

TBMD SIMULATION을 이용한 탄소 나노튜브의 역학적 특성 연구

박문필, *이강환, 황호정

중앙대학교 전자전기공학부, *김천대학 전자통신학과
전화 : 02-820-5296

A Study of Mechanical Properties of Carbon Nanotubes through TBMD Simulation

Mun-Phil Park, Kang Hwan Lee, Ho Jung Hwang
School of Electronics and Electrical Engineering, Chung-Ang University
E-mail : promark@semilab3.ee.cau.ac.kr

Abstract

We have investigated the mechanical deformation of carbon nanotube using TBMD (tight-binding molecular dynamics) simulation. We have studied four carbon nanotubes, armchair (6, 6), (7, 7), (8, 8), and (9, 9) carbon nanotubes whose length were same.

As a result of study, we have known that the nanotube's yield force increases with increasing their diameter. It is similar between (6, 6) and (8, 8) CNT's force-strain curves. Also force-strain curve between (7, 7) and (9, 9) CNTs are nearly same.

서론

일본전기회사(NEC)의 부설 연구소의 수미오 이 지마(S. Iijima)에 의해 1991년 탄소 나노튜브가 발견되었다. 그 후 나노튜브의 생성, 물리적 특성 등등에 관한 실험적, 이론적 연구가 계속되고 있다[1]. 탄소 나노튜브는 흑연판을 감아 놓은 형태로, 생성방법에 따라 SWNT (single wall carbon nanotube), MWNT (multi wall carbon nanotube), zigzag, armchair로 분류된다[2]. 이와

같은 나노튜브는 감는 방향, 직경에 따라 여러 가지 물리학적 특성이 다르게 나타난다. 즉 구조에 따라 금속성을 나타내기도 하고 반도체의 성질을 나타내기도 한다[3, 4].

본 연구에서는 길이가 같고 직경이 다른 네 개의 탄소 나노튜브를 이용하여 구조적 특성과 force-strain의 관계를 알아보았다.

본 논문의 구성은 다음과 같다. 본론에서 TBMD 방법의 이론과 알고리즘에 대한 설명과 시뮬레이션 결과와 직경에 따른 tensile force와 strain의 관계를 논의하고 결론에서 구조적, 물리적 특성을 알아본다.

본론

1. TBMD 방법

네 가지 탄소 나노튜브의 구조에 대해 Empirical TBMD 시뮬레이션을 하며 직경에 따른 역학적 특성을 알아보았다. 먼저 TBMD의 바닥상태(ground state)의 총 에너지는 다음과 같이 나타낸다.

$$E_{tot} = E_{bs} + E_{REP} \quad (1)$$

식(1)에서 E_{REP} 는 반발 에너지(repulsive potential energy)를 나타내고, E_{bs} 는 밴드 에너지(band-structure energy)를 나타낸다. 밴드 에너지 E_{bs} 는 TB 해밀토니안 H_{TB} 를 대각화하여 구한 고유값(eigen value) E_i 를 점유된 전자 상태까지 더해서 얻는다.

$$E_{bs} = \sum_{j=1}^{occupied} E_i \quad (2)$$

이때 TBMD 해밀토니안의 비 대각성분은 직교하는 sp^3 hopping parameter인 $V_{ss\sigma}$, $V_{sp\sigma}$, $V_{pp\sigma}$, $V_{pp\pi}$ 로 기술되고 이 값들은 탄소 원자 사이의 거리가 r일 때 함수 s(r)로 그 크기를 조절하도록 되어있고, on-site 성분은 탄소 원자의 궤도 에너지이다. 이때 parameter는 다음과 같다.

반발 에너지 E_{REP} 는 다음과 같이 나타낸다.

$E_p = 3.71 \text{ eV}$	$E_s = -2.99 \text{ eV}$
$V_{ss\sigma} = -5.0 \text{ eV}$	$V_{sp\sigma} = 4.7 \text{ eV}$
$V_{pp\sigma} = 5.5 \text{ eV}$	$V_{pp\pi} = -1.55 \text{ eV}$
$E_{REP} = \sum_{i,j} \phi(r_{ij})$ (3)	

여기에서 $\phi(r_{ij})$ 는 원자 i와 j사이의 pair potential이다.

$$E_{tot} = E_{bs} + E_{REP} = \sum_{j,n} \langle \Psi_{jn} | H_{TB} | \Psi_{jn} \rangle + \sum_{j,n} \Psi(r_{ij}) \quad (4)$$

이때 j는 원자에 대한 index이고, n은 orbital에 대한 index이다. 따라서 Hellmann-Feynman 정리에 의하여

$$\mathbf{F}_i = - \sum_{j,n} \left\langle \Psi_{jn} \left| \frac{\partial H_{TB}}{\partial r_i} \right| \Psi_{jn} \right\rangle - \sum_{j,n} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_i} \quad (5)$$

이 된다. 여기에서 첫째 항은 Hellmann-Feynman force이고 둘째 항은 pair potential에 의한 force이다.

2. MD (molecular dynamics) 시뮬레이션

주어진 탄소 나노튜브 위치에서 구한 force로 다음 위치를 찾기 위해 steepest descent 방법과 microcanonical ensemble을 사용했다[5, 6].

3 시뮬레이션 결과

3.1 armchair (6, 6) CNT 시뮬레이션

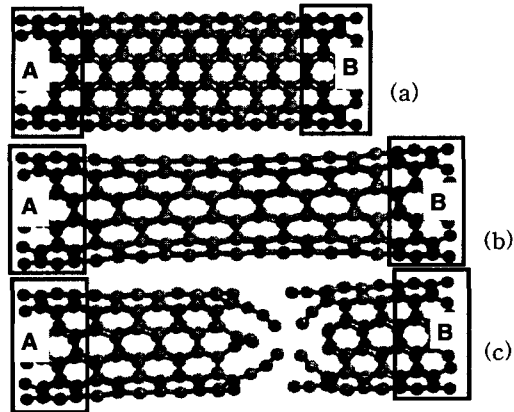


그림 3.1 armchair (6, 6) 탄소 나노튜브 구조

위의 그림 3.1a에 탄소 나노튜브는 길이가 24.6Å 이고 직경이 14.1Å이며 사용된 탄소 원자는 240개이다.

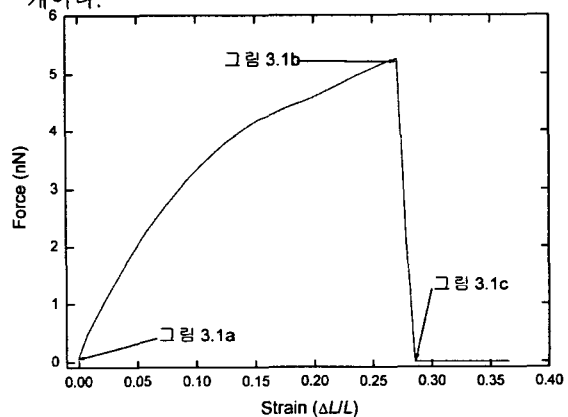


그림 3.2 armchair (6, 6) CNT's force-strain curve 이 나노튜브의 A를 고정시키고 B를 0.18Å씩 오

른 쪽으로 당기면 그림 3.1b처럼 나노튜브중심부의 직경이 감소하다가 계속해서 당기면 그림 3.1c처럼 나노튜브가 끊어지는 것을 볼 수 있다. 이때 B부분에서 받는 tensile force는 그림 3.2와 같이 점점 증가하다가 한번에 감소하는 것을 알 수 있다.

3.2 armchair (7, 7) CNT 시뮬레이션

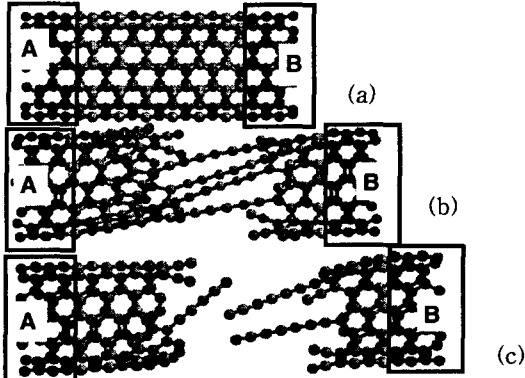


그림 3.3 armchair (7, 7) 탄소 나노튜브 구조

위의 그림 3.3a에 탄소 나노튜브는 길이가 24.6Å이고 직경이 16.45Å이며 원자 개수가 280개이다. 이 나노튜브의 A를 고정시키고 B를 오른쪽으로 0.16Å씩 잡아당기면

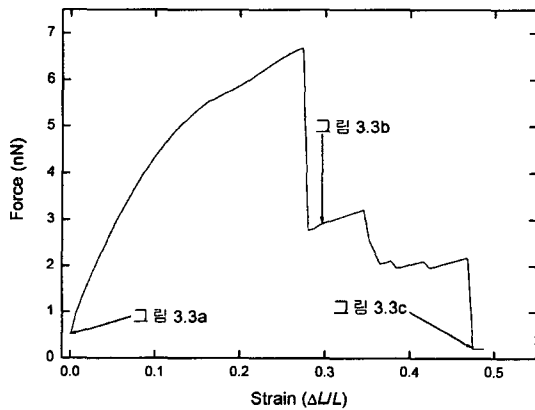


그림 3.4 armchair (7, 7) CNT's force-strain curve

위의 그림 3.4처럼 점점 tensile force가 커지다가 몇 차례 yield를 발생시킨다. strain이 0.47인 곳에서 결국 끊어지는 것을 알 수 있다.

3.3 armchair (8, 8) CNT 시뮬레이션

그림 3.5에 탄소 나노튜브는 길이가 24.6Å이고 직경이 18.8Å이며 320개의 원자로 되어있다. A는 고정시키고 B를 오른쪽으로 0.14Å씩

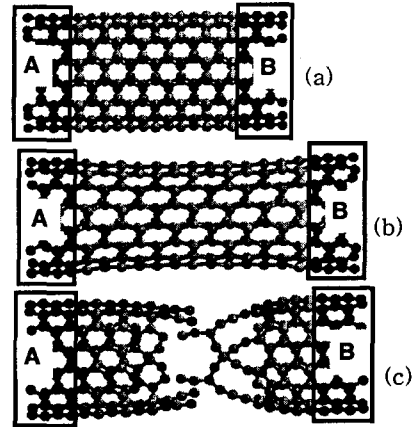


그림 3.5 armchair (8, 8) 탄소 나노튜브 구조

잡아당길 때 그림 3.6과 같은 force-strain curve가 나타난다.

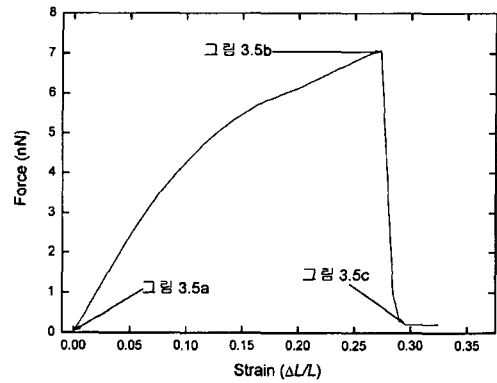
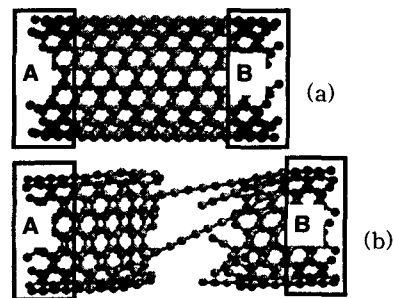


그림 3.6 armchair (8, 8) CNT's force-strain curve

3.4 armchair (9, 9) CNT 시뮬레이션

아래에 그림 3.7에 탄소 나노튜브는 길이가 24.6Å이고 직경이 21.15Å이며 360개의 원자로 이루어져 있다.



참고문헌

- [1] S. Jijima, Nature 354, 56, 1991
- [2] T. W. Ebbesen and P. Ajayan, Nature 358, 330, 1992
- [3] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. C. Eklund, Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes, (Academic Press Inc., San Diego, 1996)
- [4] T. W. Ebbesen, Carbon Nanotubes: Preparation and properties. (CRC Press, New York, 1997)
- [5] Richard L. Burden and J. Douglas Faires "Numerical Analysis", PWS PUBLISHING COMPANY, 568-574, 1993
- [6] M. P. Allen and D. J. Tildesley "Computer Simulation of Liquids", CLARENDON PRESS OXFORD, 33-108, 1987

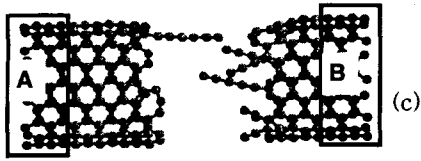


그림 3.7 armchair (9, 9) 탄소 나노튜브 구조

A는 고정되어있고 B를 오른쪽으로 0.12Å씩 잡아당기면서 이 때의 force-strain을 그림 3.8에 나타내었다.

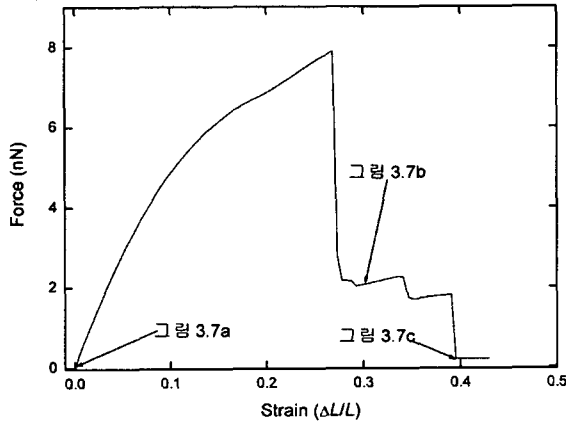


그림 3.8 armchair (9, 9) CNT's force-strain curve

결론

본 연구에서는 armchair 구조의 (6, 6), (7, 7), (8, 8), (9, 9) 탄소 나노튜브의 역학적 특성에 관해 알아보았다. 길이를 일정하게 하고 직경을 증가시켜가며 각각의 force-strain curve를 나타내었다. 직경이 커짐에 따라 나노튜브를 끊기 위해 필요한 힘도 커졌다. 또한 나노튜브 (6, 6)과 (8, 8)의 force-strain curve와 (7, 7), (9, 9)의 force-strain curve가 전체적으로 비슷한 형태를 나타내었으며, (6, 6)과 (8, 8)은 yield를 발생시키지 않았으나 (7, 7)과 (9, 9)에서는 yield가 나타났다.

앞으로의 연구과제는 본 연구에서 수행한 시뮬레이션의 성능 향상을 위해 탄소 나노튜브에 가장 적합한 parameter 추출과 MD 계산 시간을 줄이기 위한 알고리즘개발로 보다 빠르고 정확한 시뮬레이션을 하는 것이다.