

## 삼중벽 탄소나노튜브를 이용한 오실레이터 응용 해석

이준하(책임저자)\*, 김형진\*\*, 김정환\*\*, 주아영\*\*

\*상명대학교 컴퓨터시스템공학과, \*\*상명대학교 나노시스템연구센터

### 초록

(5n,5n) CNT 로 이루어져 있는 삼중벽 CNT(Carbon Nano Tube) 오실레이터의 진동을 분자동역학 시뮬레이션을 통해 연구하였다. 삼중벽 CNT 오실레이터의 진동수는 이중벽 CNT 오실레이터의 진동수보다 더 높은 것으로 관찰되었다.

### 1. 서론

탄소나노튜브(CNTs)는 정밀공학기술, 전자공학장치, 의료 등과 같은 다양한 용도로 고려되어져왔다. Cumings 와 Zettl 보고서[1] 이후에 기가헤르츠 CNT 기반 오실레이터는 Zheng 과 Jiang 에 의해 제안되어졌다[2]. 기가헤르츠 나노튜브 오실레이터는 나노단위센서, 작동장치, 공진기, 연료분사장치, 모터, 엔진, 필터, 메모리, 스위치 장치에 적용되어 질 것이다. 분자동역학(MD)은 나노단위 기계구성의 실행을 예측하고 연구하기 위해 사용되어 졌으며, 높은 진동수의 CNT 오실레이터는 MD 시뮬레이션을 사용하면서 많은 연구 결과들이 발표되었다[3-7]. Legoas[8,9]는 이런 이론의 신빙성을 검증하기 위해서 다양한 유형의 나노튜브를 가지고 이러한 시스템을 위한 MD 시뮬레이션을 보였다. Coluci[10]는 결합된 CNT 오실레이터의 동작에서 무질서한 특징을 보고했다. Liu[11]는 5 가지 vdW 전위를 이용하여 이중벽(DW) CNT 오실레이터의 불안정한 진동 동작을 이끄는 메커니즘을 연구했다. 삼중벽(TW) CNT 오실레이터 또한 MD 시뮬레이션에 의해 연구되어왔다[12]. Zhao 와 Cummings[13]는 다양한 동일구조와 나노튜브 길이를 가지고 일정한 에너지와 일정한 온도 하에서 이중벽 CNT 오실레이터의 MD 시뮬레이션을 수행했다. 삼중벽 CNT 오실레이터의 결합 동작은 이전 연구에서 알려졌었지만, TWCNT 오실레이터의 결합 진동 특징은 분석되지 않았다. DWCNT 오실레이터의 진동수는 간단한 방정식으로 추측될 수 있는 반면에 다중벽 CNT 오실레이터의 진동 주파수는 내벽 결합 때문에 간단한 방정식에 의해 해석하기 불가능하다. CNT 오실레이터는 DWCNT 뿐만 아니라 다중벽 CNT 에서도 실행되기 때문에 다중벽 CNT 오실레이터의 결합 동작도 연구되어야 하겠다. 그러므로 이 논문에서는 일반적인 MD 시뮬레이션을 사용하여 (5n,5n) CNT 로 이루어져있는 TWCNT 오실레이터의 결합 진동과 내벽 연결로 인한 진동수의 분열을 연구했다. 그리고 나서, TWCNT 오실레이터의 진동수가 DWCNT 오실레이터의 진동수보다 더 높다는 것을 연구했다.

## 2. 실험 방법

다중벽 CNT 오실레이터에 대한 MD 시뮬레이션을 수행하기 위해 우리는 실험에 근거를 둔 두가지 전위 함수를 사용했다. 탄소-탄소 상호작용에 대한 탄소 체계에서 폭넓게 적용되어지는 Tersoff-Brenner 전위함수[14]를 사용했다. 탄소의 원대한 상호작용은 Mao[15]로부터 얻은 파라미터를 가진 Lennard-Jones 12-6 전위식을 써서 특성을 기술했다. 이 논문에서 LJ12-6 전위식에 대한 파라미터는 각각  $\epsilon_{carbon} = 0.0042 \text{ eV}$ ,  $\sigma_{carbon} = 3.37 \text{ \AA}$  이다. LJ12-6 전위식의 최단거리는  $10\text{\AA}$  이다. 모든 MD 시뮬레이션의 온도는 1K 로 설정하였고 전체 에너지는 모든 MD 시뮬레이션 동안에 일정하게 했다. 결합 동작에 따른 진동수 분열 연구를 목적으로 원자의 배치는 에너지 손실을 피하기 위하여 논문에서 Z 축인 이행 위치만으로 평가했다. 이 연구에서는 다중벽 CNT 의 내벽 반데르발스 작용에 따른 진동 결과를 분석을 목적으로 하여 열에너지 손실과 내벽 에너지 교환은 포함하지 않았다. 이 논문에서 (5,5)(10,10), (10,10)(15,15), (15,15)(20,20) CNT 와 같은 이중벽 CNT 는 각각 5@10, 10@15, 15@20 CNT 로 표시했고 (5,5)(10,10)(15,15), (10,10)(15,15)(20,20) CNT 와 같은 삼중벽 CNT 는 각각 5@10@15, 10@15@20 CNT 로 표시했다. CNT 오실레이터가 실현되었을 때 바깥쪽 CNT 는 진동 동작을 얻기 위하여 다른 물질로 접촉시키거나 고정시켜야 했다. 그러므로 모든 MD 시뮬레이션의 바깥쪽 CNT 에 대하여 그것의 질량 중심은 매 MD 단계에 의해 위치가 재설정되는 방법을 사용함으로써 지속적으로 유지했다. 결합 진동을 연구하기 위하여 TWCNT 오실레이터의 진동 형태와 DWCNT 오실레이터의 진동 형태를 비교했다. 중심 CNT 는 초기 이행속도( $v_0$ ) 100m/s 로 시작되고 진동 주파수( $f$ )는 FFT 에 의해 분석된다.

## 3. 실험결과 및 고찰

우선 3 개의 DWCNT 오실레이터로 vdW(FvdW)를 측정했다. 안쪽 CNT 의 중심위치(dinner)를  $0.01\text{\AA}$  증가함에 따라 구조는 SD 방법에 의해 가장 효율적으로 됐고 FvdW 는 그림 1 에 그려진 것과 같은 dinner 의 함수를 얻게 됐다. 이중벽 CNT 오실레이터에서의 FvdW 은 직경이 증가함에 따라 증가하고, 특히 최대값은 vdW 힘이 거의 일직선으로 증가한다는 것을 의미한다. (15,15)(10,10) CNT 오실레이터의 최대 vdW 힘인  $2.06\text{nN}$  은 (10,10)(5,5) CNT 오실레이터의 vdW 힘인  $1.2\text{nN}$  보다 1.7 배 더 컸고, 직경이 증가함으로써 vdW 힘은  $0.84\text{nN}$  증가했다. (5n,5n) CNT 로 구성된 DWCNT 오실레이터에서 n 의 증가에 따른 최대값은 vdW 힘과 안쪽 CNT 의 질량이 n 배 증가함을 의미한다. 만약 FvdW 이 상응하는 최대값이 vdW 힘을 의미하는 것과 같이 일정하다고 가정하면, DWCNT 오실레이터의 진동 주파수는 DWCNT 오실레이터의 직경에 개의치 않고 일정할 것이다.

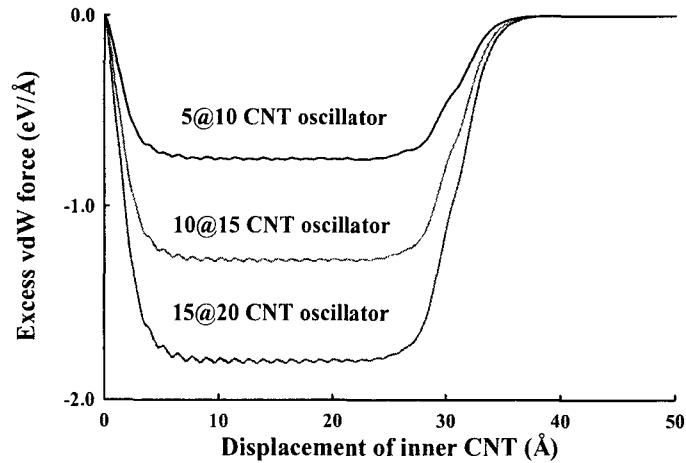


그림 1. 내측 CNT의 중심위치에 따른 vdW 힘의 분포

그림 2(a)-(c)는 MD 시간함수에 따른 5@10@15 CNT 오실레이터에 대한 (5,5) CNT의 vdW 힘, vdW 에너지 변화, (5,5)와 (10,10)의 질량중심을 보여준다. TWCNT 오실레이터는 30ps 후에 규칙적인 상태가 된다. DWCNT 오실레이터는 vdW 에너지 변화에 있어 단일 진동으로 알게 되었다. TWCNT 오실레이터에 대한 그림 2(a)에서는 vdW 힘 변화가 조화로운 진동과 연관된 것처럼 보였다.

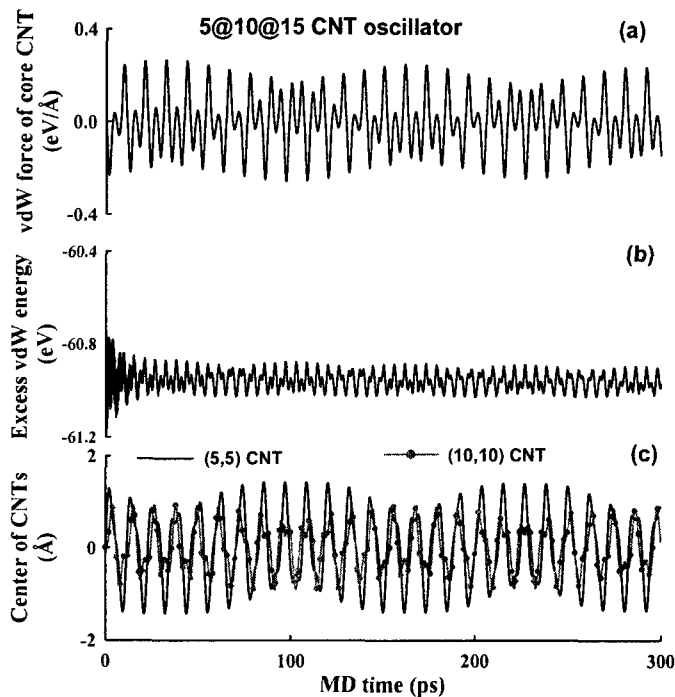


그림 2. (a) 중심 CNT의 vdW 힘 (b) 초과 vdW 에너지 (c) (5,5) 및 (10,10) CNT의 무게중심

#### 4. 결론

본 연구는 MD 시뮬레이션을 사용하여 (5n,5n) CNT 로 이루어져 있는 삼중벽 CNT 오실레이터의 결합 진동을 연구했다. 이중벽 CNT 오실레이터에서의 vdW 힘은 직경이 증가함에 따라 증가하였고 특히, 최대값은 vdW 힘이 거의 일직선으로 증가한다는 것을 의미했다. 중심 CNT 가 삼중벽 CNT 로부터 밀릴 때 두 번째 CNT 는 여분의 vdW 힘에 의해 바깥쪽으로 움직인다. 이러한 연속적인 메커니즘에 의해 삼중벽 CNT 의 바깥쪽 벽을 제외한 모든 벽은 진동되었다. 중심 CNT 는 가장 작은 vdW 힘과 가장 작은 질량을 가졌기 때문에 가장 쉽게 진동했다. 삼중벽 CNT 오실레이터의 주파수는 이중벽 CNT 오실레이터보다 더 높았다. 다양한 중심 CNT 의 끝에서 내벽 결합으로 인한 주파수 피크값은 벽의 수가 증가할 때와 서로 유사했다. 이것은 내벽 결합작용이 벽의 수를 증가할 때와 같이 증가한다는 것으로 해석할 수 있다.

#### 참고문헌

- [1] J. Cumings and A. Zettl, Science **289**, 602 (2000).
- [2] Q. Zheng and Q. Jiang, Phys. Rev. Lett. **88**, 045503 (2002).
- [3] Q. Zheng, J. S. Liu, and Q. Jiang, Phys. Rev. B **65**, 245409 (2002).
- [4] W. Guo, Y. Guo, H. Gao, Q. Zheng, and W. Zheng, Phys. Rev. Lett. **91**, 125001 (2003).
- [5] Y. Zhao, C-C. Ma, G. Chen, and Q. Jiang, Phys. Rev. Lett. **91**, 175504 (2003).
- [6] C-C. Ma, Y. Zhao, C-Y. Yam, G. H. Chen, and Q. Jiang, Nanotechnology **16**, 1253 (2005).
- [7] P. Tangney, S. G. Louie, and M. L. Cohen, Phys. Rev. Lett. **93**, 065503 (2004).
- [8] S. B. Legoas, V. R. Coluci, S. F. Braga, P. Z. Coura, S. O. Dantas, and D. S. Galvão, Phys. Rev. Lett. **90**, 055504 (2003).
- [9] S. B. Legoas, V. R. Coluci, S. F. Braga, P. Z. Coura, S. O. Dantas, and D. S. Galvão, Nanotechnology **15**, S184 (2004).
- [10] V. R. Coluci, S. B. Legoas, M. A. M. de Aguiar, and D. S. Galvao, Nanotechnology **16**, 583 (2005).
- [11] J. W. Kang and H. J. Hwang, J. Appl. Phys. **96**, 3900 (2004).
- [12] W. Guo, W. Zhong, Y. Dai, and S. Li, Phys. Rev. B **72**, 075409 (2005).
- [13] X. Zhao and P. T. Cummings, J. Chem. Phys. **124**, 134705 (2006).
- [14] J. Tersoff, Phys. Rev. B **38**, 9902 (1988).
- [15] Z Mao, A Garg, and S B Sinnott, Nanotechnology **10**, 273 (1999).