

# 다중벽 탄소나노튜브의 역학적 거동에 관한 멀티스케일 전산모사

박종연<sup>†</sup> · 조영삼<sup>\*</sup> · 김성엽<sup>\*</sup> · 임세영<sup>\*\*</sup>

## Multi-scale Simulation on the Mechanical Behavior of Multi-walled Carbon Nanotubes

Jong Youn Park, Young-Sam Cho, Sung Youb Kim and Seyoung Im

**Key Words :** Multi-walled carbon nanotubes(다중벽 탄소 나노튜브), Coarse-graining(거친날알만들기), Quasicontinuum method(준연속체 방법)

### Abstract

We present a coarse-graining model to describe the mechanical behaviors of multi-walled carbon nanotubes. To find the atomic configuration in membrane-like nanostructure i.e. carbon nanotube, we employ interpolation functions and the associated element-variables that are defined in the subdivided region. Tersoff-Brenner potential is adopted for interaction of bonded atoms and also van der Waals force for non-bonded interaction. Moreover, we simulate the coarse-graining multi-walled carbon nanotubes with defects and its result is compared with that of perfect multi-walled carbon nanotubes.

### 1. 서 론

1996년 제안된 Quasicontinuum 방법은[7] 코시-보른 법칙(Cauchy-Born rule)을 적용하여 풀고자 하는 영역의 모든 원자를 고려하지 않고도 계의 물리적 현상을 잘 규명하여 왔고[5,6] 방법론적 개선을 거듭하여 원자론적 관점에서 이음매 없이 연속체적 관점을 연결하는 방법이 제안되었다[4]. 그러나 Quasicontinuum 방법을 이용한 원자 수준의 현상 해석들은[4,5,6] 그 동안 금속 덩어리와 같은 벌크(bulk) 상태에서의 해석이 대부분이었고 최근 기존의 Quasicontinuum 방법의 코시-보른 법칙을 방법이 제안되어 탄소 나노튜브(CNT, Carbon Nanotube)와 같은 막 구조물에 대한 해석이 수행되었다[1]. 위 방법론은 다중벽 탄소 나노튜브(Multi-walled CNT)의 여러 역학적 거동을 전

산모사 하였지만 완전한 연속체에 근거한 이론으로 계 내의 결합, 원자들의 분리 및 재결합인 원자론적 특징을 해석 할 수 없었다. 본 연구에선 수정한 Quasicontinuum 방법이 거친 날알 만들기(coarse-graining)라는 기본 원칙에 근거하여, 일정 영역 내의 원자들의 거동을 표현하도록 선택한 보간 함수(interpolation function)로 원자들의 거동을 결정한다. 보간 함수가 선형 함수일 필요가 없으므로, 탄소나노튜브와 같은 구조를 표현하는데 매우 유용하다고 할 수 있다. 본 연구의 내용은 다음과 같다. 제 2 장에서는 새롭게 제시한 세분된 영역(subdivided region)에서의 고차 보간 함수(High order interpolation function)를 이용한 Quasicontinuum 방법론과 탄소 나노튜브의 해석을 위한 경험적 포텐셜을 제시하고, 제 3 장에서는 이 방법의 타당성을 보이기 위하여 단일벽(single walled) 탄소 나노튜브와 이중벽(double walled) 탄소 나노튜브의 굽힘을 수정한 Quasicontinuum 방법을 이용하여 해석하고 이 결과를 기존의 분자동역학 결과와 비교하였고 5 중벽(five walled) 탄소 나노튜브와 결합을 가지는 5 중벽 탄소 나노튜브의 굽힘 해석을 비교하였다. 마지막으로 제 4 장에서는 본 연구의 결론에 대

<sup>†</sup> KAIST 기계공학과 대학원  
E-mail : jy-park@kaist.ac.kr  
TEL : (042)869-3068 FAX : (02)869-3095

<sup>\*</sup> KAIST 기계공학과 대학원

<sup>\*\*</sup> KAIST 기계공학과

하여 논하였다.

## 2. 방법론

### 2.1 수정된 Quasicontinuum 방법

거친 낱알 만들기 영역에서의 에너지 계산은 대표 원자에서의 위치로 대표 원자가 아닌 원자들의 위치를 보간하여 계산하는 것이다. 그러나, Knap 과 Ortiz 가 사용한[3] 선형사면체 유한요소 형상함수(linear tetrahedral finite element shape function)를 사용하면, 탄소 나노튜브의 경우는 표현하기 힘들다. 그 이유는 탄소 나노튜브는 변형이 작더라도 곡률이 상당히 큰 이유로 선형 함수로는 표현하기 힘들기 때문이다. 본 연구에선 거친 낱알 만들기(coarse-graining) 영역을 적절한 개수의 세분된 영역으로 나누어, 각각의 세분영역에서 원자들의 위치를 허마이트 보간 함수(Hermite interpolation function)로 표현하였다. 허마이트 보간 함수의 계수들은 결국 세분 영역마다 정의되는 변수가 되고, 에너지를 그 변수들에 대해 최소화한다.

### 2.2 다중벽 탄소 나노튜브 해석을 위한 포텐셜

탄소 나노튜브가 만들어진 후 이의 원자적 전산모사를 위해 가장 많이 사용되는 원자간 경험적 포텐셜 함수는 Tersoff-Brenner 포텐셜이다. 탄소, 실리콘, 저마늄으로 이루어진 계의 성질(결합 길이, 결합 에너지 등등)을 나타내는 일반적인 형태의 경험적 포텐셜이 Tersoff 에 의해 제안되어졌고[8] 이후 Brenner 에 의해 탄소에 대해 보다 실제에 가까운 포텐셜로 수정되었다[2]. 이렇게 수정된 Tersoff-Brenner 포텐셜의 형태는 다음과 같다.

$$E_{ij} = f_c(r_{ij})[V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij}V_A(r_{ij})] \quad (1)$$

$$V_R(r_{ij}) = \frac{D_e}{S-1} e^{-\beta\sqrt{2S}(r_{ij}-r_e)} \quad (2)$$

$$V_A(r_{ij}) = \frac{SD_e}{S-1} e^{-\beta\sqrt{2/S}(r_{ij}-r_e)} \quad (3)$$

여기에서  $V_R(r_{ij})$  는 원자간 척력,  $V_A(r_{ij})$  는 인력에 해당하는 상호작용을 위한 항들이고,  $\bar{B}_{ij}$  는 결합각의 함수이며,  $f_c(r_{ij})$  는 컷오프 함수이다.  $D_e$ ,  $S$ ,  $\beta$  는 매개변수들이다. 다중벽 탄소나노튜브의 해석을 위해서 벽과 벽사이에 van der Waals 상호작용을 반드시 고려해야 하며[3] 본

연구에서 Lennard-Jones 형태의 포텐셜을 사용하였다.

## 3. 전산모사 결과

### 3.1 단일벽 탄소 나노튜브의 굽힘 해석

길이가 15nm 이고 chirality 가 (20,0) 인 단일벽 탄소나노튜브에 대해 굽힘전산모사를 하였다. 그림. 1 은 해석에 사용된 모델을 보여준다. 그림에서 붉은 색은 대표원자를 파란 색은 대표원자의 보간으로 구해지는 원자들이다. 아래의 모델에 대해 각 스텝에서 에너지를 최소로 하는 원자의 구성을 찾아 굽힘 각이 90 도 될 때 까지 전산 모사를 하였다. 그림.2 는 굽힘 각에 따른 변형에너지를 분자정역학의 결과와 비교하였다. 결과로부터 수정된 Quasicontinuum 방법은 모든 원자를 자유도로 하는 분자정역학 방법과 매우 가까운 값을 줄 수 있다.

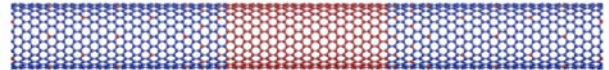


Fig. 1 Model for bending simulation of SWCNT

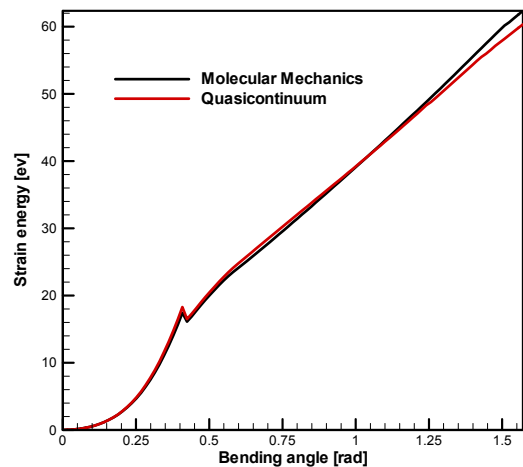


Fig. 2 Comparison of strain energy with respect to Bending angle

3.2 이중벽 탄소 나노튜브의 굽힘 해석

이중벽 탄소 나노튜브의 굽힘 해석에 사용된 모델의 단면은 그림. 3 과 같다. Chirality 가 각각 (20,0), (12,0)이고 길이는 15nm 이다. 그림에서 붉은 색은 대표원자를 파란색은 대표원자의 보간으로 구해지는 원자들을 나타낸다. 그림. 3의 모델을 굽힘 전산모사하여 얻은 변형 에너지를 분자정역학으로 얻은 결과와 비교하였다. 그림. 4 에서처럼 분자정역학으로 얻은 결과와 매우 잘 일치한다.

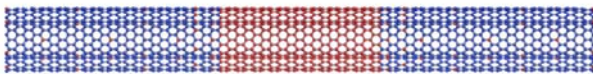


Fig. 3 Cross section of Model for bending Simulation of DWCNT

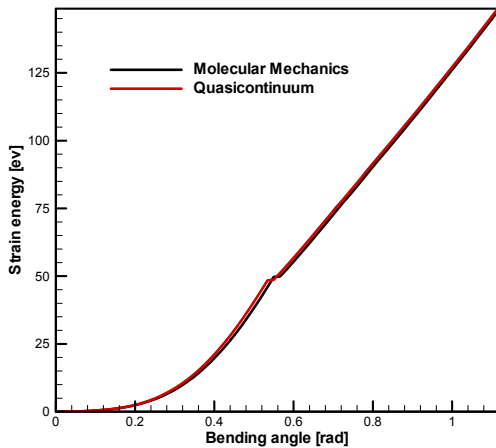


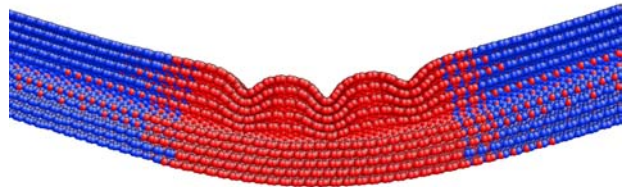
Fig. 4 Comparison of strain energy with respect to Bending angle

3.3 다중벽 탄소 나노튜브의 굽힘 해석

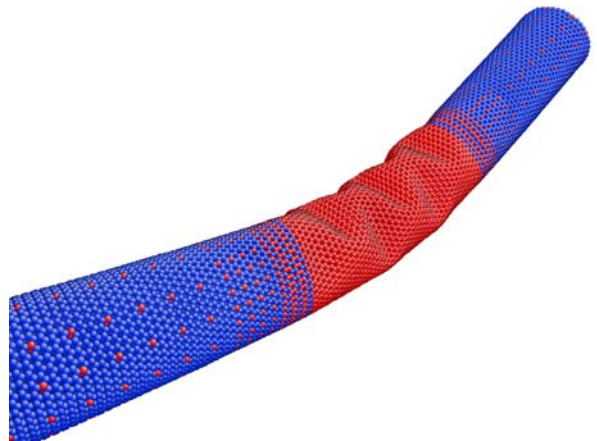
Chirality 가 각각 (9,0), (18,0), (27,0), (36,0), (45,0) 로 이루어진 다중벽 탄소 나노튜브에 대한 굽힘 전산모사를 하였다. 다중벽의 튜브길이는 28nm 이다. 그림. 5(a) 는 5 층으로 이루어진 탄소 나노튜브의 단면을 보여 준다. 붉은 색은 대표원자를 나타낸다. 그림. 5(b) 는 굽힘각 35 도 에서의 변형 형상을 단면으로 보여주고 그림. 5(c)는 변형된 튜브의 외형을 나타낸다. 다중벽 탄소 나노튜브의 굽힘에서는 여러 개의 입체적인 kink 가 발생함을 알 수 있다.



(a) Cross section of 5WCNT for bending simulation



(b) Cross section of deformed configurations on bending angle 35°



(c) Deformed configurations and shape of kink

Fig. 5 Model for bending simulation 5WCNT and deformed configurations

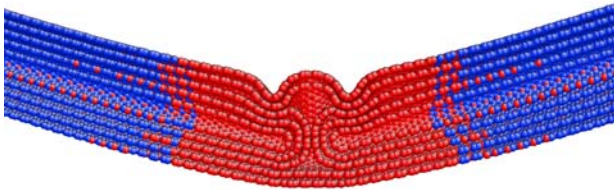
3.4 결함을 가지는 다중벽 탄소 나노튜브의 굽힘 해석

Chirality 가 각각 (9,0), (18,0), (27,0), (36,0), (45,0) 로 이루어진 다중벽 탄소 나노튜브에 대한 굽힘 전산모사를 하였다. 앞의 예제와는 달리 안쪽 세 개의 탄소 나노 튜브에 대해 결함을 지니게 하였다. 결함의 형태는 5-7-7-5 결함이며 탄소 나노튜브의 구조인 육각형 구조가 깨어진 형태를 가진다. 다중벽의 튜브길이는 28nm 이다. 그림. 6(a) 는 결함을 가지고 5 층으로 이루어진 탄소 나노튜브의 단면을 보여 준다. 붉은 색은 대표원자를 나타낸다. 그림. 6(b) 는 굽힘각 35 도 에서의 변형 형상을 단면으로 보여주고 그림. 6(c)는 변형된 튜브의 외형을 나타낸다. 안쪽의 결함으로 인해 앞의 예제의 다중벽 탄소 나노튜브와 다른 형태의 변형 형상을 보여준다. 특히 kink 의 개수가

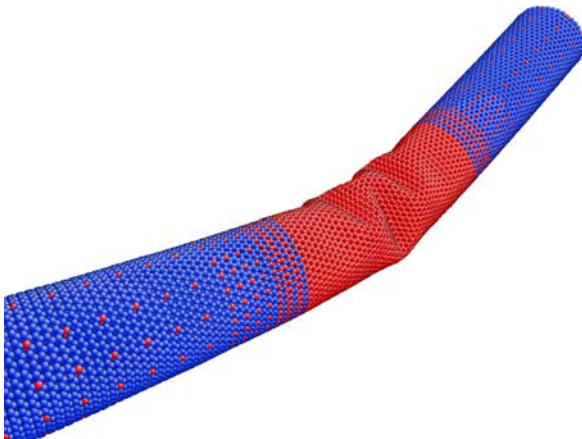
작으며 외부의 벽이 밖으로 돌출 됨을 알 수 있다.



(a) Cross section of defected 5WCNT for bending simulation



(b) Cross section of deformed configurations on bending angle  $35^\circ$



(c) Deformed configurations and shape of kink

**Fig. 6** Model for bending simulation defected 5WCNT and deformed configurations

#### 4. 결 론

본 연구에서 제안한 방법은 단일벽, 이중벽, 다중벽 탄소나노튜브 그리고 특히 결함을 가지는 다중벽 탄소나노튜브의 굽힘 전산모사결과를 보아 알 수 있듯이 탄소나노튜브와 같은 막 구조물에서 기존의 방법들보다 보다 효율적이고 정확한 결과를 얻을 수 있다.

#### 후 기

본 연구는 나노핵심기반기술개발사업(M1-0213-04-0003)을 통한 과학기술부의 지원을 받아 수행되었습니다. 여기에 후기를 입력하시오

#### 참고문헌

- (1) Arroyo M., Belytschko T., 2002, "An atomistic – based finite deformation membrane of single layer crystalline films," *J. Mech. Phys. Solids.*, Vol. 50, pp. 1941-1977.
- (2) Brenner D. W., 1990, "Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films," *Phys. Rev. B*, Vol. 42, pp.9458-9471.
- (3) Iijima S., Brabec C., Maiti A., Bernholc J., 1996, "Structural flexibility of carbon nanotubes," *J. Chem. Phys.*, Vol.104, pp.2089-2092.
- (4) Knap J., Ortiz M., 2001, "An analysis of the quasicontinuum method," *J. Mech. Phys. Solids.*, Vol. 49, pp. 1899-1923.
- (5) Shenoy V. B., Miller R., Tadmor, E. B., Phillips, R., Ortiz, M., 1998, "An adaptive finite element approach to atomic-scale mechanics—the quasicontinuum method," *J. Mech. Phys. Solids.*, Vol. 47, pp. 661-642.
- (6) Tadmor E. B., Miller R., Phillips R., Ortiz M., 1998, "Nanoindentation and incipient plasticity," *J. Mater. Res.*, Vol. 14, pp. 2233-2250.
- (7) Tadmor E. B., Ortiz M., Phillips, R., 1996, "Quasicontinuum analysis of defects in solids," *Philos. Mag.* Vol. 73, pp. 1529-1563
- (8) Tersoff J., 1988, "Empirical interatomic potential for carbon, with applications to amorphous carbon," *Phys. Rev. Lett.*, Vol.61, pp.2879-2882.