24. 학사논문 지도교수: 조 맹 효

24-1. 멀티스케일 균질화 해석을 통한 나노입자 복합재 물성의 확률적 요소 영향성 분석

24-2. 가교결합한 에폭시 및 에폭시 기반 나노 복합재의 분자동역학 모델 설계

24-3. 형상 최적화를 위한 POD 기법의 최적화 적용

24-1. 멀티스케일 균질화 해석을 통한 나노입자 복합재 물성의 확률적 요소 영향성 분석

최근 들어서 나노물질의 제조 기술의 눈부신 발전으로 인해 다양한 나노 관련 연구가 활발히 진행되고 있다. 특히 고분자재료에 기반한 나노복합재료는 다기능성(multifunctionality) 복합재료로 개발될 가치가 매우 높다.

나노입자가 고분자재료에 강화재로 포함될 경우에 나노입자와 고분자재료 사이의 상호작용으로 인하여 나노입자 주변의 고분자 사슬의 배열이 바뀌어 기존의 고분자재료와 다른 물성을 지니게 된다. 나노 단위의 물질의 경우 이와 같은 경계부분(등가계면)이 전체 부피에서 차지하는 비율이 크게 증가하여 전체 복합재의 유효 물성에 많은 영향을 미치게 된다. 따라서 경계부분의 물성 예측은 나노복합재의 물성을 해석하고 디자인하는데 중요한 부분이다.

본 연구에서는 멀티스케일 해석을 통하여 나노입자의 크기 효과를 고려하고 다수의 입자가 포함된 단위구조를 구성하여 이를 균질화 기법을 통하여 대표 물성치를 구한다. 이때 입자의 크기와 위치 및 계면 물성을 가진 여러 모델의 균질화 해석을 통하여 다양한 확률적 요소(입자의 크기나 위치 계면효과등)의 여러 효과들이 전체 복합재 물성에 끼치는 영향성을 비교 분석하고자 한다.

본 연구를 위해 균질화법을 이론적으로 이해한 후 균질화법을 유한요소를 이용해 해석하고 확률적 요소 영향성을 분석할 것이다. 연구에 따라 개발 가치가 매우 높은 고분자재료에 기반한 나노복합재료의 균질화 해석을 통하여 다양한 확률적 요소에 따른 영향성을 파악하여 재료 개발에 있어 방향성을 제시해 줄 것이다.

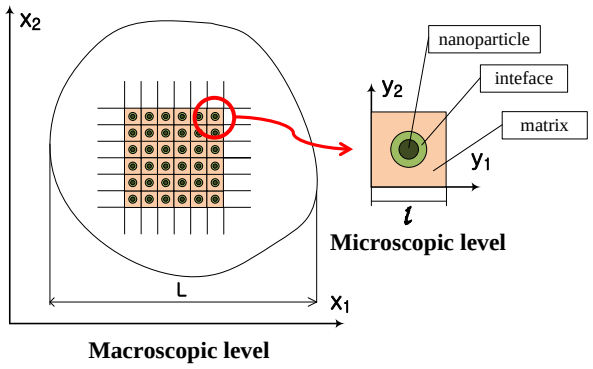

그림 1 A elastic body with repeated micro

담당 조교: 신 현 성 (p2530@snu.ac.kr)

24-2. 가교결합한 에폭시 및 에폭시 기반 나노 복합재의 분자동역학 모델 설계

근래에 제조 기술이 발전함에 따라 다양한 재료들은 점점 크기가 작아지고 있다. 이러한 재료들의 크기가 점점 작아지면서 나노 사이즈까지 작아지게 되었고 그에 따라 다양한 나노 사이즈의 물질들에 대한 연구가 진행되고 있다. 특히 고분자 재료를 기반으로 둔 나노 복합재료는 다양한 기능을 가진 재료로써 연구할 가치가 무척 높다.

최근 연구에서 나노 복합재는 입자 크기에 따라 young’s modulus나 shear modulus 같은 기계적 물성이 변하는 것을 분자 동역학(molecule dynamics) 으로 확인하였다. 이러한 기계적 물성은 재료를 사용함에 있어 큰 영향을 미치기 때문에 다양한 나노복합재료의 입자 크기는 매우 중요하다.

고분자 재료 중 하나인 에폭시 유닛(epoxy unit)은 epoxy resin과 curing agent가 결합된 재료로써, epoxy resin의 탄소와 curing agent의 질소 그룹 사이에서 가교 결합에 의한 구조적 안정성을 지니고 있다. 여기서 가교 결합은 고분자 사슬 사이에서 형성되는 공유 결합을 뜻한다.

본 연구에서는 이렇게 가교 결합은 나노 사이즈의 입자를 가진 에폭시 유닛을 해석적 모델링을 한 이후 분자 동영학 전산 모사를 통해 이 나노 복합재의 기계적 물성을 해석한다. 나노 복합재의 입자와 matrix 사이에 interphase까지 감안한 모델링을 성공한 이후, 이 복합재의 온도와 공유 결합 에너지, 해밀토니안 에너지까지 계산한 이후 입자 크기에 따라 변하는 물성을 비교 분석하고자 한다.

본 연구를 위해 분자 동역학 전산 모사에 대한 개념을 이해한 후 소프트웨어를 통한 고분자 나복합재 모델의 구성 연습을 계속하여 진행할 것이다.

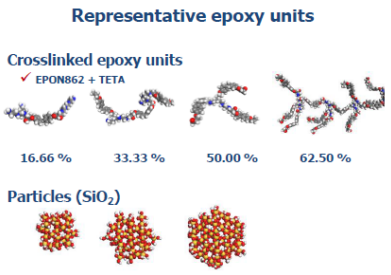

그림 2 대표적인 에폭시 유닛(epoxy units)

담당 조교: 최 준 명(nodie44@snu.ac.kr)

24-3. 형상 최적화를 위한 POD 기법의 최적화 적용

산업화 이후 지속된 개발에서 기계는 어떠한 목적에 대한 기능을 달성하기 위해 가능한 많은 재료를 사용해왔다. 그 결과 많은 불필요한 재료가 투자되었고 자원 고갈 문제를 야기하게 되었다. 이에 더해, 교통과 통신수단의 발전으로 기계의 사용자가 언제든지 들고 다닐 수 있는 가벼운 기계를 요구한다. 따라서 기계의 특정 목적에 따른 최적의 형상으로 설계가 필요하게 되었다.

본 연구는 POD (Proper orthogonal decomposition) 기법을 적용하여 특정 부하조건에서 최적의 형상을 찾는 것을 목적으로 한다. ROM는 자연현상이나 산업에서 발견할 수 있는 복잡한 현상을, 계산 가능한 입력-출력의 형태로 충분한 정확도 내에서 모델로서 단순화하는 것을 말한다. 본 연구에서는 입력에 따른 출력이 민감한 변수를 ROM으로써 추려낸다. POD란 ROM으로 추려진 입력-출력으로 나온 데이터를 모드 분해를 통해 선형 기저를 추출하는 과정을 일컫는다. 결과로 나온 모드에 대한 아이젠 벡터가 그 방향성을 나타내며 아이젠 밸류가 그 경향성의 크기를 나타낸다. 이를 통해 데이터의 경향성을 파악할 수 있다. POD의 장점은 설계변수가 굉장히 많아도 해석 가능하다는 점이다. 형상의 여러 조건에 대하여 POD를 통하여 그 경향성을 파악하여 그 부피 혹은 면적이 최소가 되는 지점을 찾아낸다. 기본적인 방식으로 조건을 변화시킬 때 각 방향에 대한 기울기가 높은 지점을 찾아서 지속적으로 추출하여 최적 형상을 찾아낸다.

본 연구를 통해서 다른 여러 형상을 이와 같은 방식으로 최적의 형상을 빠르게 추출할 수 있다. 또한, 이 연구는 일상생활에서 사용되는 기계 요소의 재료를 적게 투입하는 연구에 기초자료가 될 것이다.

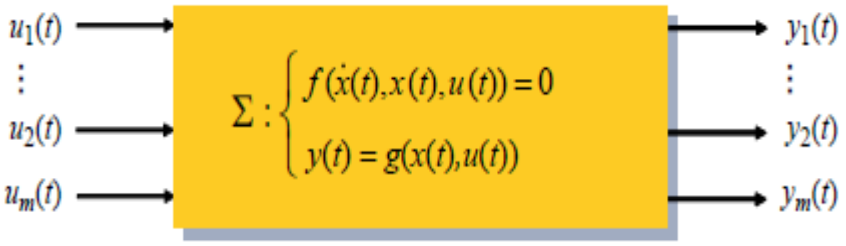

그림 3 입력 - 출력 시스템

담당 조교 : 김 의 영(takeme04@snu.ac.kr)