

< 논문 >

## 탄소나노튜브 다발의 압축 및 비틀림 좌굴 거동

정 병 우\* · 임 장 근\*

(2007년 1월 30일 접수, 2007년 7월 12일 심사완료)

### Compressive and Torsional Buckling Behavior of Carbon Nanotube Bundles

Byeong-Woo Jeong and Jang-Keun Lim

**Key Words:** Buckling(좌굴), Compression(압축), Torsion(비틀림), Molecular Dynamics Simulation (분자동역학 전산모사), Single-Walled Carbon Nanotube(단일벽 탄소나노튜브), Carbon Nanotube Bundle(탄소나노튜브 다발)

#### Abstract

The compressive and torsional buckling behavior of carbon nanotube bundles at room temperature is examined with classical molecular dynamics simulation. The critical compressive load and stiffness of a single carbon nanotube in the bundle are found to be similar to those of individual carbon nanotubes. However, the critical torsional moment and stiffness of a single carbon nanotube in the bundle are found to be higher than those of individual carbon nanotubes. In addition, this study demonstrates that van der Waals interactions between the nanotubes in the bundle significantly affect the critical compressive load of the nanotube bundle.

#### 1. 서 론

1991년에 Iijima<sup>(1)</sup>에 의해서 탄소나노튜브(carbon nanotube)가 발견된 이래 탄소나노튜브의 전기적인, 화학적인 그리고 기계적인 특성에 대한 많은 실험과 이론적인 연구가 이루어져 왔다. 탄소나노튜브의 우수한 물성은 많은 실험과 이론에 의해서 입증되었으며, 이러한 우수한 물성으로 탄소나노튜브는 급속하게 성장하고 있는 나노기술에서 중요한 부분을 차지하게 되었다. 탄소나노튜브는 나노전자기계장치(NEMS), 화학적인 센서 및 나노복합재료(nanocomposite material)등에 응용될 수 있는 것으로 제안 되어 왔다.

탄소나노튜브의 응용을 위해서는 탄소나노튜브

의 물성을 이해하는 것이 필요하며, 실험적인 방법으로 나노 크기 탄소나노튜브의 물성을 이해하기에는 많은 어려움이 있을 수밖에 없다. 따라서 이론적인 방법으로 탄소나노튜브의 물성을 이해하는 것은 중요하며, 이러한 노력이 몇몇 연구자들에 의해서 수행되어 왔다.<sup>(2-5)</sup> Yakobson<sup>(2,3)</sup>은 분자동역학 전산모사(molecular dynamics simulation) 방법을 이용하여 탄소나노튜브의 역학적인 거동을 분석하였으며, Lu<sup>(4)</sup>는 이론적인 방법에 의하여 탄소나노튜브의 탄성 특성을 분석하였다. 또한, Pantano<sup>(5)</sup>는 연속체역학 이론에 근거한 유한요소 해석 방법으로 탄소나노튜브의 역학적 거동을 분석하였다. 이러한 이론적인 방법 중에서 분자동역학 전산모사 방법은 나노재료<sup>(6)</sup> 및 탄소나노튜브<sup>(7)</sup>의 역학적 거동을 분석하기 위하여 중요하게 사용되어 왔다.

많은 경우에 탄소나노튜브는 van der Waals interaction에 의해서 다발(bundle)의 형태로 묶여져

† 책임저자, 회원, 한양대학교 대학원 기계설계과

E-mail : bwoojeong@gmail.com

TEL : (02)2294-1869 FAX : (02)2294-1869

\* 회원, 한양대학교 기계설계과

있다.<sup>(8)</sup> 이러한 탄소나노튜브 다발(carbon nanotube bundle)은 나노복합재료의 보강 섬유 등을 포함하는 여러 장치 및 재료에 응용될 수 있는 것으로 제안되어 왔다. 이러한 장치 및 재료 등에 탄소나노튜브 다발을 응용하기 위해서는 우선적으로 탄소나노튜브 다발의 역학적인 특성이 규명되어야 한다. 그러나 탄소나노튜브의 역학적인 거동에 대한 그동안의 연구는 주로 단일벽(single-walled) 및 다중벽(multi-walled) 탄소나노튜브에 집중해 왔으며, 탄소나노튜브 다발에 대한 역학적인 특성의 규명에 대한 연구결과는 아직까지 미미하므로 이에 대한 연구가 필요하다.

본 논문에서는 4개의 단일벽 탄소나노튜브로 묶여진 9.5 nm 길이의 탄소나노튜브 다발과 3개의 단일벽 탄소나노튜브로 묶여진 20 nm 길이의 탄소나노튜브 다발에 대하여 압축 좌굴 특성과 비틀림 좌굴 특성을 분자동역학 전산모사 방법을 사용하여 규명하였다. 또한, 각각의 단일벽 탄소나노튜브의 압축 및 비틀림 좌굴 특성을 해석하여 탄소나노튜브 다발의 좌굴 특성과 비교를 하였으며, van der Waals interaction이 탄소나노튜브의 압축 좌굴 특성에 주는 영향을 규명하기 위하여 van der Waals interaction을 제거한 경우에 대하여 압축 변형 해석을 수행하였다. 본 논문의 구성은 서론에 이어서 2장에서는 탄소나노튜브 다발의 구조와 분자동역학 전산모사 방법에 대하여 기술하고 본 논문에서 적용된 세부적인 분자동역학 전산모사 절차에 대하여 기술하였다. 3장에서는 본 논문의 연구결과를 기술하고 고찰하였으며, 마지막으로 4장에서는 본 논문의 결론을 수록하였다.

## 2. 전산모사 절차

### 2.1 탄소나노튜브 다발 및 분자동역학 방법

탄소나노튜브는 흑연면(graphite sheet)이 나노 크기의 직경으로 둥글게 말린 상태이며, Fig. 1에서와 같이 Zigzag와 Armchair 라고 알려진 두 개의 대칭구조와 Chiral 구조가 가능하다. 각각의 튜브 구조를 분류하는 간단한 방법은 흑연면 격자위의 두 점을 연결하는 벡터  $Ch$ 로 표시한다. 실린더는 이 벡터의 두 끝점이 만나도록 평면을 말아 올린 것이다. Fig. 1에서 정수 짝( $n, m$ )은 탄

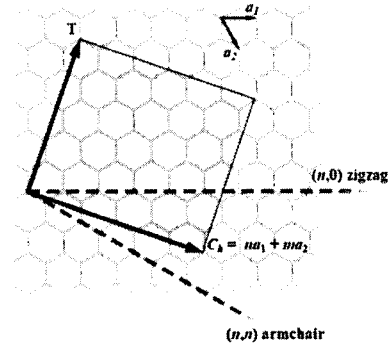


Fig. 1 Flat hexagon lattices of a graphite sheet about zigzag and armchair

소나노튜브가 만들어지는 가능한 구조를 나타낸다. 그러므로  $n$ 과  $m$ 으로 Chiral 벡터  $Ch$ 를  $Ch = na_1 + ma_2$ 와 같이 표시할 수 있다. 여기서  $a_1$ 과  $a_2$ 는 흑연면의 단위세포(unit cell) 기본벡터이며,  $n \geq m$ 이다. Zigzag 튜브는  $m=0$ 이며, Armchair 튜브는  $n=m$ 의 값을 갖는다. 위의 조건과 다른 튜브들은 Chiral이다. 탄소나노튜브 다발은 이러한 탄소나노튜브들이 van der Waals interaction에 의해서 다발 형태로 묶여져 있는 형상이다.

분자동역학 전산모사 방법은 시간에 따른 원자 입자의 운동을 예측하기 위한 방법으로 입자의 운동은 Newton의 운동방정식에 따른다. 이러한 해석을 위해서는 시간과 시간에 따른 입자의 위치에 대한 관계를 알아야 하며, 이것은 에너지 보존법칙과 포텐셜 에너지와 하중과의 관계에 의해서 구할 수 있다. 다음의 식 (1)은 하중과 포텐셜 에너지의 관계식을 보여주고 있으며,  $r_{ij,k}$ 는  $i$ 와  $j$  입자 사이의 거리의  $k$  성분이며,  $PE$ 는 포텐셜 에너지이다.

$$F_{ij,k} = - \left( \frac{\partial PE}{\partial r_{ij,k}} \right) \quad (1)$$

분자동역학 방법의 일반적인 절차는 Fig. 2와 같다. 입자의 초기 벡터 성분이 정의 되는 초기 시작 단계(initialization)와 초기 상태 시스템의 총 에너지를 계산하는 최소화 단계 후에 수치적분 방법의 Prediction 부분에 의해서 다음 시간 단계에서의 입자의 벡터 성분이 예측된다. 입자 사이

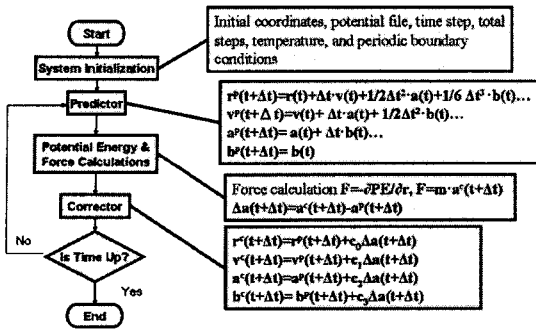


Fig. 2 General flow chart for classical MD (Molecular Dynamics) simulation

의 포텐셜 에너지와 하중은 예측되는 입자의 벡터에서 계산되며, 온도가 조절되는 시스템에서는 Langevin Thermostat 같은<sup>9)</sup> 방법에 의해서 입자의 속도와 가속도 성분이 조절된다. 하중으로부터 계산되는 가속도 성분은 Prediction 으로부터 예측되는 가속도 성분과는 다르므로 Correction 알고리즘에 의해서 입자의 벡터 성분이 수정된다.

## 2.2 세부 전산모사 방법

본 논문에서는 나노재료 및 구조의 특성 규명을 위하여 사용되던 기존의 REBO MD 프로그램<sup>10)</sup> 부분적으로 수정하여 탄소나노튜브 다발의 압축 및 비틀림 해석을 수행하였다. REBO MD 프로그램은<sup>10)</sup> 시간에 따른 탄소 원자의 움직임을 확인하기 위하여 Newton의 운동방정식을 3차 Nordsieck Predictor-corrector<sup>9)</sup> 알고리즘을 사용하여 수치적분을 수행하도록 되어 있다. 본 논문에서는 수치적분을 위하여 0.2 fs의 시간 간격(time step)을 사용하였다. 분자동역학 전산모사를 정확히 수행하기 위해서는 적절한 포텐셜 함수의 선택이 중요하다. 본 논문에서 사용된 REBO MD 프로그램에서는 Brenner's Reactive Empirical Bond-order (REBO) 포텐셜을<sup>11)</sup> 적용하고 있는데, REBO 포텐셜은 실제적으로 탄소나노튜브의 공유결합을 잘 묘사하여 주는 것으로 알려져 있다. REBO 포텐셜의 정의는 식 (2)와 같으며,  $V^R(r)$ 은 반발력(repulsive force)에 대한 항이고  $V^A(r)$ 은 인력(attractive force)에 대한 항이다.  $b_{ij}$ 는 원자 사이의 Reactive Empirical Bond Order 항이다.

$$E_{ij}^{REBO} = V^R(r_{ij}) - b_{ij} V^A(r_{ij}) \quad (2)$$

식 (2)는 공유결합 길이 내에서 적용되며, 공유결합 길이 이상에서는 van der Waals interaction이 작용되게 되는데 이러한 부분은 Lennard-Jones (12,6) 포텐셜의 형태로 REBO MD 프로그램에<sup>10)</sup> 포함되어 있다. 식 (3)은 Lennard-Jones (12,6) 포텐셜의 정의를 보여주고 있는 것으로  $\xi$ 와  $\sigma_{ij}$ 는 Lennard-Jones 포텐셜의 매개변수이다.

$$E_{ij}^{LJ} = 4\xi \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right] \quad (3)$$

본 논문에서는 (05,05)와 (10,10) 단일벽 탄소나노튜브와 이러한 단일벽 탄소나노튜브가 Fig. 3에서와 같이 van der Waals interaction에 의해서 묶여진 탄소나노튜브 다발을 전산모사 시스템으로 사용하였다. Fig. 3은 본 논문에서 사용된 4개와 3개의 단일벽 탄소나노튜브로 묶여진 탄소나노튜브 다발의 단면 형상을 보여주고 있는 것으로 각각의 탄소나노튜브 사이의 간격은 0.34 nm이다. 이 값은 일반적으로 탄소나노튜브 다발에서 측정되는 값으로서 흑연면(graphene layer) 사이의 거리와 같다.<sup>4,8)</sup> 압축 변형 해석을 위해서는 9.5 nm 길이의 (10,10) 단일벽 탄소나노튜브가 Fig. 3의 (a)에서와 같이 4개로 묶여진 탄소나노튜브 다발을 사용하였고, 비틀림 변형 해석을 위해서는 20 nm 길이의 (05,05) 단일벽 탄소나노튜브가 Fig. 3의 (b)에서와 같이 3개로 묶여진 탄소나노튜브 다발을 사용하였다.

탄소나노튜브의 평형(equilibration) 상태 구조는 300K에서 Langevin Thermostat<sup>9)</sup> 방법을 사용하여 1,000,000 시간간격(time step) 동안 전산모사를 수행하여 얻었다.<sup>12)</sup> 이렇게 얻은 탄소나노튜브 평형구조에 압축 및 비틀림 변형을 주기 위하여 일정하게 증가하는 압축 및 비틀림 모멘트를 부과하여 해석을 수행하였다. 전산모사에 사용된 탄소나노튜브는 분자동역학 전산모사를 위하여 3부분으로 나누어서 시스템을 모델링 하였다. 압축 하중과 비틀림 모멘트의 부하는 탄소나노튜브의 한쪽 부분에서 부과되며, 다른 한쪽은 고정되어진다. 그리고 압축 변위와 비틀림 변위는 분자동역학 전산모사 프로그램으로부터 계산된다. 이렇게 하중이 부과되는 실제 전산모사 과정에서는 Velocity rescaling 방법을 사용하여 온도를 300K로 일정하게 유지하였다. 이러한 Velocity-rescaling

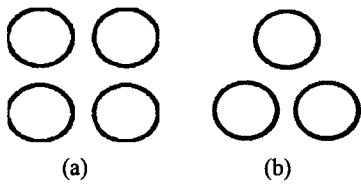


Fig. 3 Schematic cross-sectional view of (a) a bundle of four carbon nanotubes and (b) a bundle of three carbon nanotubes

방법은 탄소나노튜브의 역학적 거동에 영향을 주지 않으면서 온도를 일정하게 유지시켜 줄 수 있는 방법으로 알려져 있다.<sup>(10)</sup>

### 3. 결과 및 고찰

#### 3.1 압축 변형

압축 변형 해석에서는 종횡비(aspect ratio)가 약 7.0인 9.5 nm 길이의 (10,10) 단일벽 탄소나노튜브와 동일한 4개의 (10,10) 단일벽 탄소나노튜브가 van der Waals interaction에 의해서 묶여진 탄소나노튜브 다발이 전산모사를 위한 탄소나노튜브 시스템으로 사용되었다. Fig. 4는 압축 하중과 압축 변위의 관계를 보여주고 있는 것으로 Fig. 4에서 볼 수 있는 바와 같이 탄소나노튜브 다발의 임계하중이 단일벽 탄소나노튜브에 비해서 월등히 높은 것을 알 수 있다. 단일벽 탄소나노튜브의 경우에 임계하중은 약 62 nN으로 0.38 nm의 압축 변위에서 전체 좌굴이 일어나고 있으며, 탄소나노튜브 다발의 경우에는 임계하중이 약 246 nN으로 약 0.38 nm의 압축 변위에서 전체 좌굴이 일어나고 있다. 탄소나노튜브 다발의 경우에 4개의 탄소나노튜브로 묶여져 있으므로 각각의 탄소나노튜브에 대한 임계하중으로 계산하면 약 61.5 nN으로 단일벽 탄소나노튜브의 임계하중과 거의 유사한 값을 보여주고 있다.<sup>(13)</sup> 그러나 압축 변형률은 탄소나노튜브 다발과 단일벽 탄소나노튜브 모두에서 약 0.04로서 둘 사이에 차이를 보여주고 있지 않다.<sup>(13)</sup>

Fig. 4는 임계 압축하중 외에 압축하중과 압축 변위 사이의 기울기도 보여주고 있는데 이 값은 압축강성도(compressive stiffness)이며,  $K=F/\Delta L$ 로 표현된다.  $K$ 는 압축강성도를 의미하며,  $F$ 는 압축하중을  $\Delta L$ 는 압축변위를 의미한다. Fig. 4에서와

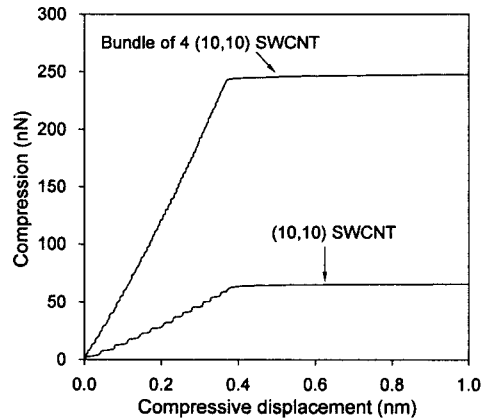


Fig. 4 Axial compressive force versus axial compressive displacement curves

같이 탄소나노튜브 다발의 압축강성도가 단일벽 탄소나노튜브의 압축강성도에 비해서 월등히 높은 것을 보여주고 있다. 단일벽 탄소나노튜브의 경우에 압축강성도는 약 164 nN/nm이고, 탄소나노튜브 다발의 경우에는 압축강성도가 약 660 nN/nm이다. 탄소나노튜브 다발에 묶여져 있는 각각의 탄소나노튜브에 대한 압축강성도로 계산하면 약 165 nN/nm로 단일벽 탄소나노튜브의 압축강성도와 거의 유사한 값을 보여주고 있다.

이러한 결과들로부터 탄소나노튜브 다발의 전체 임계 압축하중과 압축강성도는 단일벽 탄소나노튜브의 임계 압축하중과 압축강성도에 탄소나노튜브 다발에 포함된 탄소나노튜브의 개수를 단순히 곱함으로써 구할 수 있을 것으로 판단된다. 그러나 단일벽 탄소나노튜브의 종횡비(aspect ratio)에 따르는 좌굴 거동은 종횡비가 약 10 이하에서는 쉘 좌굴이 일어나고 그 이상에서는 보의 형 좌굴 현상이 일어나는 것으로 알려져 있다.<sup>(2)</sup> 따라서, 본 압축변형 해석의 결과는 쉘 좌굴이 일어나는 종횡비의 범위 내에서 적용될 수 있을 것으로 판단된다.<sup>(13)</sup>

Fig. 5는 단일벽 탄소나노튜브의 전체 압축좌굴 후에 변형된 형상을 보여주고 있으며, Fig. 6은 탄소나노튜브 다발의 전체 압축좌굴 전과 후에 변형된 형상을 보여주고 있다. Fig. 6에서 볼 수 있는 바와 같이 탄소나노튜브 다발에 있는 각각의 탄소나노튜브에서 압축좌굴이 일어나면서 탄소나노튜브 다발에 전체 압축좌굴이 일어나는 것을 확인할 수 있다.<sup>(13)</sup>



Fig. 5 Simulation snapshot of a (10,10) SWCNT buckled by compression

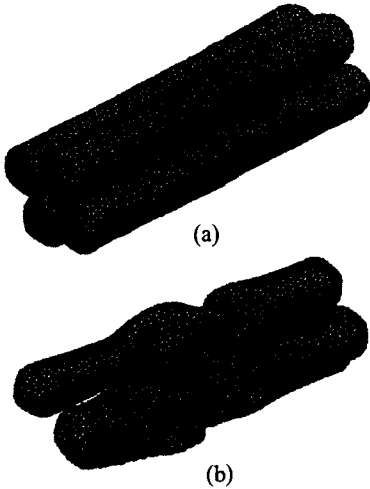


Fig. 6 Simulation snapshots of a bundle of four (10,10) SWCNTs. (a) Before compressive buckling (b) After compressive buckling

### 3.2 비틀림 변형

실험적인 방법의 어려움 때문에 탄소나노튜브의 비틀림 특성에 대한 실험적인 연구는 아직까지 미미하다. 따라서 이론적인 방법에 의한 전산 모사 방법으로 탄소나노튜브의 비틀림 특성을 규명하고자 하는 노력이 필요하며, 본 비틀림 변형 해석에서는 3개의 (05,05) 단일벽 탄소나노튜브가 van der Waals interaction에 의해서 묶여져 있는 탄소나노튜브 다발과 (05,05) 단일벽 탄소나노튜브에 대해서 비틀림 변형 해석을 수행하였다.

Fig. 7은 비틀림 모멘트(torsional moment)와 비틀림 각(torsional angle)의 관계를 보여주고 있는 것으로 Fig. 7에서 볼 수 있는 바와 같이 탄소나노튜브 다발의 임계 비틀림 모멘트가 단일벽 탄소나노튜브에 비해서 월등히 높은 것을 알 수 있다. 단일벽 탄소나노튜브의 경우에 임계 비틀림 모멘트는 약 7.55 nN-nm로 5.16 rad의 비틀림 각에서 전체 좌굴이 일어나고 있으며, 탄소나노튜브 다발의 경우에는 임계 비틀림 모멘트가 약 25.6 nN-nm로 약 5.88 rad의 비틀림 각에서 전체 좌굴이 일어나고 있다. 탄소나노튜브 다발의 경

우에 3개의 단일벽 탄소나노튜브로 묶여져 있으므로 각각의 탄소나노튜브에 대한 임계 비틀림 모멘트로 계산하면 약 8.53 nN-nm로 단일벽 탄소나노튜브의 임계 비틀림 모멘트에 비해서 높은 값을 보여주고 있다. 그러므로 이러한 결과로부터 탄소나노튜브 다발에 묶여져 있는 각각의 탄소나노튜브의 임계 비틀림 모멘트는 단일벽 탄소나노튜브의 임계 비틀림 모멘트 보다 큰 것을 확인할 수 있다. 이러한 결과는 9.5 nm 길이의 (10,10) 단일벽 탄소나노튜브가 4개로 묶여진 탄소나노튜브 다발에 대한 이전의 비틀림 해석 결과와 유사하다.<sup>(14)</sup>

그러나 탄소나노튜브 다발의 비틀림 변형 거동을 단일벽 탄소나노튜브의 비틀림 변형과 직접적으로 비교하기에는 압축 변형이나 인장 변형에 비해서 어려운 점이 있다. 압축변형이나 인장 변형의 경우에 탄소나노튜브 다발에 묶여져 있는 각각의 탄소나노튜브의 압축좌굴이나 인장파괴가 단일벽 탄소나노튜브의 압축좌굴이나 인장파괴와 유사한 거동을 하고 있다. 이러한 유사한 거동은 탄소나노튜브 다발에 묶여져 있는 각각의 탄소나노튜브에 작용하는 압축하중이나 인장하중 같은 하중벡터(force vector)가 단일벽 탄소나노튜브에 작용되는 하중벡터와 동일 선상에 있기 때문이다. 그러나 비틀림 변형의 경우에 탄소나노튜브 다발에 묶여져 있는 각각의 탄소나노튜브에 작용하는 비틀림 모멘트 벡터(torsional moment vector)는 단일벽 탄소나노튜브에 작용하는 비틀림 모멘트 벡터와 동일선상에 있지 않다. 따라서 단일벽 탄소나노튜브의 비틀림 변형 형상은 일반적인 튜브의 비틀림 변형 형상과 유사하나 탄소나노튜브 다발의 비틀림 변형 형상은 일반적인 로프(rope)와 유사하다.

Fig. 7은 임계 비틀림 모멘트 외에 비틀림 모멘트와 비틀림 각 사이의 기울기도 보여주고 있는데 이 값은 비틀림 강성도(torsional stiffness)이며,  $K=T/\theta$ 로 표현된다.  $K$ 는 비틀림 강성도를 의미하며,  $T$ 는 비틀림 모멘트를  $\theta$ 는 비틀림 각을 의미한다. Fig. 7에서와 같이 탄소나노튜브 다발의 비틀림 강성도가 단일벽 탄소나노튜브의 비틀림 강성도에 비해서 월등히 높은 것을 보여주고 있다. 단일벽 탄소나노튜브의 경우에 비틀림 강성도는 약 1.54 nN-nm/rad이고, 탄소나노튜브 다발의 경우에는 비틀림 강성도가 약 5.08 nN-nm

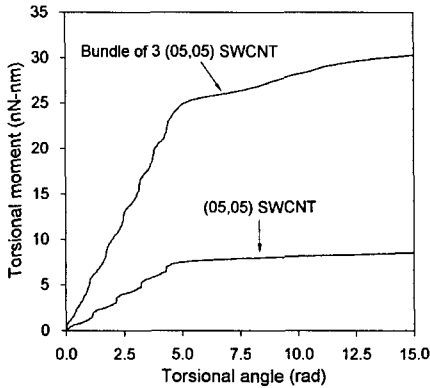


Fig. 7 Torsion versus torsional angle curves of a bundle of three (05,05) SWCNTs and a (05,05) SWCNT

/rad이다. 탄소나노튜브 다발의 경우에 3개의 단일벽 탄소나노튜브로 묶여져 있으므로 각각의 탄소나노튜브에 대한 비틀림 강성도로 계산하면 1.69 nN·nm/rad로 단일벽 탄소나노튜브의 비틀림 강성도에 비해서 높은 값을 보여주고 있다. 이러한 결과는 9.5 nm 길이의 (10,10) 단일벽 탄소나노튜브가 4개로 묶여진 탄소나노튜브 다발에 대한 이전의 비틀림 해석 결과와 유사하다.<sup>(14)</sup>

Fig. 8은 단일벽 탄소나노튜브의 전체 비틀림 좌굴 후에 형상을 보여주고 있으며, Fig. 9는 탄소나노튜브 다발의 전체 비틀림 좌굴 전과 후의 형상을 보여주고 있다. Fig. 9에서 볼 수 있는 바와 같이 탄소나노튜브 다발의 비틀림 변형형상은 일반적인 로프의 형상과 유사하다. 일반적으로 로프는 다발의 형태보다 보다 우수한 기계적 특성을 가지고 있는 것으로 알려져 있으므로 Fig. 9(a)에서와 같이 비틀림 좌굴이 일어나기 전까지 탄소나노튜브 다발에 비틀림 모멘트를 작용시킨다면 탄소나노튜브 다발을 이용하여 탄소나노튜브 로프를 만들 수 있을 것으로 기대된다.

### 3.3 van der Waals interaction의 영향

탄소나노튜브 다발은 van der Waals interaction에 의해서 묶여 있으며, 이러한 interaction은 본 논문의 REBO 분자동역학 전산모사 프로그램에서 Lennard Jones 포텐셜로서 포함되어 있다. van der Waals interaction에 의해서 두 탄소 입자 사이에 작용되는 힘은 식 (3)의 Lennard Jones 포텐셜을



Fig. 8 Simulation snapshot of a (05,05) SWCNT buckled by torsion

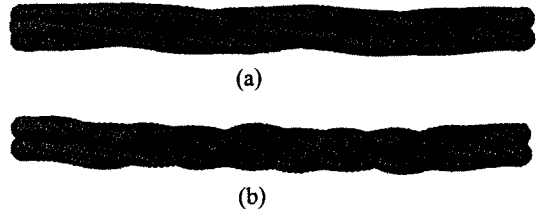


Fig. 9 Simulation snapshots of a bundle of three (05,05) SWCNTs.

(a) Before torsional buckling (b) After torsional buckling

식 (1)과 같이 미분함으로써 얻어질 수 있으며, 아래의 식 (4)와 같이 표현된다.  $r$ 은 두 탄소 입자 사이의 거리이고  $\xi$ 와  $\sigma_{ij}$ 는 Lennard-Jones 포텐셜의 매개변수로서 0.426 kJ/mol과 0.228 nm의 값을 갖는다.

$$F_{ij} = -\left(\frac{dE_{ij}^{LJ}}{dr}\right) = \frac{24\xi}{\sigma_{ij}} \left[ 2\left(\frac{\sigma_{ij}}{r}\right)^{13} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r}\right)^7 \right] \quad (4)$$

탄소나노튜브 다발에서 이러한 van der Waals interaction의 영향을 규명하기 위하여 본 논문에서는 3.1절에 사용되었던 4개의 (10,10) 단일벽 탄소나노튜브가 묶여진 탄소나노튜브 다발에 대하여 분자동역학 전산모사 프로그램안의 van der Waals interaction을 제거하여 압축 변형 해석을 수행하였다. 이러한 결과를 van der Waals interaction이 있을 경우의 결과와 비교를 하였으며, Fig. 10은 그 결과를 보여주고 있다. Fig. 10에서와 같이 van der Waals interaction이 없는 경우에 압축좌굴하중이 van der Waals interaction이 있는 경우에 비해서 작게 되는 것을 확인할 수 있다. 본 논문의 3.1절에서 기술되었던 바와 같이 van der Waals interaction이 있을 경우에 압축좌굴 하중은 약 246 nN인데 비해 van der Waals interaction이 없을 경우에 압축좌굴하중은 약 234 nN로 약 4.8% 감소된다. 좌굴시 압축 변위 또한 약 0.38 nm에서 약 0.35 nm로 감소된다. 이러한 결과로부터 탄소나노튜브 다발에서 다발을 형성

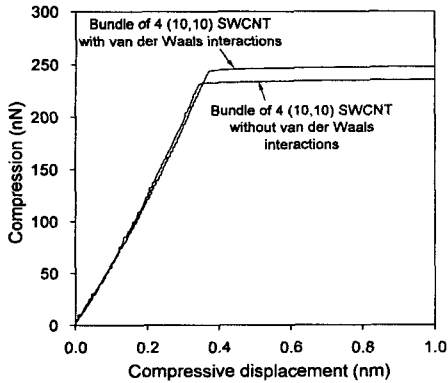


Fig. 10 Axial compressive force versus axial compressive displacement curves of a bundle of four (10,10) SWCNTs with and without van der Waals interactions

하는 van der Waals interaction이 탄소나노튜브 다발의 전체 압축좌굴하중에 중요한 영향을 미치는 것을 확인할 수 있다.

#### 4. 결 론

본 논문에서는 4개의 단일벽 탄소나노튜브로 묶여진 9.5 nm 길이의 탄소나노튜브 다발과 3개의 단일벽 탄소나노튜브로 묶여진 20 nm 길이의 탄소나노튜브 다발에 대하여 압축 좌굴 특성과 비틀림 좌굴 특성을 분자동역학 전산모사 방법을 사용하여 규명하였다.

압축 변형 해석의 경우에 탄소나노튜브 다발에 묶여져 있는 각각의 탄소나노튜브에 대한 임계 압축하중 및 압축강성도는 단일벽 탄소나노튜브의 임계 압축하중 및 압축강성도와 거의 유사한 값을 보여주었다. 이러한 결과로부터 탄소나노튜브 다발의 전체 임계 압축하중 및 압축강성도는 단일벽 탄소나노튜브의 임계 압축하중 및 압축강성도에 탄소나노튜브 다발에 포함된 탄소나노튜브의 개수를 단순히 곱함으로써 구할 수 있을 것으로 판단된다. 그러나 사용된 탄소나노튜브의 종횡비가 쉘 좌굴이 일어나는 범위 내에 있으므로 이러한 결과는 쉘 좌굴이 일어나는 종횡비의 범위 내에서 적용될 수 있을 것이다.

비틀림 변형 해석의 경우에 탄소나노튜브에 묶여져 있는 각각의 탄소나노튜브에 대한 임계 비틀림 모멘트 및 비틀림 강성도는 단일벽 탄소나

노튜브의 임계 비틀림 모멘트 및 비틀림 강성도에 비해서 높은 값을 보여주었다. 또한, 비틀림 모멘트를 받고 있는 탄소나노튜브 다발의 비틀림 변형 형상은 일반적인 로프의 형상과 유사한 것을 확인하였다.

탄소나노튜브 다발에 van der Waals interaction이 없는 경우에 임계 압축하중이 van der Waals interaction이 있는 경우에 비해서 약 4.8% 감소되었다. 이러한 결과로부터 탄소나노튜브 다발에서 다발을 형성하는 van der Waals interaction이 탄소나노튜브 다발의 전체 임계 압축하중에 중요한 영향을 미치는 것을 확인할 수 있었다.

#### 후 기

본 논문의 내용과 관련하여 많은 조언과 도움을 주신 University of Florida의 Susan B. Sinnott 교수님께 감사드립니다.

#### 참고문헌

- (1) Iijima, S., 1991, "Helical Microtubules of Graphite Carbon," *Nature*, Vol. 354, pp. 56-58.
- (2) Yakobson B. I., Brabec C. J., and Bernhole J., 1996, "Nanomechanics of Carbon Tubes: Instabilities beyond Linear Response," *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 76, pp. 2511-2514.
- (3) Yakobson B. I., Campbell M. P., Brabec C. J., and Bernhole J., 1997, "High Strain Rate Fracture and C-chain Unraveling in Carbon Nanotubes," *Computer Mater. Science.*, Vol. 8, pp. 341-348.
- (4) Lu, J. P., 1997, "Elastic Properties of Carbon Nanotubes and Nanoropes," *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 79, pp. 1297-1300.
- (5) Pantano, A., Boyce, M. C., Parks, D. M., 2004, "Mechanics of Axial Compression of Single and Multi-Wall Carbon Nanotubes," *J. of Engineering Materials and Technology.*, Vol. 126, pp. 279-284.
- (6) Kim, C. I., Yang, S. H., and Kim, Y. S., 2003, "Computer Simulation of Nano Material Behavior using Molecular Dynamics," *Kor. Soc. Tech. Plasticity*, Vol. 12-3, pp. 171-183.
- (7) Jeong, B. W. and Lim, J. K., 2006, "Temperature

- and Loading-Rate Dependence on the Mechanical Behavior of Carbon Nanotubes," *Trans. of the KSME (A)*, Vol. 30, No. 7, pp. 809~815.
- (8) Thess, A., Lee, R., Nikolaev, P., Dai, H., Petit, P., and Robert, J., 1996, "Crystalline Ropes of Metallic Carbon Nanotubes," *Science*, Vol. 273, pp. 483~487.
- (9) Allen M. P. and Tildesley D. J., 1987, "Computer Simulation of Liquids," (*Oxford University Press, New York*).
- (10) Heo S. and Sinnott S. B., 2007, "Investigation of the Influence of Thermostat Configurations on the Mechanical Properties of Carbon Nanotubes in Molecular Dynamics Simulations," *J. of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol. 7, pp. 1518~1524.
- (11) Brenner, D. W., Shenderova, O. A., Harrison, J. A., Stuart, S. J., Ni, B., and Sinnott, S. B., 2002, "A Second-Generation Reactive Empirical Bond Order (REBO) Potential Energy Expression for Hydrocarbons," *J. Phys.: Condens Matter.*, Vol. 14, No. 4, pp. 783~802.
- (12) Mylvaganam K. and Zhang L. C., 2004, "Important Issues in Molecular Dynamics Simulation for Characterising the Mechanical Properties of Carbon Nanotubes," *Carbon*, Vol. 42, pp. 2025-2032.
- (13) Liew K. M., Wong C. H., and Tan M. J., 2005, "Buckling Properties of Carbon Nanotube Bundles," *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 87, pp. 041901-041903.
- (14) Jeong, B. W., Lim, J. K., and Sinnott, S. B., 2007, "Elastic Torsional Responses of Carbon Nanotube Systems," *J. Appl. Phys.*, Vol. 101, pp. 084309-1~084309-7.