

다중스케일 기법을 이용한 카본나노튜브 복합재료의 물성치 계산

김정택* · 현석정* · 김철**

Estimation of material properties of carbon nanotube composite applying multi-scale method

J.T. Kim, S.J. Hyun and Cheol Kim

Key Words: Carbon nanotube, Nanomechanics, Structural mechanics, Multi-scale method

Abstract

Carbon nanotube is a geometrical frame-like structure and the primary bonds between two nearest-neighboring atoms act like beam members, whereas an individual atom acts as the joint of the related beam members. The sectional property parameters of these beam members are obtained from molecular mechanics. Computations of the elastic deformation of single-walled carbon nanotubes reveal that the Young's moduli of carbon nanotubes vary with the tube diameter and are affected by their helicity. With increasing tube diameter, the Young's moduli of carbon nanotubes approach the Young's modulus of graphite.

1. 서 론

탄소나노튜브의 액츄에이터로서의 특성은 1999년에 미국의 국방기술연구소인 DARPA에 의해서 처음으로 입증되었다[1]. 탄소나노튜브 액츄에이터는 전기적인 에너지를 기계적인 에너지로 변환하는 장치로써 동작전압이 낮고, 1000 °C 이상의 온도에서도 작동이 가능하며, 1%이상의 변형률, 그리고 높은 기계적 물성치와 같은 기존에 개발된 마이크로/나노크기의 액츄에이터보다 우수한 성능을 가지고 있다[2]. 이미 수행된 연구에서 예측된 탄소나노튜브 판의 최대 변형률은 전해질환경에서 1%에 달하였다. 그라파이트 면 사이에 알칼리 금속원소들을 삽입한 후 전류를

흐렸을 경우 알칼리 금속원소들이 전자를 흑연에 전달하게 된다. 이때 흑연은 음전하로 대전되고 알칼리 금속은 양이온으로 되기 때문에 전체적으로는 중성을 유지하게 되지만, 흑연면상의 탄소-탄소원자사이의 결합력이 약해지면서 결합길이 증가하게 된다[3]. 탄소나노튜브에서도 유사한 현상이 나타나는데, 전압의 변화로 유도되는 electronic charge injection에 의한 공유결합 방향의 치수변화(dimensional changes in covalently bonded directions)에 의해 늘어나게 된다. 독일의 Minett[4]등은 전극간의 이온에 의한 전하의 변화(double-layer charge compensation)로 인하여 캔틸레버 형상의 탄소나노튜브 바이모프(bimorph) 액츄에이터가 전압에 따라 한 방향으로 휘어지는 모습을 실험을 통하여 구현하였다.

탄소나노튜브의 구조는 하나의 그라파이트 면을 둥글게 말아놓은 구조로 벽을 이루고 있는 결합의 수에 따라서 단일벽 탄소나노튜브(single-walled carbon nanotube, SWCN), 다중벽

* 경북대학교 대학원 기계공학과

** 정희원, 경북대학교 기계공학과

탄소나노튜브(multi-walled carbon nanotube, MWCN)로 분류되며 높은 가로세로비(aspect ratio)의 구조적 특성, 탄소계 물질의 특성인 화학적 안정성, 생체친화성을 가지며, 탄소 원자사이의 강한 결합력으로 인해 우수한 기계적 특성 및 일차원적인 전기적 전도성을 갖는다. 액츄에이터의 수축이나 확장상태에서 Young's modulus의 영향은 실험적으로 증명되었다[5].

본 연구에서는 탄소-탄소 결합관계를 3차원 보 요소를 이용한 유한요소를 사용하여 탄소나노튜브의 Young's modulus를 계산하였다.

2. 탄소나노튜브의 기하학적 정의

탄소나노튜브 구조를 정의하는 가장 단순한 방법은 튜브의 직경과 chiral angle(θ)을 이용하는 것으로, 수학적으로 2차원 흑연면의 두 점을 연결하는 벡터를 C_h (chiral vector)로 정의함으로써 표현가능하다. 탄소나노튜브는 벡터의 시작점과 끝점이 만나도록 말아 올린 것으로 생각할 수 있으며, 벡터는 단위벡터와 chiral vector의 지수 (n,m)으로 표시된다[6].

$$C_h = n a_1 + m a_2 \quad (1)$$

(n,n)과 (n,0)로 표시되는 탄소나노튜브는 대칭성을 가지는 구조로써 (n,n) 튜브는 chiral angle이 30° 이며 금속성을 갖는 armchair 탄소나노튜브이고, (n,0) 튜브는 chiral angle이 0° 인 반도체의 성질을 가지는 zigzag 탄소나노튜브이다. 단일벽 탄소나노튜브의 반지름 R_n 과 chiral angle(θ)은 chiral vector의 지수 (n,m)의 함수로 나타낼 수 있다.

$$R_n = \frac{b}{2\pi} \sqrt{3} \Lambda \quad (2)$$

$$\theta = \tan^{-1} \left(\frac{\sqrt{3}m}{m+2n} \right) \quad (3)$$

여기서

$$\Lambda = \sqrt{(n^2 + m^2 + nm)}$$

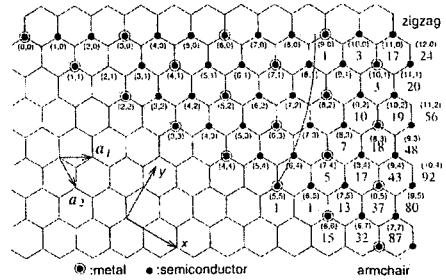


그림 1 The segment of a graphite plane

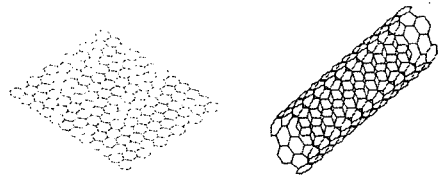


그림 2 Graphite sheet and carbon nanotube

b는 탄소-탄소의 공유결합길이이므로 0.142nm이다. 이렇게 한 개의 그라파이트 면으로 이루어진 것이 단일벽 탄소나노튜브(single walled carbon nanotube)이고, 여러 겹의 그라파이트 면이 하나의 중심축으로 말린 것이 다중벽 탄소나노튜브(multi walled carbon nanotube)이다. 다중벽 탄소나노튜브의 경우, 각 면의 사이거리는 0.342nm로 그라파이트 면에서의 면간 거리와 같다.

3. 탄소나노튜브의 물성계산

나노 크기의 특징은 재료의 물성치가 크기에 종속적이므로 나노 크기에 대한 해석모델의 개발은 아주 어려운 과정이며, 실험적인 접근은 많은 비용을 필요로 한다. 유한요소해석의 경우에는 모델링에 대한 기본적인 방법들이 알려져 있고 실험에 필요한 비용, 시간을 줄일 수 있으므로 효과적으로 나노 복합재료를 연구할 수 있는 장점이 있다. 분자동역학적(molecular dynamics, MD) 해석은 하나의 탄소나노튜브 혹은 탄소나노튜브 다발의 거동에 대한 많은 결과들을 제공하고 있지만, 아주 작은 영역이나 시간에 대해서만 적용이 가능하므로 나노 복합재료를 해석하는 것은 불가능한 상황이다. 탄소나노튜브 액츄에이터는 나노 크기가 아닌 마이크로 크기에서 공학

적으로 이용되며, 따라서 나노 복합재료를 이해 하는데 있어서 분자동역학적 해석보다 유한요소 해석이 효율적인 방법이다. 유한요소해석적 방법은 하나의 탄소나노튜브 혹은 탄소나노튜브 다발의 기계적인 물성치를 연구하기 위해 적용되었다. 이전부터 유한요소해석결과에 대한 신뢰성은 많은 의문이 제기되고 있지만, 탄소나노튜브의 Young's modulus나 Poisson's ratios 그리고 좌굴 거동을 성공적으로 예측 할 수 있었다. 그러나 shell이나 solid모델의 경우 탄소나노튜브의 꼬인 정도(chirality)에 대한 효과를 표현하지 못하는 단점이 있다.

본 연구에서는 탄소-탄소 결합관계를 3차원 보 요소를 이용한 유한요소로 표현하였다. 3차원 공간에서 각각의 공유결합은 고유한 결합길이와 결합각, 결합력을 가지고 있다. 2개의 가장 가까운 탄소원자사이의 공유결합은 전통적인 연속체 역학에서의 1차원 보 요소처럼 표현이 가능하며 각각의 탄소원자는 보 요소가 결합된 연결점으로 간주할 수 있다. 보의 길이와 결합각과 같은 기하학적인 정보는 탄소나노튜브에서 탄소원자의 위치로부터 얻을 수 있으며, 보 요소의 단면의 물성값은 화학적으로 계산된 탄소-탄소 결합력에 대한 기존의 값[7]을 이용하였다. 그림 3과 같이 탄소-탄소원자사이에서 작용하는 힘은 결합길이 방향의 인장 및 압축, 결합각의 변화, 비틀림, 굽힘, 반데르발스(van der Waals)힘이 존재하며, 하나의 탄소원자에 작용하는 에너지의 합은 다음과 같다.

$$U = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\phi + \sum U_w + \sum U_{vdw} \quad (4)$$

여기서 U_r 는 결합길이방향 에너지의 합, U_θ 는 굽힘 에너지의 합, U_ϕ 는 비틀림 에너지의 합, U_w 는 면의 비틀림 에너지의 합 그리고 U_{vdw} 는 반데르발스 에너지의 합이다.

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2 = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 \quad (5)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 \quad (6)$$

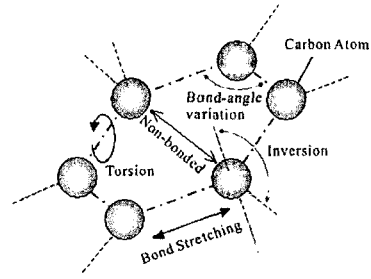


그림 3 탄소원자사이에서 작용하는 힘의 관계

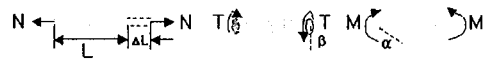


그림 4 보요소의 인장, 굽힘, 비틀림

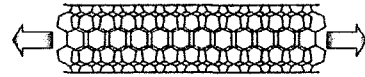


그림 5 탄소나노튜브의 해석모델

$$U_r = U_\phi + U_w = \frac{1}{2} k_\phi (\Delta \phi)^2 \quad (7)$$

여기서 k_r , k_θ 그리고 k_ϕ 는 탄소-탄소원자사이의 힘 상수이며 Δr , $\Delta \theta$, $\Delta \phi$ 는 변형량이다. 그리고 U_{vdw} 와 같은 상대적으로 약한 에너지는 무시하였다. 탄소나노튜브에 외력이 가해지면 각각의 탄소원자 사이의 결합은 그림 4와 같은 하중을 받게 된다. 보 요소의 변형 에너지 변화로 인해 변형이 발생하므로, 에너지 등가에 의해 EA , EI , GJ 를 알 수 있으며 다음의 식 (8), (9), (10) 같다.

$$U_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EI} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad (8)$$

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2 \quad (9)$$

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} \\ = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\beta)^2 \quad (10)$$

여기서 N , M , T 는 각각 축 방향 하중, 굽힘 모멘트, 비틀림 모멘트이며, 에너지 증가에 의해 다음의 식을 얻을 수 있다.

$$\frac{EA}{L} = k_r, \quad \frac{EI}{L} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = k_t \quad (11)$$

U_A , U_M , U_T 는 경험적으로 얻어진 탄소-탄소 원자간의 결합에너지로부터 알 수 있으므로, EA , EI , GJ 를 알 수 있다.

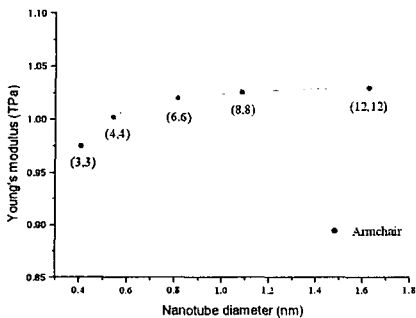


그림 6 탄소나노튜브의 지름에 따른 Young's modulus의 변화

n, m	Number of atom	Young's modulus (TPa)
3, 3	192	0.9755
4, 4	256	1.002
6, 6	384	1.0199
8, 8	512	1.0256
12, 12	768	1.0297

표 1 탄소원자의 개수와 Young's modulus의 관계

4. 결론

그림6과 표1에서 탄소나노튜브의 지름의 증가에 따른 Young's modulus의 변화를 확인할 수 있었다. 유한요소해석에는 탄소-탄소원자간의 힘을 보 요소로 표현하기 위해 경험적으로 계산된

결합력, 결합각에 대한 정보를 사용하였고, 각각의 원자에 작용하는 총에너지를 계산하였다. 해석결과로부터 탄소나노튜브의 직경이 증가하면 Young's modulus도 증가하는 것을 알 수 있는데, 직경이 작을수록 증가율은 커지게 된다. 이것은 작은 직경의 탄소나노튜브에서는 탄소-탄소원자 사이의 결합각이 꼬이면서 발생하는 것으로 이해할 수 있다. 이것은 직경의 증가에 따른 탄소-탄소원자사이의 결합각의 왜곡 효과가 감소하여 Young's modulus의 증가율이 감소하는 것으로부터 확인할 수 있다.

후 기

본 연구는 한국과학재단 목적기초연구(R05-2003-000-12350-0)지원으로 수행되었습니다.

참고문헌

- (1) R. H. Baughman, C. Cui, A. A. Zakhidov, Z. Iqbal, J. N. Barisci, G. M. Spinks, "Carbon Nanotube Actuators." *Science* 284 1340, 1999.
- (2) R. H. Baughman, Anvar A. Zakhidov, Walt A. de Heer, "Carbon Nanotubes-the Route Toward Applications." *Science* 297 787, 2002.
- (3) Siegmar Roth, R. H. Baughman, "Actuators of individual carbon nanotubes." *Current Applied Physics*, 2, 311, 2002.
- (4) A. I. Minett, J. Fraysse, G. Gang, G. Kim, S. Roth, "Nanotube Actuators for Nanomechanics" *Current Applied Physics*, 2, 61, 2002.
- (5) Qian D, Dickey EC, Andrew R, Rantell T. "Load transfer and deformation mechanisms in carbon nanotube-polystyrene composites." *Applied Physics Letters*, 76, 2868, 2000.
- (6) M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. C. Eklund, Science of fullerenes and carbon nanotubes." Academic Press
- (7) W.D. Cornell, P. Cieplak, C. I. Bayly, "A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules. *Journal of American Chemical Society*, 117, 5179, 1995.