# 부탄 분자와 H<sub>2</sub>C=C 그룹을 이용하여 수정된 하이브리드 탄소나노튜브의 비틀림 후 좌굴 거동과 밀폐 여부의 영향

## 정병우 대덕대학교 항공부사관과

# Torsional Post-Buckling Behavior of Capped and Uncapped Hybrid Carbon Nanotubes Modified with Butane Molecules and $H_2C=C$ Groups

Byeong-Woo Jeong Department of Aviation NCO, Daeduk University

**요 약** 부탄 분자로 안쪽이 채워지고 H<sub>2</sub>C=C 그룹이 외벽에 부착되어 수정된 하이브리드 탄소나노튜브에 대해서 비틀림 후 좌굴 거동을 분자동역학 전산모사 방법을 이용하여 관찰하였다. 또한, 이러한 비틀림 후 좌굴 거동에 대한 하이브리드 탄소나노튜브의 밀폐 여부 영향을 비교 분석하였다. 수정된 하이브리드 탄소나노튜브는 첫 번째 비틀림 좌굴이 일어난 이후에 거의 영에 가깝던 비틀림 강성이 다시 커지는 독특한 비틀림 후 좌굴 거동을 보여주었으며, 결과적으로, 첫 번째 비틀림 좌굴 모멘트에 비해서 최종 비틀림 좌굴 모멘트가 월등히 큰 것을 확인하였다. 또한, 비틀림 후 좌굴 단계에서의 이러한 비틀림 강성과 최종 비틀림 좌굴 모멘트는 하이브리드 탄소나노튜브의 밀폐 여부에 의존하였으며, 캡으로 밀폐된 경우에 중요하게 큰 것을 확인하였다. 밀폐되지 않은 하이브리드 탄소나노튜브의 경우에 부탄 분자가 비틀림 좌굴 영역 을 피해서 외부로 이동하는 움직임을 확인할 수 있었다.

**Abstract** The torsional post-buckling behaviors of capped and uncapped hybrid carbon nanotubes filled with butane molecules and functionalized by  $H_2C=C$  groups were predicted using classical molecular dynamics simulations. The observations showed that the torsional stiffness of the hybrid carbon nanotubes was decreased to almost zero for some time after the first buckling onset. Their torsional stiffness then increased significantly at the post-buckling stage, indicating stiffened post-buckling behavior. As a result, their final torsional buckling moment was much larger than the first one. In addition, the torsional stiffness and buckling moment at the post-buckling stage were significantly larger for the capped hybrid carbon nanotubes than the uncapped ones. In the case of uncapped hybrid carbon nanotubes, the filled butane molecules moved outwards to avoid the radial-direction contraction by torsional buckling.

Keywords : Filling, Functionalization, Hybrid Carbon Nanotubes, MD Simulation, Torsional Post-Buckling

# 1. 서론

인하여 차세대 나노 스케일의 장치와 복합재료 등에서 광범위하게 활용이 제안되고 있다. 이러한 나노 스케일의 장치와 복합재료 등에서 비틀림 모멘트는 핵심요소인 탄

탄소나노튜브(carbon nanotube)는 우수한 특성으로

소나노튜브에 일반적으로 작용될 수 있다. 예를 들어, 비 틀림 진동자(torsional oscillator)와 같은 나노전자기계 시스템(NEMS: Nano Electro Mechanical System)에 서 탄소나노튜브는 핵심요소인 비틀림 스프링(torsion spring)으로서 응용된다[1]. 그러므로 이러한 나노 스케 일의 장치와 복합재료 등에서 탄소나노튜브를 적절하게 사용하기 위해서는 탄소나노튜브의 비틀림 특성에 대한 정확한 규명이 필요할 것이다. 이러한 탄소나노튜브는 튜 브 형태의 구조로서 이종재료를 안쪽에 채우거나 외벽에 연결시켜 쉽게 수정할 수 있으며, 탄소나노튜브의 효율적 인 응용을 위하여 관련된 노력이 있어 왔다[2]. 하지만, 이종재료에 의해서 수정된 탄소나노튜브의 비틀림 특성 은 바뀔 수 있으며, 이에 대한 연구도 필요할 것이다[3].

탄소나노튜브는 길이 방향에서는 아주 큰 인장강도를 가지고 있는 반면에 튜브 구조의 특성 상 비틀림 모멘트 를 받는 경우에는 단면 방향의 변형에 의한 비틀림 좌굴 이 일어난다. 이러한 탄소나노튜브의 비틀림 좌굴 현상은 영구적인 변형에 의한 소성변형이 아니라 기하학적인 특 성에 기인하는 탄성변형으로서 첫 번째 좌굴 후에 이어 지는 후 좌굴(post buckling) 거동에 대한 세심한 관찰 이 필요할 것이다. 탄소나노튜브를 수정하기 위하여 안쪽 에 채워지고 외벽에 연결된 이종재료는 탄소나노튜브의 첫 번째 비틀림 좌굴 모멘트에 영향을 주는 것으로 알려 져 있다[3]. 하지만, 이러한 이종재료가 탄소나노튜브의 비틀림 후 좌굴 거동에 미치는 영향에 대해서는 아직까 지 알려진 것이 부족하며, 이에 대한 추가적인 연구가 필 요하다.

본 연구에서는 부탄 분자(butane molecules)로 안쪽 이 채워지고 H<sub>2</sub>C=C 그룹이 외벽에 연결되어 수정된 하 이브리드 탄소나노튜브에 대해 비틀림 후 좌굴 거동을 분자동역학(MD: Molecular Dynamics) 전산모사 (simulation) 방법을 이용하여 관찰하고자 하였다. 특히, 첫 번째 비틀림 좌굴이 일어난 이후에 이어지는 비틀림 후 좌굴 거동에 대해 관심을 가지고 관찰하여 탄소나노 튜브를 수정하기 위하여 사용된 이종재료가 비틀림 후 좌굴 거동에 미치는 영향을 확인하였다. 또한, 밀폐 여부 에 따른 영향을 확인하기 위하여 양쪽에서 캡(cap)으로 밀폐된 것과 캡을 제거하여 밀폐되지 않은 하이브리드 탄소나노튜브의 비틀림 후 좌굴 거동을 비교 분석하였다. 본 연구에서의 결과는 나노 스케일의 장치와 복합재료 등에 탄소나노튜브의 적절한 응용을 위하여 의미 있을 것이다.

# 2. 본론

#### 2.1 연구 방법

분자동역학 전산모사는 탄소나노재료의 거동을 해석 하기 위하여 광범위하게 사용하는 방법으로 본 연구에서 는 3차 Nordsieck Predictor-Corrector를 이용하여 0.2 fs의 시간 간격으로 뉴턴의 운동방정식을 수치 적분 하는 방법이 사용되었다. 이러한 분자동역학 전산모사 방 법에서 원자에 작용하는 힘은 원자 사이의 거리에 따라 다르게 계산된다. 짧은 거리의 공유 결합(covalent interaction)을 위하여 many-body, second generation reactive empirical bond-order (REBO) hydrocarbon potential이 사용되는 반면에, 공유 결합 길이보다 긴 거리에서 작용하는 반 데르 발스 결합(van der Waals interaction)을 위해서는 Lennard-Jones Potential이 사용된다[4]. 이러한 분자동역학 전산모사 방법은 탄소나노튜브의 거동에 관한 수많은 연구에서 타 당한 결과를 가져오는 것이 확인되었다[5]. 300 K의 일 정한 온도 조건에서 분자동역학 전산모사를 실행하기 위 하여 Velocity-rescaling thermostat를 사용하였다. 이 러한 Velocity-rescaling thermostat 방법은 탄소나노 튜브의 역학적 거동에 영향을 주지 않는 것으로 알려져 있다[3, 5].

본 연구를 위하여 Fig. 1에서 보는 바와 같이, 부탄 분 자로 안쪽이 채워지고 H<sub>2</sub>C=C 그룹이 외벽에 연결되어 수정된 하이브리드 (10,10) 단일벽 탄소나노튜브 (SWCNT: Single-Walled Carbon Nanotube)가 사용 되었다. 또한, Fig. 1에서 볼 수 있는 것처럼, 밀폐 여부 의 영향을 확인하기 위하여 양쪽에서 캡으로 밀폐된 것 과 캡을 제거하여 밀폐되지 않은 2가지의 하이브리드 탄 소나노튜브가 분자동역학 전산모사에 사용되었다. 본 연 구의 분자동역학 전산모사를 위하여 사용된 하이브리드 탄소나노튜브의 유효 길이는 9.5 nm이고, 안쪽에 채워 진 부탄 분자의 밀도는 0.53 g/cm<sup>3</sup>이다.

실제 비틀림 거동에 대한 분자동역학 전산모사를 수행 하기 전에 하이브리드 탄소나노튜브의 포텐셜 에너지를 최소화하는 절차를 실행하였다. 이렇게 준비된 하이브리 드 탄소나노튜브의 한쪽을 고정한 상태에서 다른 한쪽에 비틀림 모멘트를 점차적으로 증가하며 주는 분자동역학 전산모사를 실행하였다. 비틀림 변형 량은 분자동역학 전 산모사 실행 중에 계산되어 진다. 이러한 분자동역학 전 산모사 방법은 일반적인 재료특성시험에서 사용하는 하 중제어방법과 유사하며, 탄소나노튜브의 후 좌굴 거동을 해석하기 위한 적절한 방법이다[5]. 이전 연구에서 많이 사용되었던 변위를 단계적으로 증가하여 주고 하중을 측 정하는 변위제어방법에 의한 분자동역학 전산모사 방법 은 탄소나노튜브의 후 좌굴 거동을 명확하게 확인하기에 는 부족한 부분이 있다[6]. 따라서 본 연구에서 사용된 분 자동역학 전산모사 방법은 다양한 탄소나노튜브의 후 좌 굴 거동을 관찰하기 위하여 활용될 수 있을 것이다.



Fig. 1. Capped and uncapped hybrid (10,10) SWCNTs considered for classical MD simulations. These hybrid SWCNTs are filled with butane molecules and functionalized by H<sub>2</sub>C=C groups. H denotes hydrogen and C denotes carbon.

#### 2.2 연구 결과

Fig. 2는 첫 번째 비틀림 좌굴 단계에 대한 그래프로 서 수정되지 않은 탄소나노튜브(pristine CNTs)의 경우 에 비틀림 좌굴이 일어난 이후의 그래프는 거의 수평에 가까운 모양을 보여주고 있다. 이러한 그래프 모양은 비 틀림 좌굴이 일어난 이후의 비틀림 강성이 거의 영에 가 깝다는 것을 의미한다. 수정되지 않은 탄소나노튜브의 경 우에 속이 비어 있는 튜브 구조의 특성 상 비틀림 좌굴이 시작된 이후에는 비교적 쉽게 단면 방향에서 변형이 일 어나며, 비틀림 모멘트의 작은 증가로도 급격한 비틀림 변형이 진행된다. 따라서 비틀림 좌굴이 일어난 이후의 비틀림 강성이 거의 영에 가까운 후 좌굴 거동을 보이는 것이다. 하지만, 수정된 하이브리드 탄소나노튜브의 경우 에 후 좌굴 거동은 약간의 차이가 있다. Fig. 2와 같이, 수정된 하이브리드 탄소나노튜브의 비틀림 좌굴이 일어 나기 시작하는 시점은 수정되지 않은 탄소나노튜브와 의 미 있는 차이가 없는 반면에 후 좌굴 거동에서는 의미 있 는 차이를 보여주고 있다. 수정된 하이브리드 탄소나노튜 브의 후 좌굴 거동에서는 비틀림 강성이 증가하고 있는 것이다. 그러나 비틀림 강성의 증가에 의한 후 좌굴 거동 에서의 차이도 아직까지 중요하게 크지는 않다.

또한, Fig. 2는 캡으로 밀폐된 것과 캡이 제거되어 밀

폐되지 않은 하이브리드 탄소나노튜브에서 후 좌굴 거동 이 의미 있는 차이가 없음을 보여주고 있다. 1.2 rad 정 도의 작은 비틀림 변형에서는 아직까지 비틀림 좌굴에 의한 단면 방향의 변형이 작기 때문에 하이브리드 탄소 나노튜브의 밀폐 여부가 비틀림 후 좌굴 거동에 영향을 끼치지 않는 것으로 판단된다. Fig. 3은 첫 번째 비틀림 좌굴이 일어나는 시점에서의 좌굴된 형상을 보여주고 있 는 것으로서 단면 방향에서 변형이 시작되고 있으나 아 직 크지는 않으며, 내부에 채워진 부탄 분자도 아직 크게 움직이지 않았음을 보여주고 있다.



Fig. 2. Torsion versus torsional angle curves of pristine and hybrid SWCNTs at the first buckling stage. These capped and uncapped hybrid SWCNTs are filled with butane molecules and functionalized by H<sub>2</sub>C=C groups.



Fig. 3. Buckled longitudinal shapes of capped and uncapped hybrid SWCNTs which are filled with butane molecules and functionalized by H<sub>2</sub>C=C groups at the first buckling stage. The torsional angle is 0.6 rad.

Fig. 2에서 보는 바와 같이, 첫 번째 비틀림 좌굴이 일 어난 직후의 비교적 작은 비틀림 변형에서는 비틀림 후 좌굴 거동의 차이가 탄소나노튜브에 따라 서로 중요하게 크지 않는 반면에, 큰 비틀림 변형에서는 비틀림 후 좌굴 거동이 탄소나노튜브에 따라 큰 차이가 있음을 Fig. 4는 보여주고 있다. 수정되지 않은 탄소나노튜브는 큰 비틀 림 변형까지도 비틀림 강성은 거의 영에 가깝고, 따라서, 비틀림 모멘트와 비틀림 변형의 그래프는 수평에 가까운 후 좌굴 거동을 보여주고 있다. 하지만, 수정된 하이브리 드 탄소나노튜브의 경우에 후 좌굴 거동은 큰 차이가 있 다. Fig. 4에서와 같이, 수정된 하이브리드 탄소나노튜브 에서는 첫 번째 비틀림 좌굴이 일어난 이후에 비틀림 강 성이 다시 크게 증가하는 비틀림 후 좌굴 거동을 보여주 고 있다. 따라서 수정된 하이브리드 탄소나노튜브에서는 최종적인 비틀림 좌굴이 일어나기까지 큰 비틀림 모멘트 를 견딜 수 있으며, 첫 번째 비틀림 좌굴 모멘트에 비해 최종 비틀림 좌굴 모멘트가 월등히 크게 된다. 수정된 하 이브리드 탄소나노튜브에서의 이러한 독특한 후 좌굴 거 동은 탄소나노튜브에 채워진 부탄 분자의 영향으로 판단 된다. 하이브리드 탄소나노튜브에서 일어나는 비틀림 좌 굴은 단면 방향의 변형을 동반하게 되는데, 이러한 단면 방향의 변형은 탄소나노튜브 외벽과 내부에 채워진 부탄 분자 사이의 반 데르 발스 결합 하중을 증가시키게 되고, 결과적으로 후 좌굴 단계에서 비틀림 강성이 증가하게 되는 것이다[3]. Fig. 4에서 보는 바와 같이, 이러한 후 좌굴 현상은 첫 번째 좌굴 단계와 비틀림 강성이 증가하 는 단계, 그리고 최종 좌굴이 일어나는 단계로 구분된다.

또한, Fig. 4는 캡으로 밀폐된 것과 캡이 제거되어 밀 폐되지 않은 하이브리드 탄소나노튜브의 비틀림 후 좌굴 거동에서도 큰 차이가 있음을 보여주고 있다. 캡으로 밀 폐된 하이브리드 탄소나노튜브의 경우에 안쪽에 가득 채 워진 부탄 분자는 첫 번째 비틀림 좌굴 이후에 증가하는 단면 방향의 변형 영역을 피하기 위하여 쉽게 움직이는 것이 어려울 것이다. 하지만 캡이 제거되어 밀폐 되지 않 은 하이브리드 탄소나노튜브의 경우에 안쪽에 가득 채워 진 부탄 분자는 첫 번째 비틀림 좌굴 이후에 증가하는 단 면 방향의 변형 영역을 피하기 위하여 일부분 움직이는 것이 가능할 것이다. 결과적으로, Fig. 4에서 보는 바와 같이, 비틀림 후 좌굴 단계에서 캡으로 밀폐된 하이브리 드 탄소나노튜브의 비틀림 강성과 최종 비틀림 좌굴 모 멘트는 캡이 제거되어 밀폐되지 않은 하이브리드 탄소나 노튜브에 비해 중요하게 크게 된다. 여기에서, 하이브리 드 탄소나노튜브 안쪽에 부탄 분자가 가득 채워졌다는 것을 주목할 필요가 있다. 만약에 부탄 분자가 낮은 밀도 로 일부만 채워졌더라면, 부탄 분자가 비틀림 좌굴에 따 른 단면 방향의 변형 영역을 아주 쉽게 피할 수 있기 때 문에 Fig. 4와 같은 후 좌굴 거동을 보이지는 않을 것이

다. 특히, 캡이 제거되어 밀폐되지 않은 하이브리드 탄소 나노튜브의 경우에 낮은 밀도로 채워진 부탄 분자는 비 틀림 변형 영역을 피해서 탄소나노튜브 밖으로 비교적 쉽게 이동할 것이며, 이러한 거동은 탄소나노튜브를 이 용한 원자전달에 응용될 수도 있다[7].



Fig. 4. Torsion versus torsional angle curves of pristine and hybrid SWCNTs at the post-buckling stage. These capped and uncapped hybrid SWCNTs are filled with butane molecules and functionalized by H<sub>2</sub>C=C groups.



Fig. 5. Buckled longitudinal shapes of capped and uncapped hybrid SWCNTs which are filled with butane molecules and functionalized by  $H_2C=C$  groups at the post-buckling stage. The torsional angle is 2.0 rad.



Fig. 6. Buckled longitudinal shapes of capped and uncapped hybrid SWCNTs which are filled with butane molecules and functionalized by H<sub>2</sub>C=C groups at the post-buckling stage. The torsional angle is 3.0 rad.

Fig. 5와 Fig. 6은 각각 2.0 rad과 3.0 rad의 비틀림 변형에서 좌굴된 형상을 보여주고 있다. Fig. 5와 Fig. 6 에서 보는 바와 같이, 비틀림 좌굴에 의해서 단면 방향의 변형이 일어나며, 이러한 단면 방향의 변형 영역을 피하 기 위하여 내부에 채워진 부탄 분자가 재배열 되고 있음 을 알 수 있다. 캡으로 밀폐된 하이브리드 탄소나노튜브 안쪽에 있는 부탄 분자는 외부로 이동할 수 없기 때문에 부탄 분자가 재배열되기 쉽지 않은 반면에, 캡이 제거되 어 밀폐되지 않은 하이브리드 탄소나노튜브 안쪽에 있는 부탄 분자는 외부로 이동할 수 있기 때문에 부탄 분자가 보다 쉽게 재배열 되는 것을 Fig. 5와 Fig. 6에서 확인할 수 있다. 결과적으로, 캡으로 밀폐된 것과 캡이 제거되어 밀폐되지 않은 하이브리드 탄소나노튜브의 비틀림 후 좌 굴 거동이 큰 차이를 보이고 있는 것이다. 캡이 제거되어 밀폐되지 않은 하이브리드 탄소나노튜브에서 부탄 분자 가 비틀림 좌굴에 의한 단면 방향의 변형 영역을 피해서 외부로 이동하는 거동은 탄소나노튜브를 이용한 원자전 달에 응용될 수 있다[7]. 만약에 부탄 분자의 밀도를 본 연구에서 사용한 것보다 작게 한다면 더욱 더 쉽게 외부 로 부탄 분자를 전달시킬 수 있을 것이다.

탄소나노튜브 외벽에 붙여진 이종재료는 탄소나노튜 브의 비틀림 좌굴 거동에 크지는 않지만 영향을 미치는 것으로 알려져 있다[3]. 본 연구에서 사용된 하이브리드 탄소나노튜브에도 외벽에 이종재료가 부착되어 있으며, 이러한 이종재료는 비틀림 좌굴 거동에 일부분 영향을



Fig. 7. Torsion versus torsional angle curves of pristine, hybrid, and filled SWCNTs at the post-buckling stage. While the hybrid SWCNTs are filled with butane molecules and functionalized by  $H_2C=C$  groups, the filled SWCNTs are only filled with butane molecules without functionalizing.

미쳤을 것이다. 따라서 Fig. 7과 같이, 부탄 분자만 안쪽 에 채워진 탄소나노튜브의 비틀림 좌굴 거동을 관찰하여 외벽에 붙여진 H<sub>2</sub>C=C 그룹의 영향을 확인하였다. Fig. 7에서 보는 바와 같이, 외벽에 붙여진 H<sub>2</sub>C=C 그룹이 일 부분 비틀림 좌굴 거동에 영향을 미치기는 하지만 중요 한 영향을 주지 않는다는 것을 확인할 수 있다. 이러한 결과로부터, 하이브리드 탄소나노튜브 외벽에 부착된 H<sub>2</sub>C=C 그룹은 비틀림 좌굴 거동에 미치는 영향은 미미 하며, 안쪽에 채워진 부탄 분자가 절대적으로 하이브리드 탄소나노튜브의 비틀림 좌굴과 후 좌굴 거동에 영향을 미치는 것을 확인할 수 있다. 이러한 결과는, 앞에서도 언 급되었던 것처럼, 하이브리드 탄소나노튜브 안쪽에 채워 진 부탄 분자가 비틀림 좌굴에 의한 단면 방향의 변형과 반 데르 발스 결합 하중에 영향을 주기 때문이다[3].

#### 3. 결론

본 연구에서는 부탄 분자로 안쪽이 채워지고 H<sub>2</sub>C=C 그룹이 외벽에 연결되어 수정된 하이브리드 탄소나노튜 브에 대해서 비틀림 후 좌굴 거동을 분자동역학 전산모 사 방법을 이용하여 관찰하고자 하였다. 또한, 밀폐 여부 에 따른 영향을 확인하기 위하여 양쪽에서 캡으로 밀폐 된 것과 캡을 제거하여 밀폐되지 않은 하이브리드 탄소 나노튜브의 비틀림 후 좌굴 거동을 비교 분석하였다.

수정되지 않은 탄소나노튜브는 첫 번째 비틀림 좌굴이 일어난 이후에 큰 비틀림 변형까지도 비틀림 강성이 거 의 영에 가깝고, 따라서, 비틀림 모멘트와 비틀림 변형의 그래프는 수평에 가까운 후 좌굴 거동을 보여주고 있었 다. 하지만, 수정된 하이브리드 탄소나노튜브의 경우에서 는 첫 번째 비틀림 좌굴이 일어난 이후에 영에 가깝던 비 틀림 강성이 다시 크게 증가하는 비틀림 후 좌굴 거동을 보여주고 있었으며, 따라서, 첫 번째 비틀림 좌굴 모멘트 에 비해서 최종 비틀림 좌굴 모멘트가 월등히 큰 것을 확 인하였다. 또한, 밀폐 여부에 따라서도 하이브리드 탄소 나노튜브의 비틀림 후 좌굴 거동은 큰 차이를 보이고 있 었다. 비틀림 후 좌굴 거동에서 밀폐된 하이브리드 탄소 나노튜브의 비틀림 강성과 최종 비틀림 좌굴 모멘트는 밀폐되지 않은 하이브리드 탄소나노튜브에 비해서 중요 하게 큰 것을 확인할 수 있었다. 하이브리드 탄소나노튜 브에서 이러한 독특한 비틀림 후 좌굴 거동은 탄소나노 튜브 안쪽에 채워진 부탄 분자의 영향으로 부탄 분자가 비틀림 좌굴에 의한 단면 방향의 변형에 영향을 주기 때

문이다. 밀폐되지 않은 하이브리드 탄소나노튜브의 경우 에 부탄 분자가 비틀림 좌굴에 의한 단면 방향의 변형 영 역을 피해서 외부로 이동하는 움직임을 확인할 수 있었 으며, 이러한 거동은 탄소나노튜브를 이용한 원자전달에 응용될 수도 있다[7]. 하이브리드 탄소나노튜브의 외벽에 붙여진 H<sub>2</sub>C=C 그룹은 비틀림 좌굴 거동에 영향을 미치 기는 하지만 아주 미미한 것을 또한 확인하였다. 본 연구 에서의 결과는 나노 스케일의 장치와 복합재료 등에 탄 소나노튜브의 적절한 응용을 위하여 의미 있을 것이다.

### References

- [1] S. J. Papadakis, A. R. Hall, P. A. Williams, L. Vicci, M. R. Falvo, R. Superfine, S. Washburn, "Resonant oscillators with carbon-nanotube torsion springs", *Physical Review Letters*, Vol.93, No.14, pp.146101, Oct. 2004. DOI: <u>https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.146101</u>
- B. W. Smith, D. E. Luzzi, "Formation mechanism of fullerene peapods and coaxial tubes: a path to large scale synthesis", *Chemical Physics Letters*, Vol.321, No.1-2, pp.169-174, Apr. 2000.
  DOI: https://doi.org/10.1016/S0009-2614(00)00307-9
- [3] B. W. Jeong, J. K. Lim, S. B. Sinnott, "Elastic torsional responses of carbon nanotube systems", *Journal of Applied Physics*, Vol.101, No.8, pp.084309, Apr. 2007. DOI: <u>https://doi.org/10.1063/1.2717138</u>
- [4] D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison, S. J. Stuart, B. Ni, S. B. Sinnott, "A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons", *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol.14, No.4, pp.783-802, Jan. 2002. DOI: http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/14/4/312
- [5] B. W. Jeong, S. B. Sinnott, "Unique buckling responses of multi-walled carbon nanotubes incorporated as torsion springs", *Carbon*, Vol.48, No.6, pp.1697-1701, May. 2010. DOI: <u>https://doi.org/10.1016/j.carbon.2009.12.048</u>
- [6] B. Ni, S. B. Sinnott, P. T. Mikulski, J. A. Harrison, "Compression of Carbon Nanotubes Filled with C<sub>60</sub>, CH<sub>4</sub>, or Ne: Predictions from Molecular Dynamics Simulations", *Physical Review Letters*, Vol.88, No.20, pp.205505, May. 2002. DOI: <u>https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.205505</u>
- [7] Q. Wang, "Atomic transportation via carbon nanotubes", *Nano Letters*, Vol.9, No.1, pp.245–249, Dec. 2008. DOI: <u>https://doi.org/10.1021/nl802829z</u>

#### 정 병 우(Byeong-Woo Jeong)





- 2007년 8월 : 한양대학교 대학원 기계설계학과 (공학박사)
- 2010년 3월 ~ 현재 : 대덕대학교 항공부사관과 부교수

〈관심분야〉 나노역학, 나노전산모사