러를 혼입한 복합재료로 우수한 전기/역학적 성능, 성형성, 경제성 등의 이점을 가져 다양한 분야에서 활용되고 있다(Cai *et al.*, 2020). 20세기 후반부터 복합재료에 탄소계 나노 필러 재료를 혼입하여 전기 및 역학적 성질을 부여하고 이를 다양한 분야에서 다기능성 및 고성능의 복합재료로 사용하기 위한 연구들이 시작되었으며, 관련 연구들이 최근까지 꾸준히 수행되고 있다(Jang *et al.*, 2020; Sanli *et al.*, 2016). 이는 우수한 전기 전도성 및 역학적 특성을 가지는 탄소계 나노 필러 재료의 혼입이 나노복합재료의 전기/역학적 특성을 크게 향상시킬 수 있기 때

문이다(Jang *et al.*, 2020; Sanli *et al.*, 2016). 따라서, 이를 활용하기 위해서는 탄소계 나노 필러가 혼입된 나노복합재료의 전기/역학적 특성을 파악하고, 그 특성을 예측하는 것이 필수적이다.

고분자 모재 내 탄소계 나노 필러를 혼입하면 복합재료 내에서 탄소계 나노 필러 간의 접촉 및 연결을 통해 전도성 경로가 형성되고, 형성된 경로를 통해 전류가 흐르면서 복합재료에 전도성이 부여되게 된다. 이러한 나노복합재료는 구조물 건전도 모니터링 센서, 자기 발열 소재, 전자파 차폐재 등으로 활용될 수 있다(Kil *et al.*, 2022; Zhang *et al.*, 2017). 또한, 기존의 복합재료의 역학적 특성을 강화하기 위한 목적으로 밀도가 낮고 역학적 성능이 우수한 탄소계 나노 필러를 혼입하는 연구

†Corresponding author:

Tel: +82-42-350-3623; E-mail: haengki@kaist.ac.kr

Received March 22 2023; Revised April 7 2023;

Accepted April 7 2023

© 2023 by Computational Structural Engineering Institute of Korea

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License(<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

들도 활발히 수행되고 있다(Park *et al.*, 2018).

하지만 탄소계 나노 필러와 고분자 모재의 서로 다른 스케일 차이로 인해 나노복합재료의 성능 예측에 어려움이 있다(Kil *et al.*, 2023). 이를 해결하기 위해 나노 단위에서의 재료 특성을 파악하고 이를 상위 단위로 연결하여, 최종적으로 거시 단위에서의 나노복합재료의 전기/역학적 특성을 해석하는 멀티스케일 모델링 연구들이 다수 수행되고 있다(Kil *et al.*, 2023). 이에, 본 논문에서는 탄소계 나노 필러 및 나노복합재료의 전기/역학적 특성을 소개하고, 나노복합재료의 전기/역학적 특성을 예측하기 위한 멀티스케일 모델링의 최신 연구들에 대해서 고찰하고자 한다.

## 2. 나노복합재료

### 2.1 탄소계 나노 필러

탄소계 나노 필러로는 카본블랙(carbon black), 탄소나노튜브(carbon nanotube), 탄소 나노섬유(carbon nanofiber), 그래핀 나노판(graphene nanoplate) 등이 있으며, 이 재료들을 혼입한 나노복합재료에 관한 많은 연구들이 진행되고 있다(Li *et al.*, 2022). 특히, 탄소나노튜브는 원통형 나노 구조를 갖는 탄소 동소체로서 화학적으로 안정하고 부식을 일으키지 않으며 전기 및 역학적 특성이 우수하여 최근 나노복합재료에 많이 사용되고 있으며, 이 재료는 높은 종횡비(aspect ratio)로 인해 카본블랙에 비해 상대적으로 적은 혼입량으로도 우수한 전기 전도성을 확보할 수 있는 장점이 있다(Sanli *et al.*, 2016; Wang and Aslani, 2019). 그래핀 나노판은 2차원 구조를 갖는 판상 구조의 탄소계 나노 필러 재료로 우수한 전도성과 비교적 저렴한 가격으로 인해 많이 사용되고 있다(Al-Saleh and Sundararaj, 2011). 게다가, 고강도 및 고강성을 가져 모재에 작용하는 하중을 효율적으로 분산 및 흡수하여 역학적 특성의 향상을 목적으로 사용되고 있다(Al-Saleh and Sundararaj, 2011). 하지만 탄소나노튜브와 비교할 때 같은 전기 전도성을 확보를 위해서는 다량의 혼입이 필요할 수 있다(Wang and Aslani, 2019).

### 2.2 전기적 특성

복합재료는 일반적으로 전기 저항이 높은 절연체이지만, 전도성을 가지는 탄소계 나노 필러를 혼입함으로써 이를 전도체로 활용할 수 있다(Wen and Chung, 2006). 복합재료의 전기 전도성은 일반적으로 전자 전도(electron conduction)의 영향으로 발생한다. 전자 전도는 복합재료에 탄소계 나노 필러를 혼입함으로써 복합재료 내부에 전도성 경로가 형성되고 이 경로를 따라 전자의 이동으로 전도성이 부여되는 것으로, 충분한

양의 탄소계 나노 필러를 혼입한 복합재료에서는 전자 전도가 지배적으로 작용한다(Kim *et al.*, 2016; Sanli *et al.*, 2016).

나노복합재료의 전기 저항은 혼입되는 탄소계 나노 필러의 함량이 증가함에 따라 감소하며, 일정 함량의 탄소계 나노 필러가 혼입되면 전기 저항이 급격히 감소하여 나노복합재료의 전기 전도도를 크게 향상하는데, 전기 저항이 급격히 감소하기 시작하는 특정 지점에서의 탄소계 나노 필러의 함량을 침투 임계값(percolation threshold)이라고 한다(Cui *et al.*, 2019; Sanli *et al.*, 2016; Wang and Aslani, 2019). 따라서 복합재료의 전도성 확보를 위해서는 침투 임계값 이상의 탄소계 나노 필러를 혼입해야 하며, 탄소계 나노 필러마다 이 침투 임계값이 다르므로 사용하고자 하는 탄소계 나노 필러에 따라 충분한 실험을 통해 침투 임계값이 정의되어야만 한다.

### 2.3 역학적 특성

복합재료는 모재의 파손, 강화재료에 의한 모재의 파손, 미세균열의 전파로 인한 손상을 방지하기 위해 복합재료에 탄소계 나노 필러를 혼입하여 균열의 생성 및 전파를 방지하는 연구들이 수행되어 왔다(Han *et al.*, 2016). 최근에는 나노복합재료는 탄소계 나노 필러를 혼입하여 역학적 특성이 향상된 연구들이 보고되고 있다(Hussein and Kim, 2019). 나노복합재료의 모재는 작용 하중 일부를 탄소계 나노 필러로 전달하는 역할을 하며, 혼입된 탄소계 나노 필러는 작용 하중을 자체적인 강성으로 분담하거나 모재 내 미세공극에 위치하여 취약부를 보완한다(Han *et al.*, 2016; Hussein and Kim, 2019).

나노복합재료의 역학적 특성은 혼입하는 탄소계 나노 필러의 특성과 혼입량에 크게 영향을 받는다. 탄소계 나노 필러가 균질하게 분산된 나노복합재료는 제작 과정에서 발생하는 미세균열 또는 작용 하중으로 인한 균열 생성 및 전파에 의한 파손을 방지할 수 있다(Rubel *et al.*, 2019). 다만, 일정량 이상의 혼입량을 넘을 경우 불균일한 분산으로 인한 탄소계 나노 필러의 응집(agglomeration) 및 탄소계 나노 필러-모재 간 불완전한 계면 등으로 인하여 오히려 역학적 특성을 저하하는 원인이 된다(Rubel *et al.*, 2019). 따라서, 탄소계 나노 필러를 복합재료의 역학적 특성 개선을 목적으로 연구를 수행할 때는 실험적으로 특정 혼입량에 대한 임계점, 탄소계 나노 필러 분산 방법, 탄소계 나노 필러와 모재 간 계면 특성 등을 자세히 분석해야 한다.

## 3. 나노복합재료의 멀티스케일 모델링

### 3.1 전기적 특성 모델링

나노복합재료에서 탄소계 나노 필러와 모재 간의 전기 전도

도 차이로 인해 나노복합재료의 유효한 전기적 특성을 예측하는데 어려움이 있다(Pal and Kumar, 2016). 한편, 기존 연구들에서는 미세역학을 활용하여 나노복합재료의 유효 전기 전도도와 침투 임계값을 예측하는 연구들이 수행되었다(Pal and Kumar, 2016; Wang *et al.*, 2014). 이는 미세역학 기반 모델들이 나노복합재료에서의 탄소계 나노 필러의 함량, 형상 및 배치 방향 등과 같은 매개 변수를 용이하게 설명할 수 있기 때문이다(Mori and Tanaka, 1973). 제안된 미세역학 기반 모델 중 대표적으로 Mori-Tanaka 방법, Ponte Castañeda-Willis(PCW) 모델, Effective-medium 방법이 가장 널리 사용되고 있다(Castañeda and Willis, 1995; Mori and Tanaka, 1973). Weng(1990)은 나노복합재료의 유효 전기 전도도를 예측하기 위하여 Mori-Tanaka 방법의 적용을 포괄적으로 제시하였다. Pan 등(2011)은 PCW 모델을 적용하여 탄소계 나노 필러를 타원체 inclusion으로 가정하여 침투 임계값과 침투 포화점을 예측하였다. Wang 등(2014)은 Effective-medium 방법을 사용하여 탄소나노튜브와 그래핀이 각각 혼입된 나노복합재료의 유효 전기전도도를 예측하였다.

하지만, 나노복합재료의 전기 전도도 및 침투 임계값을 정확하게 예측하기 위해서는 추가로 탄소계 나노 필러의 형상, 탄소계 나노 필러와 모재 사이의 불완전한 계면 등과 같은 요소가 고려되어야 한다(Nakano *et al.*, 2012). 먼저 탄소계 나노 필러의 형상은 나노복합재료의 유효 전기 전도도에 큰 영향을 미칠 수 있다. 탄소나노튜브와 같은 탄소계 나노 필러는 높은 종횡비를 가지기 때문에 모재 내에서 곡선 형태로 존재하는 것으로 관찰된다(Sanli *et al.*, 2016). 이러한 곡선 형태의 탄소계 나노 필러는 모재 내에서 불균일한 분포를 초래할 수 있으며, 이는 궁극적으로 전기 전도성 네트워크의 형성을 방해한다(Sanli *et al.*, 2016). 나노복합재료의 전기적 성능은 전기 전도성 네트워크에 의해 지배되기 때문에 정확한 성능 예측을 위해서는 이러한 탄소계 나노 필러의 형태에 대한 영향이 고려되어야 한다(Duan and Karihaloo, 2007; Sanli *et al.*, 2016).

다음으로 탄소계 나노 필러와 모재 사이의 불완전한 계면의 영향이다. 일반적으로 탄소계 나노 필러와 모재의 결합은 완전하지 않으며 계면이 존재한다(Pan *et al.*, 2011). 이러한 불완전한 계면을 고려하기 위한 일반적인 이론적 방법은 모재와 나노 필러가 얇게 코팅되어 있다고 가정하여 계면 저항을 가지는 중간 계면을 모델링하는 것이다(Castañeda and Willis, 1995; Mori and Tanaka, 1973; Pan *et al.*, 2011). 이렇게 불완전한 계면의 효과를 고려하는 중간 계면의 계면 저항을 통해 탄소계 나노 필러와 모재 사이의 불완전한 계면이 전기 전도도에 미치는 영향을 고려할 수 있다.

최근에는 이러한 요소들을 고려하여 나노복합재료의 전기

적 특성을 예측하기 위한 멀티스케일 모델링에 관한 연구들이 활발히 수행되고 있다. 전기적 특성의 멀티스케일 모델링에 대한 최신 연구들은 분자동역학으로 탄소계 나노 필러의 균질성 및 계면 특성 등 재료 특성을 파악하고, 이를 상위 차원인 거시단위까지 연결하여 나노복합재료의 거동을 예측하는 일련의 과정을 통해 해석의 효율성을 높이는 연구들이 다수 수행되고 있다(Jin *et al.*, 2018; Lee *et al.*, 2022). Jin 등(2018)은 분자동역학을 활용한 멀티스케일 모델링을 통해 탄소계 나노 필러와 모재 사이의 이력 현상을 설명하였다. 분자동역학 기반의 CGMS(coarse-grained molecular statics) 방법을 적용하여 응력에 따른 탄소나노튜브의 형태학적 변화를 반영하여 탄소나노튜브의 굽힘 강성과 탄소나노튜브 간의 반데르발스 상호작용을 고려하였다(Jin *et al.*, 2018). 제안된 멀티스케일 모델링을 통해 큰 응력 변화에 따른 나노복합재료의 비선형적인 전기 전도도의 변화를 예측하였다(Jin *et al.*, 2018). Lee 등(2022)은 탄소나노튜브 혼입 복합재료의 유효 전기적 특성을 예측하기 위해 고분자 모재의 손상 및 계면 특성을 고려하여 멀티스케일 모델링을 수행하였다. 분자동역학 시뮬레이션을 통해서 고분자 모재의 기계적 특성 및 계면 특성에 대한 파라미터 값을 도출하고, 도출된 값을 연속체 스케일의 분석 모델에 적용하였다(Lee *et al.*, 2022). 그 후 유한요소법을 통해 제안한 멀티스케일 모델링의 적용 가능성을 검토하였다(Lee *et al.*, 2022).

하지만, 나노 스케일에서의 분자동역학 시뮬레이션의 경우 비용 및 시간적 한계로 인해 대표 체적과 같은 단위 셀로 가정하여 해석을 수행하기 때문에 실제 나노복합재료와는 차이가 존재할 수 있다. 따라서 이러한 나노 단위의 해석에서는 다양한 대표 체적을 반복적으로 계산하고, 이를 적절히 평균화하는 방법이 수반되어야 한다(Yang *et al.*, 2013).

### 3.2 역학적 특성 모델링

나노복합재료의 멀티스케일 모델링은 미시 단위의 화학작용, 탄소계 나노 필러의 불완전 계면, 응집 현상, 국부적 dislocation 등을 모사하여 도출된 결과를 상위 단위로 인가하여 나노복합재료의 역학적 특성을 도출한다(Yang, 2022). 일례로, 제1 원리, 밀도 범함수 이론(density functional theory), 미세역학(micromechanics), 그리고 유한요소법(finite element method) 등을 결합하여 나노 스케일에서 발생하는 특성을 상위 차원으로 인가할 수 있다(Göbel *et al.*, 2018; Ellis and McDowell, 2017). 멀티스케일 모델링은 다양한 스케일에서 발생하는 결함을 해당 단위에서 모사한 뒤 해당 결과를 병렬적으로 해석할 수 있으므로 단일 스케일 모델링의 길이 또는 시간 한계를 스케일 브릿징 기법을 통해 나노 단위에서 발생하는 현상학적 특성을 고려하

여 포괄적인 해석을 할 수 있다는 장점을 가지고 있다(Göbel *et al.*, 2018; Ellis and McDowell, 2017).

나노복합재료의 역학적 특성은 모재 및 혼입된 탄소계 나노 필러의 특성, 그리고 탄소계 나노 필러-모재 간 계면의 상호작용이 지배적인 요소로 알려져 있다(Lee *et al.*, 2022; Yang, 2022). 특히, 나노복합재료의 탄소계 나노 필러-모재 간의 불완전한 계면은 서로 다른 두 재료의 독립적인 거동으로 인한 이격, 계면의 불완전성으로 인한 slip 발생, 국부적 취약성 등 복합적인 이유로 인해 나노복합재료 정확한 역학적 특성 예측에 있어 고려해야 하는 요인들이다(Yang, 2022; Ellis and McDowell, 2017; Zhu *et al.*, 2021).

역학적 특성의 멀티스케일 모델링에 대한 최신 연구로는 탄소계 나노 필러와 모재 간 공유결합 모사 및 탄소계 나노 필러 필러의 응집·굴곡·세장비·무작위 배열 등 나노 단위에서 발생하는 현상을 고려하여 예측 정확도를 향상시키는 연구들이 다수 수행되고 있다(Hussein and Kim, 2019; Yang, 2022; Zhu *et al.*, 2021). Yang(2022)는 탄소나노튜브와 폴리에틸렌 테레프탈레이트(Polyethylene terephthalate: PET) 모재의 공유결합을 분자동역학과 미세역학을 적용한 멀티스케일 모델링을 통해 모사하여 탄소계 나노 필러와 모재 간 계면 특성을 해석하였다. Yang(2022)는 계면을 선형 스프링 층으로 가정하는 interface 모델과 계면에 가상의 상을 위치시키는 interphase 모델을 제시하였다. 제안된 모델은 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 탄소나노튜브와 PET 모재 간의 공유결합 개수에 따른 계면 특성을 모사함으로써 나노복합재료의 역학적 특성을 도출한다. 따라서 제안된 모델은 기존의 interface 또는 interphase 모델만을 이용해 도출한 결과보다 더 정확한 예측이 가능하다. Zhu 등(2021)은 탄소나노튜브로 강화된 나노복합소재를 기존 Mori-Tanaka 방법에 탄소나노튜브의 굴곡과 무작위 분산을 고려한 멀티스케일 모델링을 제안하였다. 해당 논문에서는 탄소나노튜브가 사인파(sinusoidal waviness) 형태로 존재한다고 가정하였으며, 계면은 interface 모델로 구성하였다. 제안된 모델은 탄소나노튜브의 함량, 굴곡도, 무작위 분산성, 그리고 탄소나노튜브와 모재 간 계면 불완전성을 고려하여 나노복합재료의 역학적 특성을 계산하였다(Zhu *et al.*, 2021). Hussein과 Kim (2019)는 그래핀 나노판으로 강화된 나노복합재료를 미세역학 기반 유한요소법을 사용하여 계면 특성을 해석하였다. 유한요소법으로 계면에 가상의 상을 위치시켜 손상 발생 시점과 강성 저하(Stiffness degradation) 기법을 사용하여 계면의 분리를 모사하였다(Hussein and Kim, 2019). 해당 모델링은 작용 하중에 의한 그래핀 나노판과 모재의 박리를 불완전 계면으로 구성하여 해당 계면에서 생성된 미세균열의 전파, 응력 집중 현상을 고려한 나노복합재료의 역학적 특성을 계산하였다(Hussein

and Kim, 2019). 따라서 Hussein과 Kim(2019)의 멀티스케일 모델링 통해 기존에 고려하지 못했던 나노복합재료 내 그래핀 나노판의 배열로 인한 모재 내 균열 전파 체계를 정밀하게 해석할 수 있다.

하지만, 나노 또는 마이크로 스케일에서 발생하는 복합적인 메커니즘을 상위 단계에 인가하는 데 필수적으로 사용하는 스케일 브릿징 기법은 나노 재료의 형태, 형상, 또는 다양한 환경 하중을 고려한 통합된 기법이 체계적으로 정립되지 않았기 때문에 이를 표준화하기 위한 추가적인 연구들이 필요하다(Göbel *et al.*, 2018; Ellis and McDowell, 2017).

#### 4. 결론

본 논문은 나노복합재료의 전기/역학적 특성에 대해서 고찰하였다. 또한, 나노복합재료의 전기/역학적 특성 예측을 위한 최신 멀티스케일 모델링에 연구들에 관하여 검토하였다. 나노복합재료는 고분자 모재에 탄소계 나노 필러를 혼입하여 전기/역학적 성능을 부여하는 것으로, 탄소계 나노 필러의 종류와 함량에 따라 각기 다른 향상된 전기/역학적 특성을 가지게 된다. 따라서 나노복합재료를 적용하기 위해서는 다양한 실험적 연구들이 수반되어야 한다. 나노복합재료의 특성 예측을 위한 멀티스케일 모델링은 분자동역학, 미세역학, 유한요소법 등의 단일 해석기법을 연계하여 재료의 결합 및 미시적 특성이 거시적 현상에 미치는 영향을 분석한다(Castañeda and Willis, 1995; Mori and Tanaka, 1973; Chan and Andrawes, 2010; Wu *et al.*, 2011). 이를 통해 나노복합재료의 전기/역학적 특성을 예측하는 연구들이 다수 수행되고 있었다. 본 논문에서 검토한 멀티스케일 모델링 기법은 기존의 단일 해석 기법 대비 다양한 스케일에서 발생하는 복합적인 현상을 포괄적으로 고려할 수 있었다(Jin *et al.*, 2018; Lee *et al.*, 2022; Yang *et al.*, 2013; Yang, 2022; Ellis and McDowell, 2017; Zhu *et al.*, 2021). 이는, 기존의 단일 해석 기법 대비 나노복합재료의 전기/역학적 특성을 더욱 정밀하게 예측할 수 있는 기법으로 판단된다(Chan and Andrawes, 2010; Wu *et al.*, 2011). 다만, 멀티스케일 모델링에서는 나노 단위에서 발생하는 현상들을 대표 체계적으로 구현하기 때문에 상위 차원으로 인가하는 과정에서 적절한 체적을 설정하는 것 역시 멀티스케일 모델링을 수행하는 과정에서 필수적으로 고려되어야 한다(Kil *et al.*, 2022; Pal and Kumar, 2016). 또한, 멀티스케일 모델링은 시간의 흐름에 따른 분자의 변화, 이온의 유동 또는 상태 변화 등을 병렬적으로 상위 차원 단계로 인가함에 따라 시간을 증폭 또는 감쇠하는 과정에서 폭발적인 분자 거동 양상이 발생하는 일부 제약 사항이 존재한다(Göbel *et al.*, 2018). 추가적인 연구를 통해 멀티스케

일 모델링의 한계점들이 보완된다면 멀티스케일 모델링 기법에 활용한 나노복합재료의 효율적 설계 및 개발을 앞당길 수 있을 것으로 기대된다.

### 감사의 글

본 연구는 한국과학재단이 주관하는 중견연구자지원사업 (No. 2021R1A2C3006382)의 지원을 받아 수행되었습니다.

### References

- Al-Saleh, M.H., Sundararaj, U. (2011) Review of the Mechanical Properties of Carbon Nanofiber/Polymer Composites, *Compos. Part A: Appl. Sci. & Manuf.*, 42(12), pp.2126~2142.
- Cai, J.H., Li, J., Chen, X.D., Wang, M. (2020) Multifunctional Polydimethylsiloxane Foam with Multi-walled Carbon Nanotube and Thermo-Expandable Microsphere for Temperature Sensing, Microwave Shielding and Piezoresistive Sensor, *Chem. Eng. J.*, 393, p.124805.
- Castañeda, P.P., Willis, J. (1995) The Effect of Spatial Distribution on the Effective behavior of Composite Materials and Cracked Media, *J. Mech. & Phys. Solids*, 43(12), pp.1919~1951.
- Chan, L.Y., Andrawes, B. (2010) Finite Element Analysis of Carbon Nanotube/Cement Composite with Degraded Bond Strength, *Comput. Mater. Sci.*, 47(4), pp.994~1004.
- Cui, X.Z., Li, J., Su, J.W., Jin, Q., Wang, Y.L., Cui, S.Q. (2019) Effect of Temperature on Mechanical Performance and Tensoriality of a New Sensor-Enabled Geosynthetic Material, *J. Mater. Civil Eng.*, 31(6), p.04019060.
- Duan, H.L., Karihaloo, B.L. (2007) Effective Thermal Conductivities of Heterogeneous Media Containing Multiple Imperfectly Bonded Inclusions, *Phys. Rev. B*, 75(6), p.064206.
- Ellis, B.D., McDowell, D.L. (2017) Application-Specific Computational Materials Design Via Multiscale Modeling and the Inductive Design Exploration Method (IDEM), *Integr. Mater. Manuf. Innov.*, 6(1), pp.9~35.
- Göbel, L., Königsberger, M., Osburg, A., Pichler, B. (2018) Viscoelastic behavior of Polymer-Modified Cement Pastes: Insight from Downscaling Short-Term Macroscopic Creep Tests by Means of Multiscale Modeling, *Appl. Sci.*, 8(4), p.487.
- Han, J., Liu, W., Wang, S., Du, D., Xu, F., Li, W., De Schutter, G. (2016) Effects of Crack and ITZ and Aggregate on Carbonation Penetration based on 3D Micro X-ray CT Microstructure Evolution, *Constr. & Build. Mater.*, 128, pp.256~271.
- Hussein, A., Kim, B. (2019) Micromechanics based FEM Study on the Mechanical Properties and Damage of Epoxy Reinforced with Graphene based Nanoplatelets, *Compos. Struct.*, 215, pp.266~277.
- Jang, D., Yoon, H.N., Nam, I.W., Lee, H.K. (2020) Effect of Carbonyl Iron Powder Incorporation on the Piezoresistive Sensing Characteristics of CNT-based Polymeric Sensor, *Compos. Struct.*, 244, p.112260.
- Jin, L., Chortos, A., Lian, F., Pop, E., Linder, C., Bao, Z., Cai, W. (2018) Microstructural Origin of Resistance-strain Hysteresis in Carbon Nanotube Thin Film Conductors, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 115(9), pp.1986~1991.
- Kil, T., Bae, J.H., Yang, B., Lee, H.K. (2023) Multi-Level Micromechanics-based Homogenization for the Prediction of Damage behavior of Multiscale Fiber-Reinforced Composites, *Compos. Struct.*, 303, p.116332.
- Kil, T., Jin, D.W., Yang, B., Lee, H.K. (2022) A Combined Experimental and Micromechanical approach to Investigating PTC and NTC Effects in CNT-Polypropylene Composites under a Self-heating Condition, *Compos. Struct.*, 289, p.115440.
- Kim, G.M., Naeem, F., Kim, H.K., Lee, H.K. (2016) Heating and Heat-Dependent Mechanical Characteristics of CNT-Embedded Cementitious Composites, *Compos. Struct.*, 136, pp.162~170.
- Lee, W., Chung, I., Baek, K., Im, S., Cho, M. (2022) Multiscale Modeling to Characterize Electromechanical behaviors of CNT/Polymer Nanocomposites Considering the Matrix Damage and Interfacial Debonding, *Mech. Adv. Mater. & Struct.*, 29(16), pp.2322~2341.
- Li, W., Dong, W., Guo, Y., Wang, K., Shah, S.P. (2022) Advances in Multifunctional Cementitious Composites with Conductive Carbon Nanomaterials for Smart Infrastructure, *Cement & Concr. Compos.*, 128, p.104454.
- Mori, T., Tanaka, K. (1973) Average Stress in Matrix and Average Elastic Energy of Materials with Misfitting Inclusions, *Acta metall.*, 21(5), pp.571~574.
- Nakano, H., Shimizu, K., Takahashi, S., Kono, A., Ougizawa, T., Horibe, H. (2012) Resistivity-Temperature Characteristics of Filler-Dispersed Polymer Composites, *Polymer*, 53(26), pp.6112~6117.
- Pal, G., Kumar, S. (2016) Multiscale Modeling of Effective Electrical Conductivity of Short Carbon Fiber-Carbon Nanotube-Polymer Matrix Hybrid Composites, *Mater. & Des.*, 89, pp.129~136.
- Pan, Y., Weng, G.J., Meguid, S.A., Bao, W.S., Zhu, Z.H., Hamouda, A.M.S. (2011) Percolation Threshold and Electrical Conductivity of a Two-Phase Composite Containing Randomly

- Oriented Ellipsoidal Inclusions, *J. Appl. Phys.*, 110(12), p.123715.
- Park, M., Park, J.H., Yang, B.J., Cho, J., Kim, S.Y., Jung, I.** (2018) Enhanced Interfacial, Electrical, and Flexural Properties of Polyphenylene Sulfide Composites Filled with Carbon Fibers Modified by Electrophoretic Surface Deposition of Multi-Walled Carbon Nanotubes, *Compos. Part A: Appl. Sci. & Manuf.*, 109, pp.124~130.
- Rubel, R.I., Ali, M.H., Jafor, M.A., Alam, M.M.** (2019) Carbon Nanotubes Agglomeration in Reinforced Composites: A Review, *AIMS Mater. Sci.*, 6(5), pp.756~780.
- Sanli, A., Müller, C., Kanoun, O., Elibol, C., Wagner, M.F.X.** (2016) Piezoresistive Characterization of Multi-Walled Carbon Nanotube-Epoxy based Flexible Strain Sensitive Films by Impedance Spectroscopy, *Compos. Sci. & Technol.*, 122, pp.18~26.
- Wang, L., Aslani, F.** (2019) A Review on Material Design, Performance, and Practical Application of Electrically Conductive Cementitious Composites, *Constr. & Build. Mater.*, 229, p.116892.
- Wang, Y., Weng, G.J., Meguid, S.A., Hamouda, A.M.** (2014) A Continuum Model with a Percolation Threshold and Tunneling-Assisted Interfacial Conductivity for Carbon Nanotube-based Nanocomposites, *J. Appl. Phys.*, 115(19), p.193706.
- Wen, S., Chung, D.D.L.** (2006) The Role of Electronic and Ionic Conduction in the Electrical Conductivity of Carbon Fiber Reinforced Cement, *Carbon*, 44(11), pp.2130~2138.
- Weng, G.** (1990) The Theoretical Connection between Mori-Tanaka's Theory and the Hashin-Shtrikman-Walpole Bounds, *Int. J. Eng. Sci.*, 28(11), pp.1111~1120.
- Wu, W., Al-Ostaz, A., Cheng, A.H.D., Song, C.R.** (2011) Computation of Elastic Properties of Portland Cement using Molecular Dynamics, *J. Nanomechanics Micromech.*, 1(2), pp.84~90.
- Yang, B.J., Shin, H., Lee, H.K., Kim, H.** (2013) A Combined Molecular Dynamics/Micromechanics/Finite Element Approach for Multiscale Constitutive Modeling of Nanocomposites with Interface Effects, *Appl. Phys. Lett.*, 103(24), p.241903.
- Yang, S.** (2022) Interface and Interphase of Nanocomposites Tailored by Covalent Grafting of Carbon Nanotube: Hierarchical Multiscale Modeling, *Int. J. Mech. Sci.*, 220, p.107160.
- Zhang, K., Li, G.H., Feng, L.M., Wang, N., Guo, J., Sun, K., Wang, M.** (2017) Ultralow Percolation Threshold and Enhanced Electromagnetic Interference Shielding in Poly (L-lactide)/ Multi-Walled Carbon Nanotube Nanocomposites with Electrically Conductive Segregated Networks, *J. Mater. Chem. C*, 5(36), pp.9359~9369.
- Zhu, F., Park, C., Yun, G.J.** (2021) An Extended Mori-Tanaka Micromechanics Model for Wavy CNT Nanocomposites with Interface Damage, *Mech. Advan. Mater. & Struct.*, 28(3), pp.295~307.

## 요 지

나노복합재료는 다기능성과 고성능을 가지는 혁신적인 복합재료이다. 나노 스케일 필러의 혼입함으로써 복합재료의 전기적, 역학적 및 열적 특성이 크게 향상될 수 있기 때문에 나노 스케일 필러를 이용한 나노복합재료의 특성화에 관한 다양한 연구가 광범위하게 수행되어 왔다. 특히, 탄소계 나노 필러(탄소나노튜브, 카본블랙, 그래핀 나노판 등)를 활용하여 전기/역학적 특성을 향상시킨 나노복합소재 개발에 관한 연구들이 복합재료 분야에서 큰 관심을 받고있다. 본 논문은 실제 응용에 필수적인 나노복합재료의 전기/역학적 특성을 문헌조사를 통해 고찰하는 것을 목표로 한다. 또한, 나노복합재료의 전기/역학적 특성 예측을 위한 최신 멀티스케일 모델링 연구들에 대해서 검토하고, 멀티스케일 모델링에 대한 과제와 향후 발전 가능성에 대해서 논의한다.

**핵심용어** : 나노복합재료, 전기적 특성, 역학적 특성, 멀티스케일 모델링