

다중 탄성 빔 모델을 사용한 다중벽 탄소 나노튜브의 자유 진동에 미치는 수정된 반데르발스 상호작용에 대한 연구

The Study of Modified van der Waals Interactions on Free Vibration of Multi-walled Carbon Nanotubes Using Multi-elastic Beam Model

윤 주 일* · 강 상 옥*

Juil Yoon and S.W. Kang

(2010년 2월 5일 접수 ; 2010년 3월 23일 심사완료)

Key Words : Carbon Nanotubes(탄소 나노튜브), Free Vibration(자유 진동), Multi-elastic Beam Model(다중 탄성 빔 모델), 반데르발스 상호작용(Van der Waals interaction)

ABSTRACT

Resonant frequencies and the associated vibrational modes of multiwall carbon nanotubes are studied in this paper. The analysis is based on a multiple-elastic beam model, considering intertube radial displacements and the related internal degrees of freedom. Especially, van der Waals interaction is modified considering both all interaction between each layers in multi-wall carbon nanotubes and curvature effect. The results show that modified van der Waals interaction could significantly affect the natural frequencies of multi-walled carbon nanotubes. In particular, non-coaxial intertube resonance will be excited at the higher resonant frequencies of multiwall carbon nanotubes.

1. 서 론

탄소 나노튜브(carbon nanotubes : CNT)는 1991년 일본의 Ijima연구팀에 의해 처음으로 보고 된 이후, 기계적, 전기적, 광학적으로 매우 우수한 특성을 지니고 있어 다양한 분야로의 적용 가능성이 크다⁽¹⁻³⁾. 예를 들어, 탄소 나노튜브는 기계적으로는 철보다 100배나 우수한 강도와 1TPa의 탄성계수를 보인다. 따라서, 탄소 나노튜브를 이용한 복합재는 탄소 나노튜브의 대량생산 기술의 발달과 더불어 점점 더 관심을 끌고 있다⁽⁴⁾. 그 밖의 탄소 나노튜브의 우수성으로, 전기적으로는 구리보다 10배 이상

의 전기 전도성을 보인다. 또한 바이오 분자와의 결합의 가능성 때문에, 바이오 센서 및 마커로서의 사용 가능성이 제시되고 있다⁽⁵⁾.

이러한 우수성에도 불구하고, 탄소 나노튜브 응용상의 어려움 때문에, 실제 생활에서 활용되지 못하고 있다. 이는 나노 단위의 실험이 매우 어렵기 때문이다. 예를 들면, 주사탐침현미경(scanning probe microscope : SPM)이나, 주사전자현미경(scanning electron microscope : SEM)안에서 나노 튜브의 물리적 성질을 측정하거나 관찰하기 어려우며, 고가의 장비와 많은 시간을 필요로 한다. 다음으로 탄소 나노튜브의 원자단위 모델링(atomic modeling)의 어려움에 있다. 예를 들면, 분자수 15097개의 탄소 나노튜브의 탄성-소성 변형부터 파괴에 이르는 해석을 할 시에, SCI origin 3000 시스템으로 2달 이상의 시간이 필요하였다⁽⁶⁾.

† 교신저자; 정회원, 한성대학교 기계시스템공학과
E-mail : juilyoon@hansung.ac.kr

Tel : (02)760-8008, Fax : (02)760-4329

* 정회원, 한성대학교 기계시스템공학과

이러한 이유로 많은 학자들이 탄소 나노튜브의 연구에 단일 탄성 빔 모델(single elastic beam model)의 사용에 관심을 가져왔으며, 성공적으로 다양한 분야에서 사용되었다⁽⁷⁻¹³⁾. 그러나, 단일 탄성 빔 모델을 이용하여 다중벽 탄소 나노튜브(multi-walled CNT)를 적용할 경우, 다중벽 탄소 나노튜브내의 개별 나노튜브들이 중심축을 중심으로 동일한 방향으로의 거동(coaxial deformation)만을 해석할 수 있다는 본질적인 한계를 지니고 있다. 이에, 저자를 포함한 Ru 그룹에서는 개별 나노튜브들 간의 반데르발스(van der Waals) 상호작용을 고려한 다중 탄성 빔 모델(multiple elastic beam model)과 다중 탄성 셸 모델(multiple elastic shell model)을 개발하여, 탄소 나노튜브의 좌굴, 진동, 파동 해석 등을 성공적으로 수행하였다⁽¹⁴⁻¹⁷⁾. 이러한 본 연구자의 연구는 레나드-존스 포텐셜(Lennard-Jones potential)을 이용한 분자동역학⁽¹⁸⁾, 테레프-브레너 포텐셜(Teroff-Brenner potential)을 이용한 분자동역학⁽¹⁹⁾, 그리고 스펙트럴 요소법(spectral element method)⁽²⁰⁾ 등의 다양한 방법을 통해서 검증되었다.

기존의 모델은 첫째, 나노튜브간의 반데르발스 상호작용력을 계산하는데 있어서, 나노튜브의 곡률에 의한 효과를 고려하지 않았으며, 둘째, 인접한 두 나노튜브간의 상호작용만을 고려하였다. 이에 이 논문에서는 모든 개별 나노튜브로부터의 상호작용과 곡률효과를 고려한 반데르발스 상호작용력을 적용하였으며, 이를 이용하여 다중벽 탄소 나노튜브의 자유진동에 대한 연구를 수행하였다. 이 논문의 구성은 2장에서는 다중 탄성 빔 모델에 대하여 간략히 알아보고, 3장에서는 레나드-존스 포텐셜과 반데르발스 상호작용에 대하여 알아본다. 4장에서는 기존 모델과 수정된 모델을 적용한 탄소 나노튜브의 자유진동의 결과를 비교하였으며, 5장에서는 결론 및 향후 연구방향에 대해 기술한다.

2. 다중 탄성 빔 모델

전통적인 단일 탄성 빔 모델(single elastic beam model)을 탄소 나노튜브 해석에 사용할 경우, 개별 나노튜브들의 자유도를 고려하지 않음으로 인하여, 나노튜브 축을 중심으로 동축 거동(coaxial behavior)만을 해석할 수 있다. 이에 반하여 다중 탄성 빔 모

델에서는 탄소 나노튜브내의 각각의 나노튜브를 개별적인 탄성 빔으로 모델링 하였으며, Fig. 1에서와 같이 개별 나노튜브는 반데르발스 상호작용력에 의하여 연관(coupled)되어 있다. 이때 R_1 은 N개의 다중벽을 가진 탄소 나노튜브의 가장 안쪽 반지름이며, R_N 은 가장 바깥쪽 반지름이다.

외력이 작용하지 않는 경우, 탄소 나노튜브 내의 모든 개별 나노튜브는 평형 상태를 이루고 있으며, 상호작용력은 0이다. 평형상태가 깨어진 경우, 반데르발스 상호작용력은 더 이상 0이 아니며, 일반적으로 나노튜브 사이의 간격에 비례하여 결정된다. 따라서, N개의 나노튜브로 구성된 탄소 나노튜브는 다중 탄성 빔 모델을 이용하면, 식 (1)과 같은 N개의 결합된 지배방정식으로 구성된 형태로 표현할 수 있다.

$$\begin{aligned}
 EI_1 \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} + \rho A_1 \frac{\partial^2 w_1}{\partial t^2} &= f_1 \\
 EI_2 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + \rho A_2 \frac{\partial^2 w_2}{\partial t^2} &= f_2 \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 EI_N \frac{\partial^4 w_N}{\partial x^4} + \rho A_N \frac{\partial^2 w_N}{\partial t^2} &= f_N
 \end{aligned} \tag{1}$$

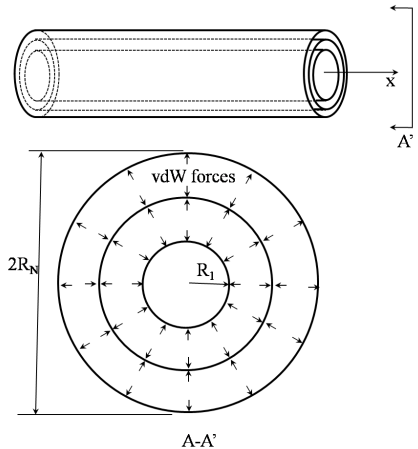


Fig. 1 A elastic beam model of a multi-walled carbon nanotube. All nanotubes are coupled through the van der Waals interaction. Here, R_1 = innermost radius of MWNT, R_N = outermost radius of MWNT

여기서 x 는 축 방향 좌표, t 는 시간좌표, $w_j(x,t)$ 는 j 번째 나노튜브의 횡 방향변위이다. I_j 는 j 번째 나노튜브의 2차 관성모멘트이며, A_j 는 j 번째 나노튜브의 단면적이다. E 는 나노튜브의 탄성계수로 1TPa를 사용하였으며, ρ 는 나노튜브의 밀도로 2.3 g/cm^3 이다. 반데르발스 작용력 f_j 는 j 번째 나노튜브를 제외한 1, 2, ..., $j-1, j+1, \dots, N$ 번째 나노튜브로부터, j 번째 나노튜브에 작용하는 힘을 의미한다.

반데르발스 계수가 매우 큰 경우에는 식 (1)로 주어진 다중 탄성 빔 모델은 기존의 단일 탄성 빔 모델 (2)로 귀결된다.

$$EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0 \quad (2)$$

여기서 $I = I_1 + I_2 + \dots + I_N$, $A = A_1 + A_2 + \dots + A_N$ 이다. 이는 개별 나노튜브들이 매우 강한 반데르발스 작용력에 의하여 개별 나노튜브들이 마치 한 개의 튜브처럼 거동함을 의미한다.

3. 반데르발스 작용력

반데르발스 상호 작용력이란 원자간의 약한 상호 작용력으로, 레나드-존스(Lennard-Jones; LJ⁽²¹⁻²⁵⁾)포텐셜 함수를 통하여 계산할 수 있다. LJ 포텐셜은 아래와 같이 표현할 수 있다.

$$\varphi(r) = \frac{\varphi_a}{r^{12}} - \frac{\varphi_b}{r^6} \quad (3)$$

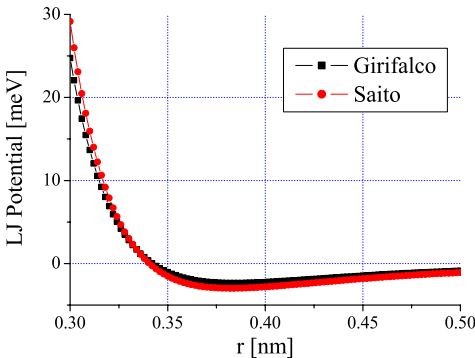


Fig. 2 Lennard-Jones Potential is shown as a function of a distance r between the interacting atoms

이때, r 은 상호 작용하는 원자간의 거리이다. 그래핀(graphene)이나, 탄소 나노튜브에서의 파라미터 j_a 와 j_b 는 잘 알려져 있으며, Saito⁽²⁵⁾와 Girifalco^(22,23)의 데이터를 이용한 레나드-존스 포텐셜은 Fig. 2와 같다.

앞 절에서 기술하였듯이, 평형상태에서는 탄소 나노튜브의 모든 개별 나노튜브가 동일 중심(concentric) 상태이다. 평형상태를 벗어나게 되면, 반데르발스 상호작용은 나노튜브 사이의 변위 차이(deflection jump) $w_i - w_{i-1}$ 의 함수로 표현할 수 있다. Ru 그룹에서는 인접 나노튜브간의 변위 차이에 의한 효과만을 고려하여, 레나드 존스 포텐셜로부터, 반데르발스 상호작용력을 1차 근사(1st order approximation)에 의하여 다음과 같은 식으로 표현하였다⁽¹⁴⁻¹⁷⁾.

$$f_j = C_j (w_{j+1} - w_j) - C_{j-1} (w_j - w_{j-1}) \quad (4)$$

여기서, $(w_{j+1} - w_j)$ 는 나노튜브간의 횡방향 변위차이다. C_j 는 반데르발스 계수로 Saito⁽²⁵⁾ 데이터를 이용하면 다음과 같다⁽¹⁴⁻¹⁷⁾.

$$C_j = \frac{320 \times (2R_a) \text{ erg/cm}^2}{0.16d^2} \quad (5)$$

여기서, R_a 는 반데르발스 상호작용을 하는 두 나노튜브의 평균반지름이며, d 는 0.142 nm이다.

기존 연구⁽¹⁴⁻¹⁷⁾와 이 연구에서의 반데르발스 상호 작용력을 고려하는 차이는 다음과 같다. 첫째로, 기존 연구에서는 단순히 두 인접 나노튜브간의 상호 작용만을 고려한 반데르발스 상호 작용력을 사용하였다. 이는 스크린 효과(screen effect) 등 때문에, 인접 나노튜브간의 반데르발스 상호 작용력이 현저히 크기 때문이었다. 두 번째로 반데르발스 계수를 구하는 데 있어서, 탄소 나노튜브의 곡률에 의한 효과를 고려하지 않았다. 이에 이 연구에서는 모든 나노튜브간의 상호 작용과 곡률효과까지 고려한 반데르발스 상호작용력을 고려하였으며, 이는 식 (6)과 같이 표현할 수 있다.

$$f_i = \sum_{j=1}^N c_{ij} R_a [w_j - w_i] \quad (6)$$

f_i 는 $j=1, 2, \dots, N$ 번째 나노튜브로부터, i 번째 나노튜브에 작용하는 작용력을 의미한다. 곡률을 고려한 반데르발스 계수 c_{ij} 는 X.Q. He 모델을 사용하

였으며, 다음과 같이 표현된다⁽²⁶⁾.

$$c_{ij} = - \left[\frac{1001\pi\epsilon\sigma^{12}}{3d^4} E_{ij}^{13} - \frac{1120\pi\epsilon\sigma^6}{9d^4} E_{ij}^7 \right] R_j \quad (7)$$

여기서, $e = 2.968 \text{ meV}$, $s = 3.407 \text{ \AA}$ 이다. 또한, 계수 E 는 다음과 같은 타원형 적분형태로 정의된다.

$$E_{ij}^m = \left(\frac{1}{R_i + R_j} \right)^m \int_0^{\pi/2} \left(1 - \frac{4R_i R_j}{(R_i + R_j)^2} \cos^2 \theta \right)^{-m/2} d\theta \quad (8)$$

식 (7)과 (8)을 사용하여, 최외각 반지름이 1.7 nm 인 5중벽 탄소 나노튜브(5-walled CNT)에 대하여 반데르발스 계수 c_{ij} 를 구하여 Table 1에 정리하였다.

Table 1 van der Waals interaction coefficients c_{ij} (GPa/nm) for a 5-wall Carbon nanotubes with various radii r

	r_1 (=0.34 nm)	r_2 (=0.68 nm)	r_3 (=1.02 nm)	r_4 (=1.36 nm)	r_5 (=1.7 nm)
r_1 (=0.34 nm)		c_{12} -152.66	c_{13} -3.41	c_{14} 0.37	c_{15} 0.07
r_2 (=0.68 nm)	c_{21} -76.33		c_{23} -132.85	c_{24} 2.70	c_{25} 0.28
r_3 (=1.02 nm)	c_{31} 1.14	c_{32} -88.57		c_{34} -125.37	c_{35} 2.44
r_4 (=1.36 nm)	c_{41} 0.09	c_{42} 1.35	c_{43} -94.02		c_{45} -121.43
r_5 (=1.7 nm)	c_{51} 0.01	c_{52} 0.11	c_{53} 1.46	c_{54} -97.14	

이때, c_{ij} 는 j 번째 나노튜브가 i 번째 나노튜브에 미치는 상호작용을 의미한다. 예상할 수 있듯이, 인접 나노튜브간의 상호작용력이 다른 상호작용력에 비하여 지배적임을 확인할 수 있다. 예를 들면, 2번째 나노튜브가 1번째 나노튜브에 미치는 반데르발스 계수 $c_{12} = -152.66 \text{ GPa/nm}$ 인데 반하여, 3번째 나노튜브가 1번째 나노튜브에 미치는 반데르발스 계수 $c_{13} = -3.41 \text{ GPa/nm}$ 이며, 4번째 나노튜브가 1번째 나노튜브에 미치는 반데르발스 계수 $c_{14} = 0.37 \text{ GPa/nm}$ 이다.

4. 다중벽 탄소 나노튜브의 진동해석

기존 단일 탄성 빔 모델과 기존 다중 탄성 빔 모델을 수정된 반데르발스 상호작용력을 적용한 다중 탄성 빔 모델과 비교하기 위하여, 논문⁽¹⁵⁻¹⁷⁾에 사용되었던 양단 지지되어 있고, 최외각 반지름 $r_{out} = 1.7 \text{ nm}$ 인 5중벽 탄소 나노튜브의 진동해석을 수행하도록 한다. 이 경우, 수정된 다중 탄성 빔 모델은 식 (9)로 주어지게 된다.

$$\begin{aligned} EI_1 \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} + \rho A_1 \frac{\partial^2 w_1}{\partial t^2} &= \sum_{j=1}^5 c_{1j} R_{1j} [w_j - w_1] \\ EI_2 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + \rho A_2 \frac{\partial^2 w_2}{\partial t^2} &= \sum_{j=1}^5 c_{2j} R_{2j} [w_j - w_2] \\ &\vdots \\ EI_5 \frac{\partial^4 w_5}{\partial x^4} + \rho A_5 \frac{\partial^2 w_5}{\partial t^2} &= \sum_{j=1}^5 c_{5j} R_{5j} [w_j - w_5] \end{aligned} \quad (9)$$

여기서, a_j 는 j 번째 나노튜브의 진폭이며, ω 는 이에 상응하는 고유진동수이다. $Y_n(x)$ 는 경계조건에

$$\begin{bmatrix} EI_1 \lambda^4 + \sum c_{1j} R_{1j} & -c_{12} R_{12} & -c_{13} R_{13} & -c_{14} R_{14} & -c_{15} R_{15} \\ -c_{21} R_{21} & EI_2 \lambda^4 + \sum c_{2j} R_{2j} & -c_{23} R_{23} & -c_{24} R_{24} & -c_{25} R_{25} \\ -c_{31} R_{31} & -c_{32} R_{32} & EI_3 \lambda^4 + \sum c_{3j} R_{3j} & -c_{34} R_{34} & -c_{35} R_{35} \\ -c_{41} R_{41} & -c_{42} R_{42} & -c_{43} R_{43} & EI_4 \lambda^4 + \sum c_{4j} R_{4j} & -c_{45} R_{45} \\ -c_{51} R_{51} & -c_{52} R_{52} & -c_{53} R_{53} & -c_{54} R_{54} & EI_5 \lambda^4 + \sum c_{5j} R_{5j} \end{bmatrix} \quad (10)$$

따른 진동모드로서, $\frac{d^4}{dx^4}Y_n(x) = \lambda^4 Y_n(x)$ 을 만족한다.

마지막으로, n 은 모드 수이다. 이 연구에서는 탄소 나노튜브가 양단 지지된 경우를 고려하였으므로, $\lambda = n\pi$ 이다.

고유진동수는 일반해 $w_j(x,t) = a_j e^{i\omega t} Y_n(x)$ 을 식 (9)에 대입함으로써 얻을 수 있다. 5중벽 탄소 나노튜브에 식 (9)를 이용하면 식 (10)과 같은 간단한 행렬 형태를 얻을 수 있다. 보다 자세한 계산과정은 참고논문 (15), (16)에 잘 표현되어 있다.

5중벽 탄소 나노튜브의 경우, $5n$ 개의 고유진동수를 가지며 다음과 같이 표현된다.

$$\omega_{1n} < \omega_{2n} < \omega_{3n} < \omega_{4n} < \omega_{5n} \tag{11}$$

최저차 고유진동수 ω_{1n} 의 경우, 다중벽 탄소 나노튜브는 동축 진동(coaxial vibration)을 한다(Fig. 3). 이 경우, 고유진동수 ω_{1n} 는 단일 빔 모델을 통하여 구하여진 고유진동수 ω_{s_n} 에 대응한다. ω_{1n} 을 제외한 고차진동수의 경우에 개별 나노튜브들은 비 동축 진동(non coaxial vibration)을 한다. 물론, 이러한 고차진동수는 단일 빔 모델을 통해서 계산할 수 없다.

모든 나노튜브들간의 상호작용과 곡률효과를 고려한 수정모델의 효과를 확인하기 위하여, 단일 빔 모델과, 기존 모델을 통하여 구한 $n=1$ 인 경우의 최저차 고유진동수를 Fig. 4에 비교하였다. 여기서,

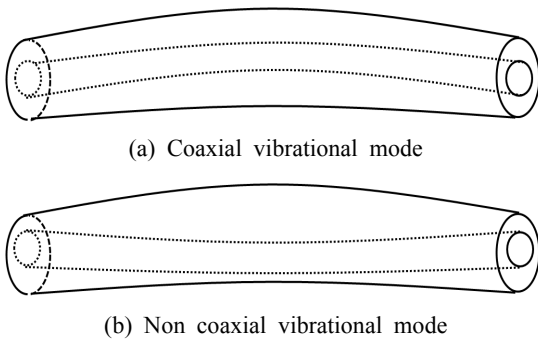


Fig. 3 Schematic of vibrational mode of a multi-walled CNT. (a) For a lowest frequencies ω_{1n} , each nanotube of a multi-walled CNT vibrates coaxially. (b) For higher frequencies, non-coaxial vibrational mode emerges

ω_{o_in} 은 기존 다중 빔 모델⁽¹⁵⁻¹⁷⁾로부터 구한 고유진동수이다.

각각의 모델들을 통한 고유진동수는 탄소 나노튜브 길이가 증가함에 따라 감소하였다. 특히나, 수정 모델로부터 구한 최저차 고유진동수와 기존 다중 빔 모델의 고유진동수에 상당한 차이를 보였다. 예를 들면, $L/r_{out} = 50$ 인 경우, 기존의 모델은 5.72 GHz, 현재 모델은 8.69 GHz로 50%의 차이가 난다. Table 1에서 알 수 있듯이, 비 인접 나노튜브간의 상호작용이 매우 작음에도 불구하고, 개별 효과들이 축적됨으로써, 고유진동수에 미치는 효과가 상당히 크기 때문에 판단된다.

기존의 다중 빔 모델을 통한 값과 제안모델을 통

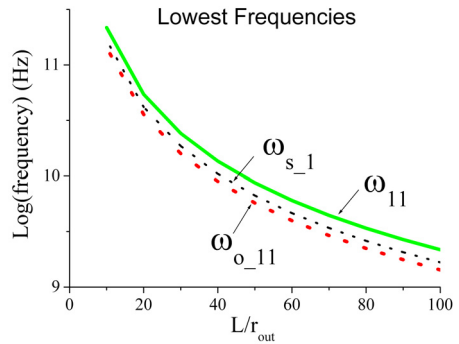


Fig. 4 Lowest Frequencies of 5-walled CNT frequencies are shown as a function of aspect ratio (L/r_{out}), when mode number $n=1$. Current model (ω_{s_1}) are compared with single beam model ($\omega_{o_{s-1}}$) and previous model ($\omega_{o_{11}}$)

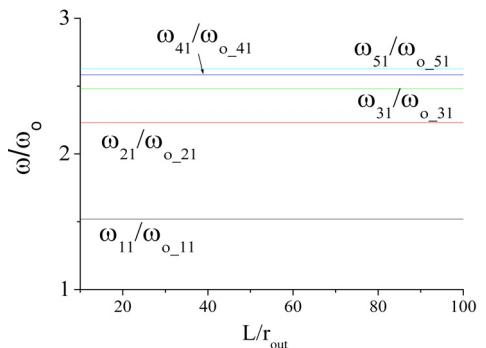


Fig. 5 5-walled CNT frequencies are shown as a function of aspect ratio (L/r_{out}), when mode number $n = 1$

한 값의 차이는 고차모드로 갈수록 증가한다(Fig. 5). 예를 들어 $L/r_{out} = 50$ 인 경우, $\omega_{11}/\omega_{o,11} = 1.51$, $\omega_{31}/\omega_{o,31} = 2.48$, $\omega_{51}/\omega_{o,51} = 2.62$ 이다. 이러한 차이는 나노튜브의 자유도가 증가함에 따라, 개별 나노튜브의 복잡한 상호작용을 기존 모델에서는 고려하지 않았기 때문이다. 참고로, 제안모델과 기존모델의 차이는 1) 탄소 나노튜브의 직경이 증가함에 따라서 감소하며, 2) N-다중벽 탄소 나노튜브(N-walled CNT)의 나노튜브의 개수 N이 감소함에 따라서 감소한다. 참고적으로, Fig. 5에 나타나 있는 고유진동수에 대응하는 5중벽 탄소 나노튜브의 경우에는 매우 복잡한 형태를 띠게 된다. 보다 자세한 연구는 추후 연구에서 보고할 예정이다.

5. 결 론

산업의 발달과 더불어, THz 영역에서의 탄소 나노튜브 응용에 대한 관심이 증가하고 있다. 이에 상응하여, 저자는 다중 탄성 빔 모델을 개발하여, 다중벽 탄소 나노튜브의 진동연구를 수행하였다. 이 논문에서는 기존의 연구를 보완하여, 나노튜브의 직경에 의한 반데르발스 상호작용력과 모든 나노튜브 간의 상호작용력을 고려하였다. 비 인접 나노튜브에 의한 상호작용이 인접 나노튜브에 비해서 크지 않음에도, 개별 효과들이 축적됨으로써, 고유진동수에 미치는 효과가 상당함을 확인 할 수 있었다. 특히나 이러한 효과는 다중벽 탄소 나노튜브의 고차모드에서 현저하였다. 이 경우에는, 비 동축 진동에 의하여 다중벽 탄소 나노튜브의 전기적, 광학적 성질에 영향을 미칠 수 있다. 차후의 연구에서는 탄소 나노튜브의 곡률효과를 보다 엄밀히 연구할 예정이며, 탄소 나노튜브의 전기적, 광학적 성질과의 연관성도 연구할 예정이다.

후 기

이 연구는 2010년도 한성대학교 교내연구비 지원 과제입니다.

참 고 문 헌

(1) Ball, P., 2001, "Roll up for the Revolution,"

Nature (London), Vol. 414, pp. 142~144.

(2) Baughman, R. H., Zakhidov, A. A. and de Heer, W. A., 2002, "Carbon Nanotubes - the Route Toward Applications," Science 297, pp. 787~792.

(3) Bachtold, A., Hadley, P., Nakanishi, T. and Dekker, C., 2001, "Logic Circuits with Carbon Nanotubes Transistors," Science 294, pp. 1317~1329.

(4) Lim, Y.-S., Kim, T.-W. and Sung, J.-H., 2006, "Fabrication and Evaluation of Carbon Nanotubes Reinforced Carbon Composites," Trends in Metals & Materials Engineering, Vol. 19, No. 6, pp. 13~19.

(5) Oh, Y.-S., Lee, D.-J., Chang, Y.-S., Choi, J.-B., Kim, Y.-J. and Baik, S. H., 2006, "Separation of Single-walled Carbon Nanotubes by Length and Diameter," Journal of the Korean Society of Precision Engineering, Vol. 23, No. 3, pp. 171~178.

(6) Liew, K. M., He, X. Q. and Wong, C. H., 2004, "On the Study of Elastic and Plastic Properties of Multi-walled Carbon Nanotubes under Axial Tension Using Molecular Dynamics Simulation," Acta Materialia 52, pp. 2521~2527.

(7) Kwon, S. G., Park, H. J., Lee, H.-W., Kwak, Y. K. and Kim, S. H., 2008, "Fabrication and Mechanical Properties of Carbon Nanotube Probe for Ultrasmall Force Measurement in Biological Application," Journal of the Korean Society of Precision Engineering, Vol. 25, No. 5, pp. 140~147.

(8) Choi, J. W. and Song, O. S., 2009, "Nonlinear Stability Characteristics of Carbon Nanotubes," Transactions of the Korean Society for Noise and Vibration Engineering, Vol. 19, No. 7, pp. 699~709.

(9) Wong, E. W., Sheehan, P. E. and Lieber, C. M., 1997, "Nanobeam Mechanics: Elasticity, Strength, and Toughness of Nanorods and Nanotubes," Science 277, 1971-75.

(10) Falvo, M. R., Clary, G. J., Taylor, R. M., Chi, V., Brooks, F. P., Washburn, S. and Super-fine, R., 1997, "Bending and Buckling of Carbon Nanotubes under Large Strain," Nature 389, pp. 582~584.

(11) Treacy, M. M. J., Ebbesen, T. W. and Gibson, J. M., 1996, "Exceptionally High Young's

Modulus Observed for Individual Carbon Nanotubes,” *Nature* 381, pp. 678~680.

(12) Chopra, N. G. and Zettl, A., 1998, “Measurement of the Elastic Modulus of Multi-wall Boron Nitride Nanotubes,” *Solid State Communications* 105, pp. 297~300.

(13) Poncharal, P., Wang, Z. L., Ugarte, D. and de Heer, W. A., 1999, “Electrostatic Deflections and Electromechanical Resonances of Carbon Nanotubes,” *Science* 283, 1513-16.

(14) Ru, C. Q., 2001, “Axially Compressed Buckling of a Doublewalled Carbon Nanotube Embedded in Elastic Medium,” *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 49, pp. 1265~1279.

(15) Yoon, J., Ru, C. Q. and Mioduchowski, A., 2002, “Non-coaxial Resonance of a Multiwalled Carbon Nanotube,” *Physical Review B* 66, 233402.

(16) Yoon, J., Ru, C. Q. and Mioduchowski, A., 2003, “Vibration of an Embedded Multiwalled Carbon Nanotube,” *Composite Science and Technology* 63, pp. 1533~1542.

(17) Wang, C. Y., Ru, C. Q. and Mioduchowski, A., 2003, “Axially Compressed Buckling of Pressured Multiwall Carbon Nanotubes,” *International Journal of Solids and Structures* 40, pp. 3893~3911.

(18) Li, C. and Chou, T. W., 2004, “Vibrational behavior of Multiwalled-carbon-nanotube-based Nanomechanical Resonators,” *Applied Physics Letters* 84, pp. 121~123.

(19) Wang, L. and Hu, H., 2005, “Flexural Wave Propagation in Single-walled Carbon Nanotubes,”

Physical Review B 71, 195412.

(20) Chakraborty, A., Sivakumar, M. S. and Gopalakrishnan, S., 2006, “Spectral Element based Model for Wave Propagation Analysis in Multi-wall Carbon Nanotubes,” *International Journal of Solids and Structures* 43, pp. 279~294.

(21) Lennard-Jones, J. E., 1924, “The Determination of Molecular Fields: from the Variation of the Viscosity of a Gas with Temperature,” *Proceedings of the Royal Society* 106A, p. 441.

(22) Girifalco, L. A. and Lad, R. A., 1956, “Energy of Cohesion, Compressibility, and the Potential Energy Functions of the Graphite System,” *Journal of Chemical Physics* 25, pp. 693~697.

(23) Girifalco, L. A., 1992, “Molecular-properties of C-60 in the Gas and Solid-phases,” *The Journal of Physical Chemistry* Vol. 96, No. 2, pp. 858~861.

(24) Zheng, Q., Liu, J. Z. and Jiang, Q., 2002, “Excess van der Waals Interaction Energy of a Multiwalled Carbon Nanotube with an Extruded Core and Induced Core Oscillation,” *Physical Review B* 65, Art. No. 245409.

(25) Saito, R., Matsuo, R., Kimura, T., Dresselhaus, G. and Dresselhaus, M. S., 2001, “Anomalous Potential Barrier of Double-wall Carbon Nanotube,” *Chemical Physics Letters*. Vol. 348, pp. 187~193.

(26) He, X. Q., Kitipornchai, S. and Liew, K. M., 2005, “Buckling Analysis of Multi-walled Carbon Nanotubes: a Continuum Model Accounting for van der Waals Interaction,” *Journal of The Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 53, pp. 303~326.