

Single Wall Carbon Nanotube의 등가 연속체 모델에 대한 연구

Equivalent Continuum Model for the Single Wall Carbon Nanotube

김 병 구* 전 흥 재**
Kim, Byoung-Gu Chun, Heoung-Jae

ABSTRACT

In this study, an equivalent continuum model for single wall carbon nanotube is proposed. The model links interatomic potentials and atom structure of a materials to a constitutive model on the continuum level. The Young's modulus and shear modulus were predicted by the model. The predictions were in good agreement with the prior experimental results available in the literatures. Also, the strain energy of the carbon nanotube was predicted as a function of the radius of the carbon nanotube.

1. 서 론

탄소나노튜브는 Iijima⁽¹⁾가 처음 발견한 이후로 우수한 기계적 특성으로 인하여 주사탐침현미경 (Scanning Probe Microscope), 원자현미경 (atomic Force Microscope)의 탐침 이나 복합재료의 강화제로 사용된다.⁽²⁾ 이러한 나노튜브의 기계적 물성값에 대한 실험 결과를 결과는 (Young's Modulus)가 1.28~1.8 TPa로 실험자 마다 다른 값을 보이고 있으며,^{(3),(4)} 나노튜브의 기계적 물성값을 직접적으로 측정하는 것은 매우 어렵기 때문에 현재 나노튜브의 해석은 컴퓨터 시뮬레이션을 사용한다.⁽⁵⁾ 그러나 시뮬레이션에 의한 나노튜브의 탄성계수는 640 GPa~5.5 TPa로 연구자마다 편차가 크게 나타나는데 이러한 편차는 단일벽 탄소나노튜브의 두께값을 정하는 것에 의해 결정된다.^{(6),(7),(8)} Yakobson⁽⁸⁾은 단일벽 탄소나노튜브의 두께를 탄소원자의 크기인 0.066 nm를 사용하여 탄성계수를 계산하였고 실제 이는 다중벽 (Multiwall)에서 층간 사이의 거리인 0.34 nm보다는 큰 값을 사용하였다. 탄소나노튜브의 시뮬레이션은 *ab initio* 와 분자 동역학 (Molecular Dynamics)을 통해 주로 이루어져 왔다. 그러나 이러한 방법들은 복잡한 형상이나 크기가 큰 나노구조물의 경우 많은 계산과 고가의 컴퓨터 장비들이 요구된다. 따라서 큰 구조물까지도 충분히 짧은 시간에 기계적 거동을 해석할 수 있는 연속체 수치 해석방법이 요구된다.

본 연구에서는 분자간의 상호작용을 가장 잘 표현할 수 있는 스프링 구조를 이용하여 나노튜브에 대한 연속체 모델의 구성방법을 제안함으로써 나노튜브에 대한 기계적 물성을 예측하고, 이 흑연면이 나노튜브를 형성하는데 필요한 굽힘강성 (Flexural Rigidity)을 결정하였다. 제안된 모델에 실제 다중벽 나노튜브의 층간 사이 거리인 0.34 nm를 이용하여 얻은 흑연면의 기계적물성 값은 실험결과 잘 일치하는 결과를 보였다.

* 연세대학교 기계공학과 석사과정

** 연세대학교 기계공학부 부교수

2. 흑연면의 연속체 모델

2.1 분자역학

분자역학은 고전역학 이론을 사용하여 물질에 대한 분자구조 및 동역학을 연구 분석하는 계산분야를 말하며 이 분야에서는 물질들을 구성하는 원자들을 고전역학에서의 같이 개개의 입자로 취급하고 이들 입자 사이의 상호작용을 간단한 위치 에너지 함수를 이용하여 계산한다. 나노 구조물에 대한 전체 위치 에너지는 (1)식과 같이 표현된다.⁽⁹⁾

$$E^{tot} = E^b + E^\theta + E^\tau + E^\omega + E^{vdW} + E^{el} \quad (1)$$

여기서 E^{tot} 은 나노 구조물 전체에 대한 위치 에너지를 나타내고, $E^b, E^\theta, E^\tau, E^\omega, E^{vdW}, E^{el}$ 은 각각 본드 에너지 (Bond Energy), 각 에너지 (Angle Energy), 비틀림 각 에너지 (Torsion Energy), 반전 각 에너지 (Inversion Energy), van der Waals 에너지, 정전기 에너지 (Electrostatic Energy)를 나타낸다.

2.2 단위체적요소 (RVE) 구성

흑연면의 구조는 그림 1과 같이 하나의 탄소 원자는 3개의 다른 탄소원자와 sp^2 결합으로 2차원의 육각형 벌집무늬형태를 이루고 있다.

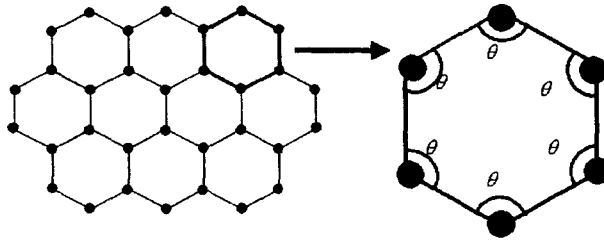


그림 1. 흑연면의 구조와 단위 격자

그림 1의 한 개의 육각형상을 흑연면의 단위 격자라고 하고 단위격자에 존재하는 분자역학적 에너지에 대해 생각해보면 변형이 작다는 가정 하에 단위 격자의 2차원 형상으로부터 비틀림 각 에너지, 반전 각 에너지 그리고 비결합 상호 작용에 의한 에너지들은 무시 될 수 있으므로 단위격자에 대한 분자역학적 에너지는 본드에너지와 각 에너지만 고려 할 수 있다.

본드 에너지와 각 에너지는 각각 다음과 같은 식으로 표현 할 수 있다.

$$E^b = K_L(L - L_0)^2 \quad (2)$$

$$E^\theta = K_\theta(\theta - \theta_0)^2 \quad (3)$$

여기서 L_0, θ_0, L, θ 는 각각 탄소 원자들이 평형을 이루고 있는 상태에서의 원자간 거리, 평형을 이룬 상태에서의 원자사이의 각, 변형 후의 원자간 거리, 변형 후의 원자 사이의 각을 나타내며 K_L, K_θ 는 각각의 변형에 대한 힘 상수 (Force Constant)를 나타낸다. 여기서 K_L 와 K_θ 는 분자 역학적 파라미터라고 하며 본 연구에서는 AMBER (Assisted Model Building and Energy Refinement) 역장 (Force Field)의 파라미터를 사용하였다. K_L 와 K_θ 에 대한 파라미터 값은 식(4)와 같다.⁽¹⁰⁾

$$K_L = 469 \text{ kcal/mol} \cdot \text{\AA}^2 = 3.26 \times 10^{-7} \text{ nJ/bond} \cdot \text{nm}^2$$

$$K_\theta = 63 \text{ kcal/mol} \cdot \text{rad}^2 = 4.38 \times 10^{-10} \text{ nJ/angle} \cdot \text{rad}^2 \quad (4)$$

평형 상태에서의 원자간 거리 L_0 는 0.14 nm, 원자간 이루는 각 θ_0 는 120 °이다.

분자간 상호 작용에 의한 에너지를 스프링으로 연결된 구조에서의 변형에 의한 에너지와 같다고 하면 스프링에 의한 에너지는 다음의 식(5),(6)과 같이 나타낼 수 있다.

$$E_{spring}^b = \frac{1}{2} \alpha (L - L_0)^2 \quad (5)$$

$$E_{spring}^\theta = \frac{1}{2} \beta (\theta - \theta_0)^2 \quad (6)$$

여기서 E_{spring}^b , E_{spring}^θ 은 각각 선형 스프링에 의한 에너지, 각 스프링에 의한 에너지를 나타내며, α 는 선형 스프링 상수를 나타내며 $2K_L$ 의 값을 가지고 β 는 각 스프링 상수를 나타내며 $2K_\theta$ 의 값을 가진다.

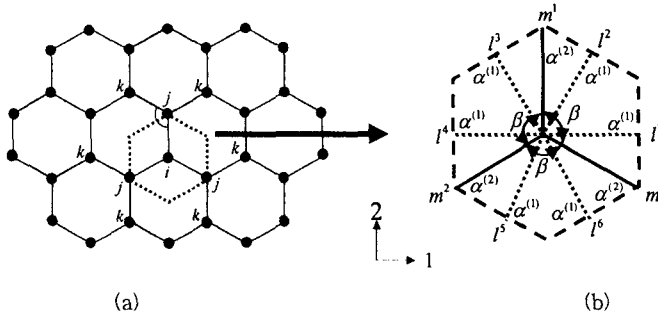


그림 2. 흑연면에서 단위체적요소의 스프링 구조와 단위벡터

본 연구에서는 연속체 모델의 강성 행렬 구하기 쉽게 하기 위해서 그림 2와 같이 한 개의 원자를 중심으로 스프링이 사방으로 뻗어나가는 형상을 단위체적요소로 설정하였다. 하지만 그림 2.(a)에서 보는 바와 같이 단위체적요소의 중심이 되는 i 원자와 i 원자와 이웃하고 있는 j 원자, 그리고 j 원자와 이웃하고 있는 k 원자에 대해서 이 i, j, k 원자가 이루고 있는 각 스프링의 영향을 단위체적요소에 고려해 주기 위해 다음과 같이 각 스프링을 선형 스프링으로 연결된 구조로 바꾸어주었다.

그림 3에서 보는 바와 같이 평형 상태에서의 탄소 원자간의 거리 (bond length)를 L_2 , 분자간 이루는 각을 θ_0 , 그리고 단위 격자의 중심으로부터 격자의 변에 수직한 거리를 L_1 이라고 하고 단위 격자의 각 스프링의 스프링 상수를 β 라고 하고 변환하고자 하는 선형 스프링 상수를 $\alpha^{(1)}$ 이라고 한다.

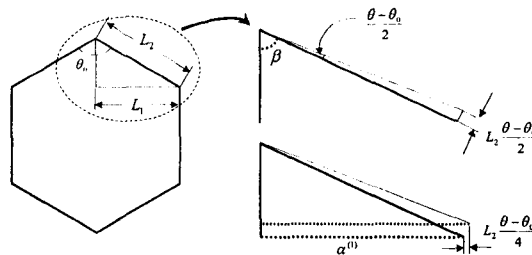


그림 3. 각 스프링의 선형 스프링으로의 변환

단위 격자의 각 스프링이 $(\theta - \theta_0)$ 만큼 변형되었다면 그림 3의 오른쪽 그림과 같이 반쪽에 대한 각 스프링의 회전은 $(\theta - \theta_0)/2$ 만큼 회전하고 이 회전에 의한 에너지는 식(7)과 같이 표현된다.

$$E_{rot} = \frac{1}{2} \beta \left(\frac{\theta - \theta_0}{2} \right)^2 \quad (7)$$

또한 길이 L_1 을 가지는 선형 스프링의 경우 $(\theta - \theta_0)/2$ 의 회전에 의해 선형 스프링의 에너지에 영향을 미치는 수평방향의 변위는 $L_2(\theta - \theta_0)/4$ 만큼 변형하고 이 변형에 의한 선형 스프링의 에너지는 식(8)과 같이 표현된다.

$$E_{lin} = \frac{1}{2} \alpha^{(1)} \left(L_2 \frac{\theta - \theta_0}{4} \right)^2 \quad (8)$$

각 스프링의 에너지와 선형 스프링의 에너지를 등가 시킴에 의해 선형 스프링 상수 $\alpha^{(1)}$ 은 각 스프링 상수 β 와 탄소 원자간 거리 L_2 의 함수로 식(9)과 같이 표현된다.

$$\alpha^{(1)} = \frac{4\beta}{L_2^2} \quad (9)$$

결국 스프링 상수 $\alpha^{(1)}$, $\alpha^{(2)}$, β 를 분자역학적 파라미터 (힘 상수)로 표현하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\alpha^{(1)} = \frac{8K_\theta}{(L_2)^2}, \quad \alpha^{(2)} = 2K_L, \quad \beta = 2K_\theta \quad (10)$$

2.3 단위체적요소의 연속체 모델

분자역학적 파라미터를 이용한 단위체적요소는 그림 2에서 보는 바와 같이 변에 수직인 방향으로 스프링 상수 $\alpha^{(1)}$ 을 갖는 6개의 선형 스프링과 1축에 대해 90° , 210° , 330° 방향으로 스프링 상수 $\alpha^{(2)}$ 을 갖는 3개의 선형 스프링, 그리고 3개의 $\alpha^{(2)}$ 스프링 사이에 스프링 상수 β 를 갖는 각 스프링 3개로 구성되며 주어진 스프링에 대한 단위 벡터는 표 1과 같이 정의된다.

| 각도 (θ) | | 1축 방향 | | 2축 방향 | |
|-----------------|-------------|---------|---------------|---------|---------------|
| θ^1 | 0° | l_1^1 | 1 | l_2^1 | 0 |
| θ^2 | 60° | l_1^2 | 1/2 | l_2^2 | $\sqrt{3}/2$ |
| θ^3 | 120° | l_1^3 | -1/2 | l_2^3 | $\sqrt{3}/2$ |
| θ^4 | 180° | l_1^4 | -1 | l_2^4 | 0 |
| θ^5 | 240° | l_1^5 | -1/2 | l_2^5 | $-\sqrt{3}/2$ |
| θ^6 | 300° | l_1^6 | 1/2 | l_2^6 | $-\sqrt{3}/2$ |
| θ^7 | 90° | m_1^1 | 0 | m_2^1 | 1 |
| θ^8 | 210° | m_1^2 | $-\sqrt{3}/2$ | m_2^2 | -1/2 |
| θ^9 | 330° | m_1^3 | $\sqrt{3}/2$ | m_2^3 | -1/2 |

표 1. 단위체적요소의 스프링에 대한 단위 벡터

여기서 l 은 스프링 상수 $\alpha^{(1)}$ 을 갖는 선형 스프링에 대한 단위 벡터이며 윗첨자는 스프링의 순서를 나타

내며 이 순서는 0° 에서부터 60° 간격으로 차례로 1에서 6번까지의 번호를 부여한다. 하첨자는 축의 방향을 나타낸다. 또한 m 은 스프링 상수 $\alpha^{(2)}$ 에 대한 단위 벡터를 나타내며 마찬가지로 윗첨자는 90° 에서 120° 간격으로 차례로 1에서 3번째 스프링, 그리고 하첨자는 축의 방향을 나타낸다.

$\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}, \beta$ 의 스프링으로 연결된 단위체적요소의 변형에 의한 위치 에너지는 식(11)과 같이 표현 할 수 있다.

$$E_{spring} = \frac{\alpha^{(1)}(L_1)^2}{2} \sum_{n=1}^6 l_i^n l_j^n l_k^n l_l^n \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + \frac{\alpha^{(2)}(L_2)^2}{2} \sum_{n=1}^3 m_i^n m_j^n m_k^n m_l^n \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \\ + \frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^3 \{ 2\delta_{ik} m_p^n m_j^n m_p^n m_l^n - 2m_i^n m_j^n m_k^n m_l^n \\ - \delta_{ik} m_p^n m_j^{n+1} m_p^{n+1} m_l^n + m_i^n m_j^{n+1} m_k^{n+1} m_l^n \\ - \delta_{ik} m_p^n m_j^n m_p^{n+1} m_l^{n+1} + m_i^{n+1} m_j^n m_k^n m_l^{n+1} \} \quad (i, j, k, l, p=1, 2) \quad (11)$$

여기서 E_{spring} 은 스프링으로 연결된 단위체적요소의 위치 에너지, ϵ_{ij} 는 변형을 텐서, δ_{ik} 는 Kronecker Delta를 나타낸다.

한편 두께 t 를 가지는 연속체 모델의 변형에 대한 변형률 에너지는 식(12)과 같이 탄성계수와 스트레인의 관계로 표현된다.

$$E_{conti} = \frac{V}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} = \frac{At}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \quad (i, j, k, l=1, 2) \quad (12)$$

여기서 E_{conti} 는 연속체 모델의 스트레인 에너지, V 는 단위체적요소의 부피, C_{ijkl} 은 강성 텐서 (Stiffness Tensor), A 는 6각 형상의 면적, t 는 단위체적요소의 두께를 나타낸다. 단위체적의 육각 형상의 면적은 식(13)으로 표현된다.

$$A = 2\sqrt{3}(L_1)^2 = \frac{3\sqrt{3}}{2}(L_2)^2 \quad (13)$$

스프링에 의한 위치 에너지 E_{spring} 와 연속체 모델의 스트레인 에너지 E_{conti} 를 등가 시키면 강성 텐서 C_{ijkl} 를 식(14)와 같이 구할 수 있다.⁽¹¹⁾

$$C_{ijkl} = \frac{\sqrt{3}\alpha^{(1)}}{6t} \sum_{n=1}^6 l_i^n l_j^n l_k^n l_l^n \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + \frac{2\sqrt{3}\alpha^{(2)}}{9t} \sum_{n=1}^3 m_i^n m_j^n m_k^n m_l^n \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \\ + \frac{2\sqrt{3}\beta}{9t(L_2)^2} \sum_{n=1}^3 \{ 2\delta_{ik} m_p^n m_j^n m_p^n m_l^n - 2m_i^n m_j^n m_k^n m_l^n \\ - \delta_{ik} m_p^n m_j^{n+1} m_p^{n+1} m_l^n + m_i^n m_j^{n+1} m_k^{n+1} m_l^n \\ - \delta_{ik} m_p^n m_j^n m_p^{n+1} m_l^{n+1} + m_i^{n+1} m_j^n m_k^n m_l^{n+1} \} \quad (i, j, k, l, p=1, 2) \quad (14)$$

위 식으로부터 강성계수를 구하면 식(15)과 같고,

$$C_{1111} = C_{2222} = \frac{\sqrt{3}}{8t} \left\{ 3\alpha^{(1)} + 2\alpha^{(2)} + \frac{2}{(L_2)^2} \beta \right\}, \quad C_{1122} = C_{2211} = \frac{\sqrt{3}}{4t} \left\{ \frac{1}{2} \alpha^{(1)} + \frac{1}{3} \alpha^{(2)} - \frac{1}{(L_2)^2} \beta \right\} \\ C_{1212} = \frac{1}{2} (C_{1111} - C_{1122}) = \frac{\sqrt{3}}{4t} \left\{ \frac{1}{2} \alpha^{(1)} + \frac{1}{3} \alpha^{(2)} + \frac{1}{(L_2)^2} \beta \right\} \quad (15)$$

식(15)에서 구한 결과로부터 단위체적요소의 연속체 모델은 등방성 (isotropic)을 갖음을 알 수 있다. 등방

성의 재료는 다음의 식(16)를 이용하여 체적탄성계수 (Bulk modulus; k), 전단 계수 (Shear Modulus; μ), 포와송 비 (ν), 탄성계수 (E)를 구한다.

$$k = \frac{(C_{1111} + C_{1122})}{2}, \quad \mu = C_{1212}, \quad \nu = \frac{k - \mu}{k + \mu}, \quad \frac{4}{E} = \frac{1}{k} + \frac{1}{\mu}, \quad (16)$$

식(16)에 의해 1.14 TPa의 탄성계수를 얻었으며 이는 표 2.에서 보는 바와 같이 탄성계수와 전단계수는 흑연면의 실험적 물성 값과 거의 근사하고 포와송비는 실험값에 비해서 오차를 보였으나 Quin⁽¹²⁾이 시뮬레이션한 결과에 의한 포와송비에 비해서는 실험값에 근접한 결과를 보인다.

| 연구 | 탄성계수 | 전단계수 | 포와송비 |
|-----------------------------|------|------|------|
| 제안된 모델 | 1.14 | 0.45 | 0.27 |
| 실험 ⁽¹³⁾ | 1.02 | 0.44 | 0.16 |
| Quin의 시뮬레이션 ⁽¹²⁾ | 0.99 | 0.42 | 0.37 |

표 2. 실험 및 이론에 의한 흑연면의 기계적 물성

3. 굽힘 강성

연속체 모델한 두께 t 를 가지는 흑연면을 나노튜브의 형상으로 원형으로 말리도록 하는데 관계되는 굽힘 강성에 대한 고전적인 탄성 이론은 다음과 같은 식으로 표현된다.

$$D = \frac{Et^3}{12(1-\nu^2)^2} \quad (17)$$

여기서 D , E , ν , t 는 각각 굽힘 강성 (Flexural Rigidity), 탄성계수, 포와송 비, 두께를 나타낸다.

그러나 실제 단일벽 나노튜브의 굽힘 강성은 나노튜브의 두께 t 를 다중벽 나노튜브의 층간거리인 0.34 nm로 하여 식(17)을 계산한 값보다 매우 낮은 값을 보인다.⁽⁸⁾

이러한 이유로 흑연면이 원형으로 말릴 때의 분자역학적 에너지인 반전각 에너지와 판이론으로부터 구한 변형률 에너지의 증가로서 굽힘강성을 구할 수 있다. 반전 각 에너지는 식(18)과 같이 표현 된다.⁽¹⁴⁾

$$E^w N = \frac{4\pi L^m K^w}{3\alpha^2 r^m} \quad (18)$$

여기서 E^w , N , L^m , α , r^m , 은 각각 1개의 원자에 대한 반전 각 에너지, 나노튜브의 탄소 원자 개수, 나노튜브의 길이, 원자간 길이, 나노튜브의 반경 그리고 K^w 는 수정된 반전 각 힘 상수 (Inversion Force Constant)로서 0.0018 eV · nm²/atom의 값을 갖는다.

또한 연속체 모델에서 길이 L^c 를 가지는 판이 반경 r^c 의 실린더 형상으로 굽혀질 때의 변형률 에너지를 다음과 같이 주어진다.⁽¹⁵⁾

$$E^c = \frac{\pi D L^c}{r^c} \quad (19)$$

식(18)과 (19)의 분자역학적 반전 각 에너지와 연속체 모델의 변형률 에너지를 증가 시키면 굽힘 강성은 다음 식과 같이 결정된다.

$$D = \frac{4K^w}{3\alpha^2} \quad (20)$$

이 식으로부터 흑연면의 굽힘 강성은 1.22eV를 구하였고 이 값은 Yakobson⁽⁸⁾, Robertson⁽¹⁶⁾의 시뮬레이션 결과인 0.85eV 보다 큰 값을 보였다.

그림 4에서와 같이 스트레인 에너지에 대한 연속체 모델과 기존 연구자들의 시뮬레이션 결과를 비교해보면 탄소나노튜브의 연속체 모델이 기존 연구 결과와 잘 일치한다.

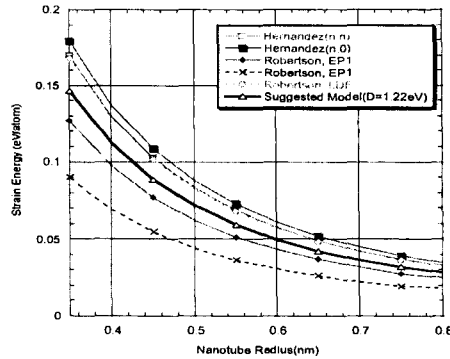


그림 4. 흑연면의 원형 굽힘에 의한 변형률 에너지

4. 결 론

본 연구는 탄소나노튜브의 연속체 모델을 구현하기 위해 탄소나노튜브 격자의 주기적인 특성으로부터 단위체적요소를 설정하여 단위체적요소 내의 탄소 원자간 분자역학적 상호관계를 스프링의 연결된 구조로 인식하고 분자역학적 위치 에너지와 연속체 모델의 변형률에너지를 등가 시키는 방법을 제안하였고 이를 통하여 탄소나노튜브의 기계적 물성값을 예측하였다. 실제 다중벽 탄소나노튜브의 층간 사이거리를 사용한 나노튜브 연속체 모델의 기계적 물성값은 선연구자의 실험 연구 결과와 잘 일치하였다. 또한 탄소나노튜브의 굽힘 강성도 같은 방법으로 분자역학적 위치에너지와 연속체 모델의 변형률에너지를 등가 시키는 방법으로부터 예측하였으며 연속체 모델의 변형률에너지는 기존 연구자들의 시뮬레이션 결과와 근사한 값을 보였다.

참고문헌

1. S. Iijima, "Helical Microtubes of Graphitic Carbon," *Nature*, Vol.354, No.6348, 1991, pp.56~58
2. H. Dai, J. Hafner, A. Rinzler, D. Colbert., R. Smally, "Nanotubes for Nanoprobes," *Nature*, Vol.384, No.6605, 1996, pp.147~150
3. M. M. J. Treacy., T. W. Ebbesen., J. M. Gibson., "Exceptionally High Young's Modulus Observed for Individual Carbon Nanotubes," *Nature*, Vol.381, No.6584, 1996, pp.678~680
4. E. W. Wong., P. E. Sheehan., C. M. Liever., "Nanobeam Mechanics : Elasticity, Strength, and Toughness of Nanorods and Nanotubes" , *Science*, Vol.277, No.26, 1997, pp.1971~1975
5. S. Roche., "Carbon Nanotubes : Exceptional Mechanical and Electronical Properties," *Annales de Chimie Science des Materiaux*, Vol.25, No.7, 2000, pp.529~532

6. A. Krishnan., E. Dujardin., T. W. Ebbesen., P. N. Yianilos., M. M. J. Treacy., "Young's Modulus of Single-Walled Nanotubes," *Physical Review B*, Vol.58, No.20, 1998, pp.14013~14019
7. E. Hernandez., C. Goze., P. Bernier., A. Rubio., "Elastic Properties of C and B_xC_yN_z Composite Nanotubes," *Physical Review Letters*, Vol.80, No.20, 1998, pp.4502~4505
8. B. I. Yakobson., C. J. Brabec., J. Bernholc., "Nanomechanics of Carbon nanotubes : Instabilities beyond Linear Response." *Physical Review Letters*, Vol.76, No.14, 1996, pp.2511~2514
9. A. K. Rappe, *Molecular Mechanics Across Chemistry*, University Science Books, Sausalito, California, 1997, p.5
10. W. D. Cornell., P. Cieplak., C. I. Bayly., I. R. Gould., K. M. Merz, Jr., D. M. Ferguson., D. C. Spellmeyer., T. Fox., J. W. Caldwell., P. A. Kollman., "A Second Generation Force Field for the Simulation of Proteins, Nucleic Acid, and Organic Molecules," *Journal of the American Chemical Society*, Vol.117, No.19, 1995, pp.5179~5197
11. M. Ostoja-Starzewski., P. Y. Sheng., K. Alzebdeh., "Spring Network Models in Elasticity and Fracture of Composites and Polycrystals," *Computational Materials Science*, Vol.7, No.1-2, 1996, pp.82~93
12. D. Qian, W. K. Liu., R. S. Ruoff., "Mechanics of C₆₀ in Nanotubes," *Journal of Physical Chemistry B*, Vol.105, No.44, 2001, pp.10753-107589.
13. O. L. Blaklee, D. G. Proctor., E. J. Seldin., G. B. Spence., T. Weng., "Elastic Constant of Compression-annealed pyrolytic graphite," *Journal of applied Physics*, Vol.41, No.8, 1970, pp.3373~3382
14. G. M. Odegard., T. S. Gates., L. M. Nicholson., K. E. Wise., "Equivalent-Continuum Modeling of Nano-Structured Materials," *Composite Science and Technology*, Vol.62, No.14, 2002, pp.1869~1880
15. S. P. Timoshenko., S. Weinowsky-Kreiger, *The Theory of Plates and Shells*, McGraw Hill, New York, 1959. pp.47
16. D. H. Robertson., D. W. Brenner., J. W. Mintmire., "Energetics of Nanoscale Graphitic Tubules" *Physical Review B*, Vol.45, No.21. 1992, pp.12592-12595