

탄성 보 모델을 이용한 탄소나노튜브의 압축거동해석

Analysis of Single-Walled Carbon Nanotube under Compression using Elastic Beam Model

박 노 정* 전 윤 희** 박 재 균†
Park, No-Jung Chun, Yun-Hee Park, Jae-Gyun

요 지

탄소나노튜브는 기계적 성질이 매우 뛰어나기 때문에 앞으로 많이 이용될 수 있는 신소재이지만 작은 크기와 특별한 성질 때문에 해석에 어려움이 있으며, 분자 동역학이나 범함수 이론을 이용한 전자시뮬레이션은 계산이 어렵고 시간이 오래 걸리는 단점이 있다. 이러한 단점을 극복하기 위하여 원자 사이에 작용하는 힘을 구조 부재로 치환하는 방법을 사용할 수 있다. 본 연구에서는 0.1nm 길이의 탄성 보를 사용하여 나노튜브를 구성하는 원자 사이의 힘을 묘사하고 선형 압축거동을 해석하였다. 선형 거동은 기존의 다른 방법을 사용한 결과와 잘 일치하였으며, 보 요소의 특성이 적절하게 정해질 경우 비선형 거동의 연구에도 이용될 수 있을 것이다.

핵심용어 : 단층 탄소나노튜브, 탄성 보 모델, 선형 압축거동

Abstract

The mechanical properties of Carbon nanotube is superior such that it can be used in many areas of engineering field in the future, though the analysis of the mechanical behavior of nanotube is expensive due to its small size and uniqueness when the molecular dynamics or a generalized function theory is applied. To overcome these disadvantages, the force field between Carbon atoms can be substituted by structural members. In this study, main forces between atoms in Carbon nanotube are described by 0.1 nanometer length circular beams and linear behaviors under compression are investigated. The linear behavior is in good agreement with results by other methods. This method can be used in nonlinear analysis of nanotube when the beam elements are properly configured.

Keywords : single-walled Carbon nanotube, elastic beam model, linear compressive behavior

1. 서 론

신소재는 새로운 형식과 크기의 구조물을 가능하게 하기 때문에 인류가 공학을 발전시킨 이후 신소재의 개발은 계속되어 왔다. 최근에는 재료의 나노구조단위까지 조절을 하여 새로운 소재를 만들어내고 있으며, 이들 중 많은 관심을 받는 재료 중 하나가 탄소나노튜브(Carbon Nanotube)이다. 탄소나노튜브는 6각형 벌집모양의 고리로 연결된 탄소들이 얇은 막을 형성하고 이 막이 대롱 모양으로 합쳐진 지름 1 나노미터 크기의 미세한 분자로 Iijima(1991)에 의해 최초로 발견되었

다. 막이 합쳐지는 각도에 따라 암체어(arm chair) 형과 지그재그(zigzag) 형의 두 가지 형태로 만들어지며 인장 강도가 강철의 일백배 이상 강하고 유연성이 뛰어나다. 속이 비어서 가볍고 대롱의 지름에 따라 전기가 통하기도 하고 안통하기도 하며 열전도율이 높다. 전기, 전자공학 쪽으로도 여러 가지 활용 용도가 있으나, 여기서 주목하는 것은 그 기계적 특성이다. 뛰어난 인장강도를 가지고 있기 때문에 이미 탄소나노튜브를 이용한 Zylon 섬유(Kumar, 2004)가 생산되고 있으며 한 보고서에 의하면 일반적인 탄소섬유의 수효는 토목, 산업계에서만 2002년 6580톤에서 2005년 9600톤으로 점진적

† 책임저자, 중신회원 · 단국대학교 토목환경공학과 부교수
Tel: 031-8005-3473 ; Fax: 031-8021-7213
E-mail: jpark@dankook.ac.kr

* 단국대학교 응용물리학과 조교수

** 단국대학교 토목환경공학과 석사과정

• 이 논문에 대한 토론을 2010년 12월 31일까지 본 학회에 보내주시면 2011년 2월호에 그 결과를 게재하겠습니다.

인 증가를 보이고 있다.

탄소나노튜브의 역학적 거동을 예측할 수 있는 해석기법은 여러 가지가 있다. 먼저 그 나노크기의 효과 때문에 일반적으로는 생각할 수 없는 특이한 물리적인 특성을 보이기 때문에 원자 레벨에서의 모델링이 필요하다. 이러한 모델링 기법으로는 고전적인 분자동역학(Molecular Dynamics)이나 밀도함수이론(Density Function Theory)이 있으며 기본적으로 분자나 원자의 움직임과 관계있는 모든 문제는 이 방법으로 해석할 수 있다(Iijima 등, 1996; Sanchez-Portal 등, 1999). 그러나 엄청난 양의 계산 때문에 너무 비싸며, 때문에 매우 작은 수의 원자나 분자의 경우에만 실효성이 있는 단점이 있다. 또 다른 해석 기법은 연속체역학(Continuum Mechanics)에 기반을 둔 접근법으로 고전적인 연속체역학을 이용하여 탄소나노튜브의 거동을 해석하려는 시도가 있었다(Tersoff, 1992). 즉, 탄소나노튜브를 탄성 연속체로 가정하여 그 거동을 해석하였다. 또한 둥근 원기둥 모양으로부터 연속체 쉘 모델을 고안하여 나노튜브의 좌굴을 해석한 예도 있다(Ru, 2000a; 2000b). 그러나 이 방법은 재료의 나노특성을 전혀 표현할 수 없는 한계가 있다. 이러한 문제점 때문에 나노구조 자체를 구조역학을 이용하여 모델링하는 연구들이 등장하였다(Ferrari 등, 1997; Li & Chou, 2003). 이 방법은 기존의 고전역학을 이용하면서도 나노스케일 효과를 고려할 수 있는 장점이 있는 방법으로, 이미 일반적인 격자(lattice) 구조 재료에 대한 연구가 많이 이루어져 있다. Ferrari 등(1997)은 탄성체에 대한 멀티스케일 해석방법을 'Doublet Mechanics'라 명명하고 정리하였으며, 박재균(2005)은 이 이론을 소성영역으로 확장하여 일반적인 J_2 소성이론을 유도하였다. 본 연구에서는 기본적으로 같은 방법을 이용하여 탄소나노튜브의 거동을 적절히 묘사할 수 있는 모델을 고안하고 이 모델을 써서 여러 환경에서 나타나는 나노튜브의 거동을 비교적 정밀하게 예측하는 것을 목표로 하였다.

2. 탄소나노튜브의 모델링

나노튜브는 탄소로 만들어진 얇은 종이 같은 흑연(graphite) 막 구조를 말아서 원통형으로 이은 모양의 구조체이다. 탄소 원자 6개가 정육각형 모양의 셀(cell)을 이루며, 이 셀이 수평 방향과 60도 방향으로 연결되면서 전체 나노튜브를 구성한다. 그림 1은 나노튜브에서 기본 격자 벡터 R_1 , R_2 를 사용하여 각 셀을 정의하는 방법을 나타낸다. 즉, (0,0)을 첫 셀을 나타내는 좌표로 이용하면 (9,9), (12,12), (19,19) 등은 각각 두 방향으로 10번째, 13번째, 20번째 위치의 셀 좌표를 나타내며, 이를 이용하여 나노튜브의 크기를 정의할 수

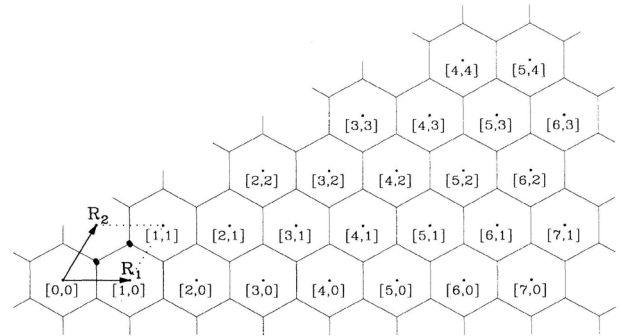


그림 1 흑연의 격자구조

있다. T(9,9)는 양 방향으로 10개의 셀로 이루어진 압축어형 나노튜브를 의미한다(White 등, 1993).

T(9,9), T(12,12), T(19,19)는 각각 0.625nm, 0.832nm, 1.316nm의 반지름을 가지고 있다(Cornwell 등, 1997). 외력을 받지 않는 상태에서의 탄소원자 사이의 거리는 대략 0.15nm이며, 힘을 받으면 그 거리가 약간 변하게 된다.

탄소끼리의 결합 에너지를 묘사하는 함수의 하나인 Tersoff-Brenner potential은 나노튜브의 구조를 잘 묘사하며 분자동역학 계산에 중요한 역할을 하고 있다(Tersoff, 1989; Brenner, 1990).

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad V_{ij} = f_C(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \quad (1a)$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij} r_{ij}), \quad f_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij}) \quad (1b)$$

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos[\pi(r_{ij} - R_{ij}) / (S_{ij} - R_{ij})], & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0, & r_{ij} > S_{ij} \end{cases} \quad (1c)$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} (1 + \beta_i^{n_i} \zeta_{ij}^{m_i})^{-1/2m_i}, \quad \zeta_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_C(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{ijk}), \quad (1d)$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + c_i^2/d_i^2 - c_i^2/[d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2].$$

$$\lambda_{ij} = (\lambda_i + \lambda_j)/2, \quad \mu_{ij} = (\mu_i + \mu_j)/2, \quad A_{ij} = (A_i A_j)^{1/2}, \quad (1e)$$

$$B_{ij} = (B_i B_j)^{1/2}, \quad R_{ij} = (R_i R_j)^{1/2}, \quad S_{ij} = (S_i S_j)^{1/2}.$$

여기서, E 는 전체 결합 에너지, i, j, k 는 시스템의 원자를 나타내고 인덱스이고, r_{ij} 는 ij 원자 결합의 길이, θ_{ijk} 는 ij 결합과 ik 결합의 사이 각이다. 인덱스가 하나인 기호 값들 ($c_i, d_i, h_i, \lambda_i, \mu_i$)은 원자의 종류에 따라 고유하게 결정된다. 위의 포텐셜 함수를 이용하여 뉴턴의 운동방정식을 수치적으

로 계산함으로써 원자들의 동역학을 계산하는 방법을 사용할 수 있다.

특정한 실험에 의존하는 파라미터 조정이 필요하지 않은 이론은 인위적인 모델에 의한 계산보다 정확한, 원칙적으로 일정한 결과를 줄 수 있을 것이다. 이러한 이론으로 수행한 계산을 제일원리(first-principles) 계산이라고 하며, *ab initio* 계산이라고도 부른다(윤영귀, 2009). 밀도함수이론은 전자 구조계산을 수행하기 위한 제일원리 이론으로서, 어떤 시스템이 절대 영도(absolute zero temperature)에 있을 때 가지는 가장 낮은 상태의 에너지를 구하는 방법을 컴퓨터를 이용해 쉽게 구현할 수 있게 해 준다. 이러한 계산 과정에서 전자 구조가 계산된다.

본 연구에서 검증을 위하여 사용한 방법은 *Vienna ab initio* 시뮬레이션 패키지과 이 안에 포함된 가상 포텐셜이다(Kresse & Furthmuller, 1996a; 1996b). 교환 상관 포텐셜(exchange correlation potential)을 묘사하기 위하여 generalized gradient approximation(GGA)와 local density approximation (LDA)를 사용하였다(Perdew 등, 1996).

3. 보 요소를 이용한 모델

구조역학을 이용한 모델링은 그 나노구조의 모양이 일반적인 구조요소와 많이 닮았다는 점에서 착안되었다(Ferrari 등, 1997; Li & Chou, 2003)

그림 2에서 보는 바와 같이 벌집 모양의 탄소 격자 막이 동그랗게 관 모양으로 연결될 때의 각도에 따라 압축어 형 또는 지그재그 형의 나노튜브가 생성된다. 이 때 탄소 원자와 원자 사이의 연결은 여러 가지 스프링의 탄성계수를 이용한 비선형 포텐셜 에너지로 나타낼 수 있다. 한 가지 예로 분자동역학에서 나오는 COMPASS forcefield(양승화 등,

2007)가 있으며 식 (2)와 같다.

$$\begin{aligned}
 E_{total} = & \sum_b [k_2(b-b_o)^2 + k_3(b-b_o)^3 + k_4(b-b_o)^4] + \\
 & \sum_\theta [k_2(\theta-\theta_o)^2 + k_3(\theta-\theta_o)^3 + k_4(\theta-\theta_o^4)] + \\
 & \sum_\phi [k_1(1-\cos\phi) + k_2(1-\cos2\phi) + k_3(1-\cos3\phi)] + \\
 & \sum_\chi k_2\chi^2 + \sum_{b,b'} k(b-b_o)(b'-b'_o) + \sum_{b,\theta} (b-b_o)(\theta-\theta_o) + \\
 & \sum_{b,\phi} k(b-b_o) [k_1\cos\phi + k_2\cos2\phi + k_3\cos3\phi] + \\
 & \sum_{\theta,\phi} (\theta-\theta_o) [k_1\cos\phi + k_2\cos2\phi + k_3\cos3\phi] + \\
 & \sum_{\theta,\theta'} k(\theta'-\theta'_o)(\theta-\theta_o) + \sum_{\theta,\theta',\phi} k(\theta'-\theta'_o)(\theta-\theta_o)\cos\phi + \\
 & \sum_{i,j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \sum_{i,j} \epsilon_{ij} \left[2 \left(\frac{r_{ij}^o}{r_{ij}} \right)^A - 3 \left(\frac{r_{ij}^o}{r_{ij}} \right)^B \right] \quad (2)
 \end{aligned}$$

식 (2)에 나타나는 전체 12개의 항 중에서 1~3항은 각각 결합길이, 굽힘, 비틀림에 의한 포텐셜이고, 4항은 평면을 벗어난(out-of-plane) 비틀림의 영향을 고려한 항이다. 5~10항은 결합, 굽힘, 비틀림 간의 상호작용으로 인한 에너지를 묘사하고 11~12항은 비결합 에너지를 묘사하는 항으로 정전기력을 묘사하는 Coulomb 포텐셜과 반데르발스 결합력을 나타내는 L-J 포텐셜이다(그림 3). 본 연구에서는 이러한 복합적인 에너지를 단순하게 표현하기 위하여 보 요소를 사용한다. 즉, 그림에서 보는 바와 같이 탄소 원자는 보와 보 사이의 절점에 해당하고, 원자끼리의 결합력이 보로 묘사된다. 이 결합력으로 인해 발생하는 길이방향 변형에 대한 저항력, 휨에 대한 저항력, 그리고 비틀림에 대한 저항력을 전부 보의 저항력으로 대체시킨다.

먼저 위의 비선형 포텐셜 에너지에서 상호작용과 3차 항 이

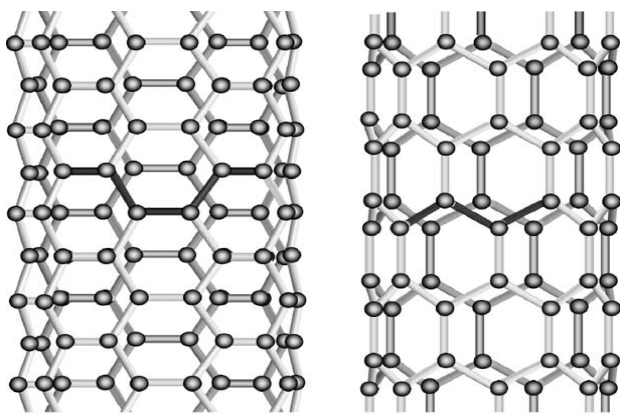


그림 2 탄소나노튜브

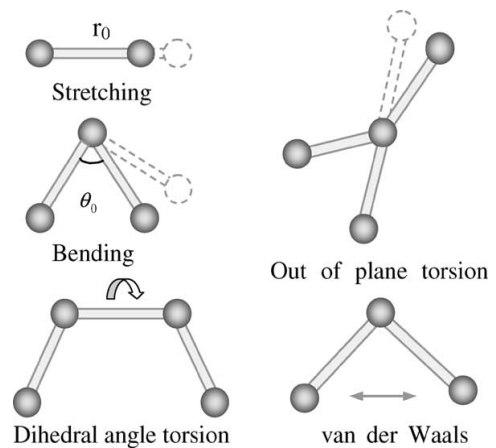


그림 3 탄소나노튜브 원자 사이의 힘

상, 그리고 반데르발스 힘을 무시한 에너지 함수를 생각하자:

$$U = U_r + U_\theta + U_\phi + U_\omega \quad (3)$$

위 식의 항들은 차례로 인장변형에 대한 에너지(stretching)

$$U_r = \frac{1}{2}k_r(r-r_o)^2 = \frac{1}{2}k_r(\Delta r)^2, \quad (4)$$

결합 휨 에너지(bending)

$$U_\theta = \frac{1}{2}k_\theta(\theta-\theta_o)^2 = \frac{1}{2}k_\theta(\Delta\theta)^2, \quad (5)$$

이면 비틀 에너지(dihedral angle torsion)

$$U_\phi = \frac{1}{2}k_\phi[1 + \cos(n\phi - \delta)], \quad (6)$$

평면을 벗어난 비틀 에너지(out of plane torsion)

$$U_\omega = \frac{1}{2}k_\omega(\phi - \phi_o)^2 = \frac{1}{2}k_\omega(\Delta\phi)^2, \quad (7)$$

를 나타낸다.

이제 일반적인 보의 탄성 에너지를 생각하자:

$$U = U_N + U_M + U_T + U_V \quad (8)$$

위 식에서 전체 탄성 에너지는 인장력에 의한 에너지

$$U_N = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2, \quad (9)$$

순수 휨 에너지

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2, \quad (10)$$

순수 비틀 에너지

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\beta)^2, \quad (11)$$

순수 전단 에너지

$$U_V = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{V^2}{GA_V} dL \quad (12)$$

의 함으로 볼 수 있다. 위 식에서 E 는 Young 탄성계수, A 는 단면의 면적, L 은 보의 길이, T 는 단면 이차 모멘트, G 는 전단 탄성 계수, N 은 단면에 작용하는 수직력, M 은 휨 모멘트, T 는 비틀 모멘트, V 는 전단력이다.

식 (3)와 식 (8)을 비교하여 양쪽의 에너지를 같다고 가정하면 다음의 관계를 유추할 수 있다.

$$\frac{EA}{L} = k_r \quad (13)$$

$$\frac{EI}{L} = k_\theta \quad (14)$$

$$\frac{GJ}{L} = k_\phi \quad (15)$$

즉, 원자거리의 인장 탄성계수 k_r , 휨 탄성계수 k_θ , 비틀 탄성계수 k_ϕ 의 값을 알면 구조물의 강성행렬을 계산하는 모든 정보를 얻게 된다. 이 문제에서의 강성행렬 K 는 다음과 같다:

$$Ku = f, \quad K = \begin{bmatrix} K_{ii} & K_{ij} \\ K_{ij}^T & K_{jj} \end{bmatrix} \quad (16)$$

위 식에서,

$$u = [u_{xi}, u_{yi}, u_{zi}, \theta_{xi}, \theta_{yi}, \theta_{zi}, u_{xj}, u_{yj}, u_{zj}, \theta_{xj}, \theta_{yj}, \theta_{zj}]^T \quad (17)$$

$$K_{ii} = \begin{bmatrix} EA/L & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12EI_x/L^3 & 0 & 0 & 0 & 6EI_x/L^2 \\ 0 & 0 & 12EI_y/L^3 & 0 & -6EI_y/L^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & GJ/L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -6EI_y/L^2 & 0 & 4EI_y/L & 0 \\ 0 & 6EI_x/L^2 & 0 & 0 & 0 & 4EI_x/L \end{bmatrix}$$

$$K_{ij} = \begin{bmatrix} -EA/L & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -12EI_x/L^3 & 0 & 0 & 0 & 6EI_x/L^2 \\ 0 & 0 & -12EI_y/L^3 & 0 & -6EI_y/L^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -GJ/L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6EI_y/L^2 & 0 & 2EI_y/L & 0 \\ 0 & -6EI_x/L^2 & 0 & 0 & 0 & 2EI_x/L \end{bmatrix}$$

$$K_{jj} = \begin{bmatrix} EA/L & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12EI_x/L^3 & 0 & 0 & 0 & -6EI_x/L^2 \\ 0 & 0 & 12EI_y/L^3 & 0 & 6EI_y/L^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & GJ/L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6EI_y/L^2 & 0 & 4EI_y/L & 0 \\ 0 & -6EI_x/L^2 & 0 & 0 & 0 & 4EI_x/L \end{bmatrix}$$

이것으로 단층 나노튜브의 거동을 묘사하는 강성 행렬이

완성 된다.

나노튜브의 거동을 연구하기 위해서는 먼저 각 나노수준의 물성에 해당하는 구조역학에서의 상수를 계산해야 한다. 탄소 나노튜브는 탄소가 연결되어 얇은 막 형태를 구성하고, 그 막이 동그랗게 말려서 원통형으로 연결된 것으로 볼 수 있다. 따라서 이것을 이용하여 Young 탄성계수를 계산할 수 있다. 즉, 나노튜브를 길이 방향으로 당길 때 발생하는 응력(stress)과 변형률(strain)을 이용하여 계산한다.

$$Y = \frac{\sigma}{\epsilon} = \frac{F/A_0}{\Delta H/H_0} \quad (18)$$

여기서, F 는 튜브의 한쪽 단에 작용하는 힘 전체, $A_0 = w \times t$ 는 막의 폭과 두께를 곱한 단면적, H_0 는 초기 길이, 그리고 ΔH 는 길이의 증분이다. $k_r = 469$, $k_\theta = 63$, $k_\phi = 20$ 을 적용하면 $Y \approx 1.02\text{TPa}$ 의 값이 나온다(Wang 등, 2004). 이 때 튜브의 두께는 0.34nm를 사용하였다. 그러나 위 계산에서 흑연 막의 두께를 명확하게 정의하는 것이 어렵다는 문제가 있다. 따라서 본 연구에서는 일반적인 Young 탄성계수 대신에 외력을 나노튜브의 원주 길이로 나눈 후 그 값을 변형률로 나눈 계수 $K(=F/C/\epsilon)$ 를 나노튜브의 물성으로 계산하였다(Cornwell & Wille, 1997).

4. 탄소나노튜브의 압축거동

이 연구에서 보 요소를 이용한 모델이 나노튜브의 거동을 적절히 묘사하는 것을 검증하기 위하여 나노튜브의 양단에 압축력을 가하고 그 압축거동을 계산하였다. 대상 나노튜브는 단층 형으로 그 대표 모델은 그림 4와 같다.

이 나노튜브의 양단에 일정 크기의 압축 수직력을 가하고, 보 이론을 포함한 해석 방법으로 그 거동을 묘사하고 그 결

과를 비교하여 그 유효성을 검증한다.

4.1 밀도함수이론에 의한 해석

가장 기초가 되는 밀도함수이론에 의한 해석을 수행하였다. 해석대상은 암체어 형(5,5), 지그재그 형(14,0)과 (17,0)이고 그림 4에서 빨간색 띠 부분(격자구조 1층)의 원자 층에 대한 압축력을 가하고 그 길이 변화 및 에너지 변화를 관찰하였다.

(5,5)형의 경우 탄소 사이의 평균 거리는 최저 에너지 상태에서 0.143nm이고, 압축 상태에서 0.141nm까지 짧아졌다. 최저 에너지 상태에서 격자구조 1층의 길이는 $L_0 = 0.4928\text{nm}$

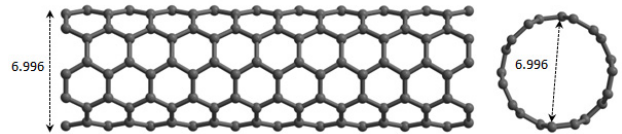


그림 5 (5,5) 탄소나노튜브(단위 $A=0.1\text{nm}$)

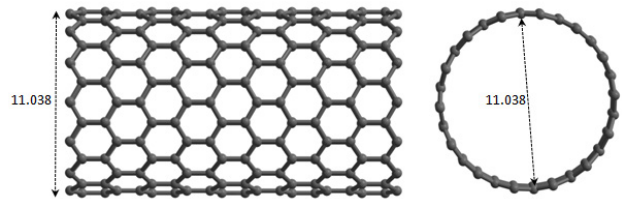


그림 6 (14,0) 탄소나노튜브

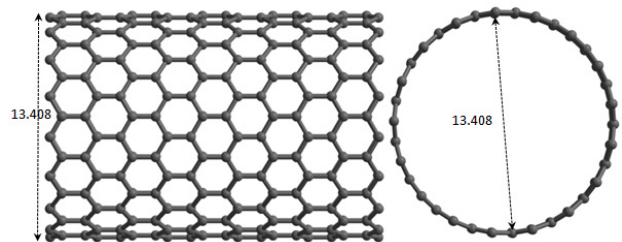


그림 7 (17,0) 탄소나노튜브

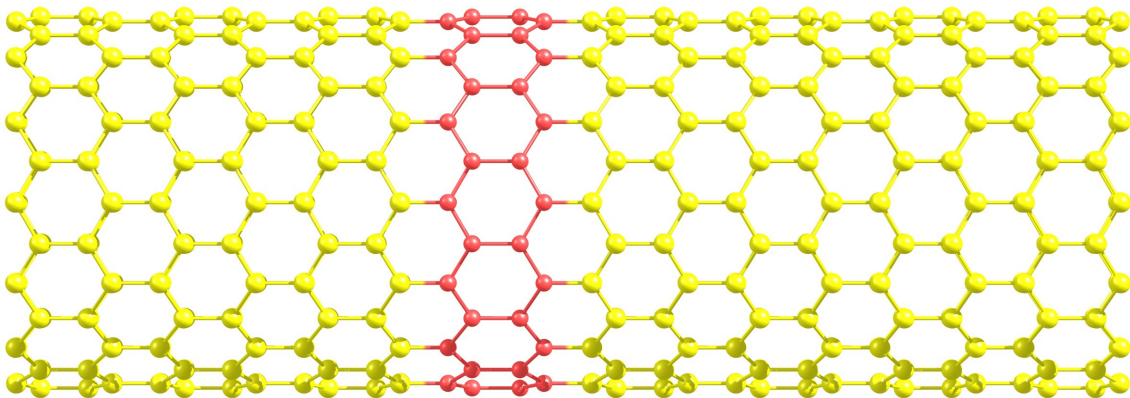


그림 4 지그재그 형(14,0) 탄소나노튜브

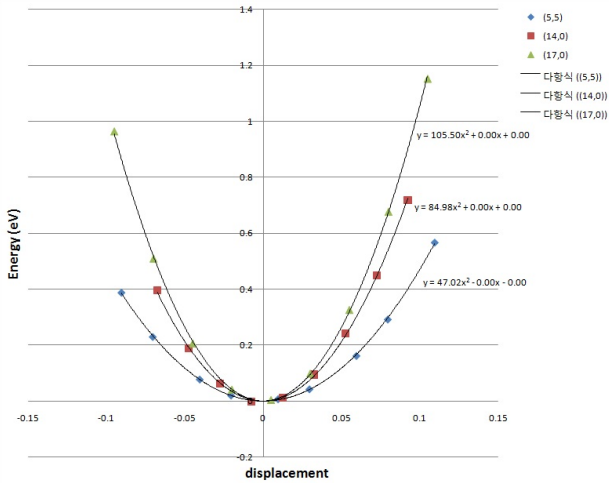


그림 8 변위 - 나노튜브에 저장된 탄성 에너지

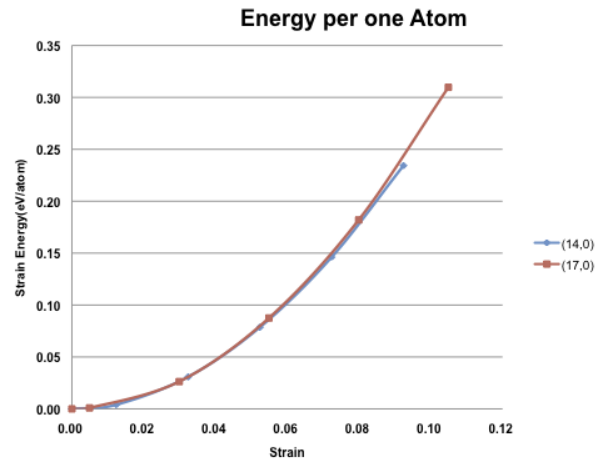


그림 9 원자 하나 당 탄성에너지 - 변형을 관계

이다.

(14,0)형의 경우 탄소 사이의 평균 거리는 최저 에너지 상태에서 0.1425nm이고, 압축 상태에서 0.1417nm까지 짧아졌다. 최저 에너지 상태에서 격자구조 1층의 길이는 $L_0 = 0.42736\text{nm}$ 이다.

(17,0)형의 경우 탄소 사이의 평균 거리는 최저 에너지 상태에서 0.14266nm이고, 압축 상태에서 0.14131nm까지 짧아졌다. 최저 에너지 상태에서 격자구조 1층의 길이는 $L_0 = 0.42751\text{nm}$ 이다.

위의 자료들을 이용하여 일정 변위에서의 에너지 레벨을 계산할 수 있다. (14,0) 나노튜브의 경우 격자구조 1층의 에너지 함수는 다음과 같다(그림 8):

$$E(u) = 84.98u^2 \quad (19)$$

변형률이 0.04 일 때의 변위는 $u = 0.04L_0 = 0.04 \times 0.42736\text{nm} = 0.0171\text{nm}$ 이며, 격자구조 1층에 저장되는 탄성 에너지는 식 (19)로부터 $E = 84.98 \times 0.0171^2 = 2.4849\text{ (eV)}$ 의 값을 얻는다. 따라서 격자구조 1층에 $14 \times 4 = 56$ 개의 원자가 있는 것을 고려하면 원자 하나당의 탄성 에너지는 $2.4849/56 = 0.044373\text{ (eV/atom)}$ 을 얻는다.

4.2 분자동역학에 의한 해석과의 비교

4.1 절에서 계산한 문제에 대한 분자동역학적 해석은 Cornwell & Wille(1997)의 결과를 비교하였다. 이 논문에서는 고전적인 분자동역학을 사용하여 탄소나노튜브의 원자당 포텐셜에너지를 계산하였으며, 그 결과는 밀도함수이론에 의한 결과인 그림 9와 일치한다.

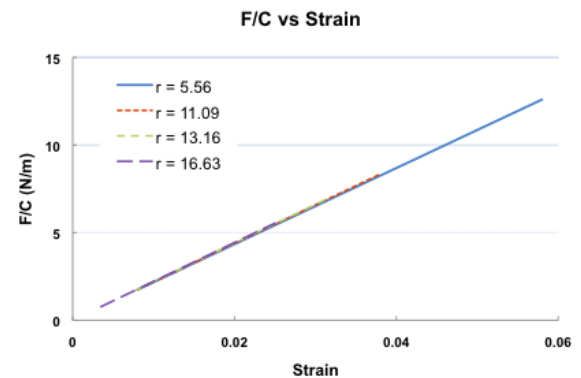


그림 10 F/C vs 변형을 그래프(Cornwell & Wille, 1997)

이 논문에서의 또 다른 결과는 다음의 식으로 나타난다:

$$K = 0.412 \times r + 214.8\text{ (N/m)} \quad (20)$$

이 식에서 나노튜브 반지름 r 의 단위는 Å이며, K 값을 크게 변화시키지 않는다. 여기서 K 는 나노튜브가 받는 힘(F)을 나노튜브의 원주(C)로 나누고 이것을 응력 대신 이용하여 변형률과의 그래프를 그렸을 때의 기울기이다(그림 10). 나노튜브에서 응력 보다 F/C 가 의미있는 이유는 나노튜브의 두께를 산정하기가 쉽지 않기 때문이다. 이 그래프에서의 기울기는 일반적인 Young 탄성계수 E 와 다르게 N/m 의 단위를 가진다.

4.3 구조역학(탄성보 모델)을 이용한 해석

ABAQUS의 보 요소(beam element)는 3차원 공간에서의 1차원 선요소이다. 이 요소의 변형은 곡률의 변화(curvature change), 길이의 변화(axial stretch), 그리고 비틀림

(torsion)으로 이루어져 있다. 특별한 경우에 전단 변형과 (Timoshenko beam) 뒤틀림(warping)을 묘사할 수 있는 보 요소를 이용할 수 있다. 보 요소의 장점은 기하학적으로 단순하고 자유도가 적은 것인데 이는 동시에 단점이기도 하다. 이러한 보의 단점을 보완하기 위한 프레임 요소가 있다. 이 요소는 철골 구조 등에 효과적으로 사용할 수 있는 것으로 두 개의 절점으로 이루어져 있으며 초기에는 직선이고 세장비가 큰 요소이다. 요소의 양 끝단에서 축력, 휨 모멘트, 그리고 토크에 저항한다. 소 변형과 대변형 (small strain) 모델을 모두 가지고 있으며 양단에서의 소성힌지(plastic hinge)도 모델링할 수 있다. 그러나 본 연구의 특성상 소성 변형의 가능성을 배제해야 하므로 완전 탄성인 경우만 고려하였다.

Euler-Bernoulli 보 이론을 따르는 프레임 요소는 수평 방향 변위에 대하여 4차 보간 함수를 사용한다. 소성 힌지를 모델링할 수 있으나 본 문제의 가정으로부터 소성 변형을 배제하였다. 보의 양 끝단과 중앙에서 힘과 모멘트, 축 방향 탄성 변형률, 곡률에 대한 결과 값을 얻을 수 있다. 그림 11에서 보는 바와 같이 이 요소에서 정의되는 힘은 전부 15개로, 각 단에서의 한 개의 축력(N), 두 개의 전단력(N_1, N_2), 두 개의 휨 모멘트(M_1, M_2), 한 개의 비틀 모멘트(T), 그리고 중앙 점에서의 두 개의 전단력과(N_1, N_2) 하나의 축력(N)으로 이루어져 있다. 이 요소는 미소변형 (small strain, small deformation) 문제와 대변형 (small strain, large deformation)을 해석할 수 있으나 변형률 자체가 큰 문제 (finite strain)에는 적용할 수 없는 단점이 있다.

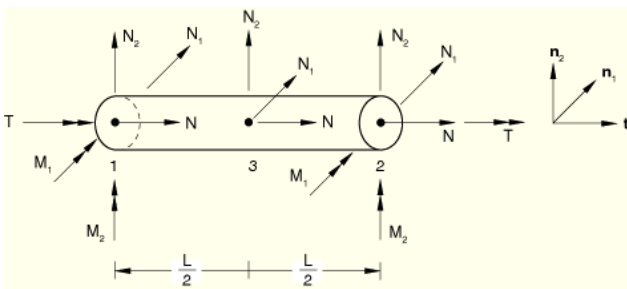


그림 11 공간상의 프레임 요소에 작용하는 힘과 모멘트

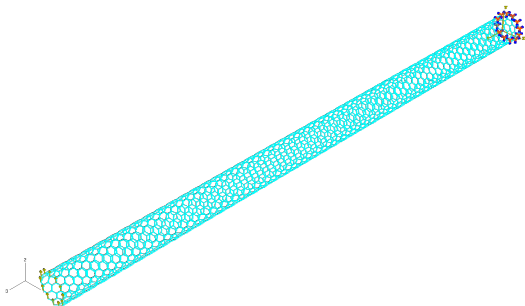


그림 12 나노튜브의 유한요소 모델(하중 전)

본 연구에서는 위에 소개한 프레임 요소를 사용하여 나노튜브의 압축 거동을 재현하는 것을 목표로 하였다. 4860개의 노드(원자)를 사용하여 구성된 나노튜브 모델은 그림 12와 같다. 이 나노튜브는 지그재그 형(11,0)을 묘사한 것으로 외력을 받기 전의 평형 상태에서 지름 1nm, 길이 20.24766nm이다.

기존의 연구에서 밝혀진 탄소나노튜브의 물성(Li & Chou, 2003)은 $k_r=469\text{kcal/mol}^{-1}\text{Å}^{-2}$, $k_\theta=63\text{kcal/mol}^{-1}\text{rad}^{-1}$, $k_\phi=20\text{kcal/mol}^{-1}\text{rad}^{-1}$ 이다. 이 중에서 가장 중요한 물성인 k_r 과 k_θ 를 일치시키기 위하여 $\frac{EA}{L}=k_r$, $\frac{EI}{L}=k_\theta$ 를 이용하였다. 먼저 원형 보의 단면적 $A=r^2\pi$, 중심을 지나는 1축에 대한 단면 2차 모멘트 $I=\frac{\pi r^4}{4}$ 을 위 식들에 대입하면

$$\frac{E\pi r^2}{L}=k_r, \quad \frac{E\pi r^4}{4L}=k_\theta. \quad (21a)$$

이제 두 번째 식을 첫 번째 식으로 나누면,

$$r^2=4\frac{k_\theta}{k_r}=4\times 63/469=0.537313,$$

$$r=0.733017\text{Å}=0.0733\text{nm}.$$

따라서 보요소의 단면적은 $A=\pi r^2=0.01688\text{nm}^2$ 이고, 식 (21a)에서 $E=k_r\times L/(\pi r^2)=k_r\times 0.15/0.01688=4.1677\times 10^5\text{kcal/mol}^{-1}\text{nm}^{-3}$ 이다. 이 값을 다시 환산하면,

$$E=4.1677\times 10^5\times 0.0433641\times 1.602\times 10^{-19}\times 10^{27}=2.8952\times 10^{12}\text{J/m}^3, \text{ 또는 } E=2.8952\times 10^{-6}\text{N/nm}^2\text{이다.}$$

뒤틀림 비 $\nu=0.19$ 를 가정하고 위 값들을 만족시키는 프레임 요소 하나의 크기와 물성을 다음과 같이 결정하였다.

$$r=7.33E-2\text{nm}, \quad L=0.1504\text{nm}, \quad (21b)$$

$$E=2.8952E-6\text{N/nm}^2, \quad G=1.2165E-6\text{N/nm}^2.$$

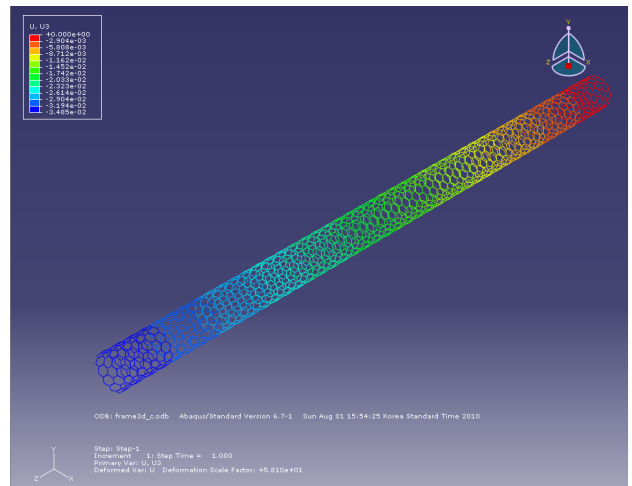


그림 13 Z 방향 변위 contour(nm)

표 1 하중에 따른 변위와 기울기

하중 (node 당)	끝단 변위 (nm)	변형률 (strain)	원주 (nm)	기울기 K (N/m)
$-1.0 \times 10^{-10} \text{N}$	3.485×10^{-2}	1.721×10^{-3}	3.141592	221.9
$-2.0 \times 10^{-10} \text{N}$	6.970×10^{-2}	3.442×10^{-3}	3.141592	221.9
$-2.0 \times 10^{-10} \text{N}$	10.455×10^{-2}	5.163×10^{-3}	3.141592	221.9
$-4.0 \times 10^{-10} \text{N}$	1.394×10^{-1}	6.885×10^{-3}	3.141592	221.9

나노튜브 모델의 강성을 계산하기 위하여 자유단의 12개 노드 각각에 일정한 압축력($1, 2, 3, 4 \times 10^{-10} \text{N}$)을 재하하고 그 변위를 관찰하였다. 네 하중에 대하여 그 변위 및 변형률을 계산하고 기울기 K 를 계산하였다(표 1). 계산결과 기울기는 $K=221.9 \text{N/m}$ 를 얻었으며, 이 값을 식 (20)과 비교하면 ($r=5\text{\AA}$ 에 대하여 $K=216.875 \text{N/m}$), 이는 모델링의 차이와 원자 간의 거리 오차(1.42\AA vs 1.5\AA) 등을 고려할 때 의미있는 결과라 할 수 있다.

4. 결 론

Doublet Mechanics(Ferrari 등, 1997)의 이론을 확장하여 나노튜브의 구조를 원자와 원자 사이의 힘을 나타내는 보 요소로 모델링하고, 이 모델을 이용하여 단층 나노튜브의 압축 변형을 재현하였다. 이 해석이 물리학에서 주로 이용하는 밀도함수이론 해석과 공학에서 주로 이용하는 분자동역학 해석의 결과와 잘 일치함을 보였다. 따라서 탄소나노튜브의 선형 변형 거동을 매우 효율적으로 해석할 수 있다. 또한 다른 종류의 원자들에 대해서도 원자 사이의 힘이 정의되면 같은 방법을 써서 모델을 구성할 수 있다.

이 모델이 더욱 정확하게 실재 현상을 설명하기 위해서는 선형 거동 뿐만 아니라 비선형 대변형 현상을 잘 설명할 수 있어야 하며, 따라서 보 요소의 물성을 비선형 영역으로 확장하고 기하 비선형 이론을 사용할 필요가 있다. 또한 다층 나노튜브의 해석을 위하여 반데르발스 힘에 대한 추가 고려가 필요하다.

감사의 글

이 논문은 2007년도 정부재원으로 학술진흥재단의 지원을 받아 연구되었음(KRF-2007-331-D00465).

참 고 문 헌

박재균 (2005) 미소구조에서의 탄소성 모델, 한국전산구조공학회 논문집, 18(4), pp.453~458.
 양승화, 조맹효 (2007) 분자동역학 시뮬레이션을 이용한 나노

튜브/고분자 나노복합재의 물성 해석, 대한기계학회 논문집 A권, 31(2), pp.237~244.

윤영귀 (2009) 전자구조계산물리학: 밀도범함수이론, 물리학과 첨단기술, Jan/Feb.

Brenner, D.W. (1990) Empirical Potential for Hydrocarbons for use in Simulating the Chemical Vapor Deposition of Diamind Films, *Physical Review B*, 42(15), pp.9458~9471.

Cornwell, C.F., Wille, L.T. (1997) Elastic Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes in Compression, *Solid State Comm.*, 101(8), pp.555~558.

Ferrari, M., Granik, V.T., Iman, A., Nadeau, J.C. (1997) *Advances in Doublet Mechanics*, Springer.

Iijima, S. (1991) Helical Microtubes of Graphite Carbon, *Nature*, 354, pp.56~58.

Iijima, S., Barabec, C., Maiti, A., Bernholc, J. (1996) Structural Flexibility of Carbon Nanotubes, *J. Chem. Phys.*, 104(5), pp.2089~2092.

Kresse, G., Furthmuller, J. (1996a) Efficient Iterative Schemes for ab Initio Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set, *Physical Review B*, 54, pp.11169~11186.

Kresse, G., Furthmuller, J. (1996b) Efficiency of Ab-Initio Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set, *Comput. Mater. Sci.*, 6, pp.15~50.

Kumar, S. (2004) New Class of Fibers: Composite Made with Carbon Nanotubes Offer Improved Mechanical & Electrical Properties, *Georgia Institute of Technology Research News*.

Li, C., Chou, T. (2003) A Structural Mechanics Approach for the Analysis of Carbon Nanotubes, *Int. J. Solids and Structures*, 40, pp.2487~2499.

Perdew, J.P., Burke, K., Ernzerhof, M. (1996), Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters*, 77, pp.3865~3868.

Ru, C.Q. (2000a) Effective Bending Stiffness of Carbon Nanotubes, *Physical Review B*, 62, pp.9973~9976.

Ru, C.Q. (2000b) Elastic Buckling of Single-Walled Carbon Nanotube Ropes Under High Pressure, *Physical Review B*, 62, pp.10405~10408.

Sanchez-Portal, D., Artacho, E., Soler, J.M., Rubio, A., Ordejon, P. (1999) Ab Initio Structural, Elastic, and Vibrational Properties of Carbon Nanotubes, *Physics Review B*, 59, pp.12678~12688.

Tersoff, J. (1989) Modeling Solid-State Chemistry: Interatomic Potentials for Multicomponent Systems,

Physical Review B, 39(8), pp.5566~5568.

Tersoff, J. (1992) Energies of Fullerenes, *Physical Review B*, 46, pp.15546~15549.

Wang, X., Zhang, Y.C., Xia, X.H., Huang, C.H.
(2004) Effective Bending Modulus of Carbon Nanotube with Rippling Deformation, *International Journal of Solids and Structures*, 41, pp. 6429~6439.

White, C.T., Robertson, D.H., Mintmire, J.W.
(1993) Helical and Rotational Symmetries of

Nanoscale Graphite Tubules, *Physical Review B*, 47(9), pp.5485~5488.

- 논문접수일 2010년 8월 2일
- 논문심사일 2010년 8월 5일
- 게재확정일 2010년 8월 31일