

부착 질량을 가지는 탐침 탄소-나노튜브 공진기의 모델링 및 시뮬레이션

최태호 · 이준하* · 김태은**†

상명대학교 컴퓨터정보통신공학과, *상명대학교 컴퓨터시스템공학과

†**남서울대학교 멀티미디어학과

Modeling and Simulation of Cantilevered Carbon-Nanotube Resonator with the Attached Mass

Tae Ho Choi, Jun Ha Lee*, and Tae-Eun Kim**†

Computer Information Telecommunication Engineering, Sangmyung University,

*Department of Computer System Engineering, Sangmyung University

†**Department of Multimedia, Namseoul University

ABSTRACT

Cantilevered carbon-nanotube-resonator was investigated via classical molecular dynamics simulations. The resonator system is including the attached nanocluster. A nanocluster with a finite length was modeling by some atomic rings. The mass of the nanocluster was equally distributed on the carbon atoms, composed of the atomic rings. The effective density factor, which could be considered as the single parameter affecting the resonance frequency shift, was significantly influenced by the mass, the position, and the linear density of the attached nanocluster. The linear density of the attached nanocluster was an important parameter to analyze the vibrational behavior of the CNT-resonator, including the attached nanocluster.

Key Words : Nanotube, Resonator, Molecular dynamics, Modeling, Simulation.

1. 서 론

탄소나노튜브(carbon nanotube; CNT)는 Iijima에 의해 최초로 보고된 이후로 우수한 기계적 물성, 전기적 물성 및 광범위한 응용 가능성으로 인해 과학계와 기술계에서 많은 관심을 받아 왔으며, 공진기, 진동자와 같은 나노전자기계 시스템구축을 위한 핵심적인 요소로 고려되어 왔다[1-3]. 높은 주파수해상도와 긴 에너지 저장시간을 제공하는 나노전자기계 공진기는 여러 공학 분야에 응용될 수 있다. 즉, 탐침이 장착된 공진기는 전자주사 현미경 내부에 부착된 탄소 입자의 질량을 추정하는데 사용되며, 실온의 CNT 기반 공진기는 나노튜브 무선 수신기를 바탕으로 원자질량 해상도를 탐지할 수 있으며, 주파수를 조정 기능을 이용하여

나노튜브 기반의 가변 공진기에 활용 될 수 있다[4, 5]. 또한 이동 가능한 나노클러스터가 캡슐화된 CNT 공진기는 초고주파 생성기, 기가헤르츠 주파수 튜너, 기가헤르츠 주파수대역 통과 여파기, 초고속 슈퍼컴퓨터, 초민감 나노단위 내부 측정 장치, 데이터 저장 매체, 초고해상도 자력현미경, 기가헤르츠 전자기장 발생장치를 개발할 수 있는 큰 잠재력을 가지고 있다 [6, 7].

본 논문은 나노클러스터를 포함한 탐침이 장착된 CNT-공진기의 진동 특성을 부착된 나노클러스터의 질량, 위치, 선형 밀도라는 3개의 변수를 지닌 함수로 모델화하고 분자동역학(molecular dynamics; MD) 시뮬레이션을 통해 해석하고자 한다.

2. 해석 방법

나노튜브의 특성 해석은 원자상호간 포텐셜을 기초

†E-mail : tekim@nsu.ac.kr

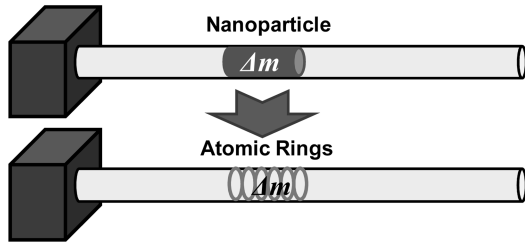


Fig. 1. Modeling CNT-resonator including a nanocluster with a finite length.

로 한 분자동력학적 모델링에 의해 이루어지는데, CNT-복합체의 공진 주기를 분석하기 위해서는, 탄소원자간, 탄소원자와 금속원자간, 금속원자간 상호작용을 포함하는 포텐셜 함수의 모델화가 필요하다. 기존의 연구들은 효율적인 시뮬레이션을 위해서 CNT의 탄소 원자에 외부 질량을 로딩(loading)하는 방법을 사용하였는데, 이 경우는 해석이 간단한 반면 질량이 단 하나의 원자에 위치한다는 면에서 구조의 한계성이 있다. 실제로 캡슐화된 나노클러스터의 질량은 일정한 유한의 범위 내에 분포해야 하므로, 본 연구에서는 캡슐화된 나노클러스터의 질량은 CNT로 구성된 탄소의 원자고리(atomic ring)에 로딩되는 것으로 설정하였다. 즉, Fig. 1에서와 같이 나노클러스터의 질량은 원자고리로 구성된 탄소원자들에 균등하게 분포되며, 원자고리의 수는 나노클러스터의 길이에 해당하는 만큼의 수로 구성되게 된다.

MD 시뮬레이션은 Tersoff-Brenner potential 함수를 이용하여, 계산 기능의 효율성을 위해 속도 Verlet 알고리즘 및 인접 목록(neighbor list)을 적용하였으며, 시간 간격(Δt)은 5×10^{-4} ps로 설정하여 총 1ns동안의 거동을 해석하였다 [8, 9]. 해석 공진기의 구조로는 길이가 약 10 nm인 480개의 원자로 구성된 양면 개방형(3,3) SWCNT를 이용하여, CNT의 좌측 끝은 고정되었으며 Δl 의 길이와 μ_l 의 선형질량밀도를 가진 나노클러스터의 질량(Δm)을 유한의 원자 고리로 구성된 탄소 원자들 전체에 균등하게 분포하도록 하였다. 탐침이 부착된 CNT 공진기의 진동자에 횡단 방향으로 외부의 힘을 가하여 공명을 유도하고, 결합력의 제거에 의해 자유롭게 진동되도록 했다. 먼저, 외부 질량이 없는 CNT의 기본적인 공진주기(f_0)를 계산한 다음, 공진주기는 CNT의 총 질량에 따라 변화하는 공진주기(f_{res})를 계산했으며 캡슐화된 질량의 중앙 위치(z)와 주기 이동간의 관계를 분석하였다.

3. 해석 결과

5개의 서로 다른 위치와 6개의 서로 다른 부착 질량, 6개의 서로 다른 선형 밀도로 180종류($5 \times 6 \times 6$)의 MD 시뮬레이션을 수행하였다. Fig. 2는 서로 다른 선형 질량밀도(μ_l)에 따른 서로 다른 부착 위치(z/L)에 부착된 부착 질량(Δm)의 함수로서의 CNT 공진기의 공진주기(f_{res})를 보여준다. 공진주기는 기존 연구들에서와 마찬가지로 모든 경우에서 Δm 이 증가하면 감소했다. 동일한 Δm 에서는 공진 주기가 선형 질량 밀도의 변화에 따라 변화한다는 것을 확인할 수 있다.

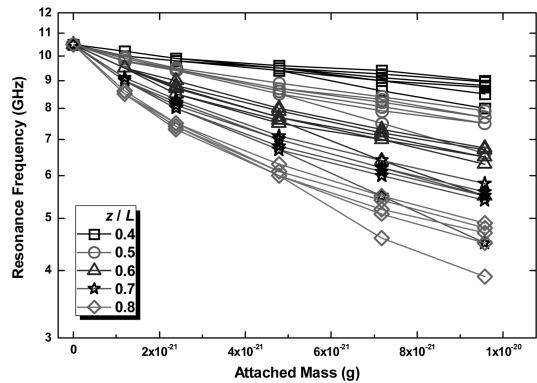


Fig. 2. Resonance frequencies (f_{res}) as a function of the attached mass (Δm) for different attached position (z/L) with the different linear mass density (μ_l).

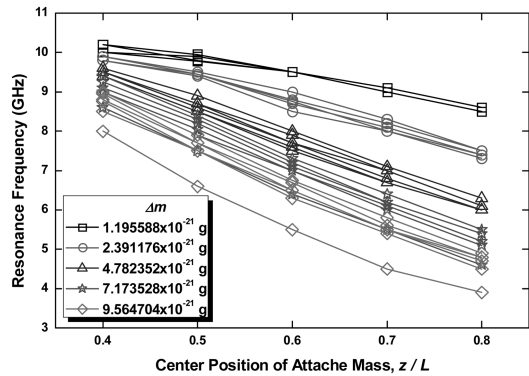


Fig. 3. Resonance frequencies (f_{res}) as a function of the attached position (z/L) for the different attached mass (Δm) with the different linear mass density (μ_l).

Fig. 3은 외부 질량이 동일한 위치에 부착되어있는 경우에 대하여 선형 질량 밀도의 변화에 따른 공진 주

기의 변화를 분석하였다. 기존의 연구들이 부착되는 질량 및 위치에 대한 공진 주기 변화의 결과를 다루었지만, 본 연구에서는 부착 질량을 포함한 CNT-공진기의 진동 거동을 이해하기 위해서는 부착 질량의 선형 밀도 또한 중요한 변수라는 것을 확인 하였다.

일반적으로 탐침-기판 질량 센서에서의 탐지 원리는 탐침의 공진 주기는 아래 식(1)과 같이 탐침 질량의 제곱근의 역수에 좌우된다 [10, 11].

$$f_{res} = 0.324 \sqrt{\frac{k}{m_{cantilever}}} \quad (1)$$

여기서, f_{res} 은 정사각형의 단면을 가진 직사각형 탐침의 공진 주기이며, k :는 탐침의 스프링 상수이다.

그러므로 공진기의 질량의 변화는 공진 주기의 변화로 탐지될 수 있으며, 이로부터 공진 주기는 또한 다음 식 (2)와 같이 표현될 수 있다.

$$f_{res} = \frac{f_0}{\sqrt{1+\Delta M}} \quad (2)$$

여기서, f_0 은 기본 공진 주기이며, Δ :은 부착 질량을 포함한 탐침의 유효질량이다.

부착 질량을 포함한 탐침의 유효질량 ΔM 은 식 (3)과 같이 표현될 수 있다.

$$\Delta M = \frac{M}{\rho AL} \mu \quad (3)$$

여기서, M 은 CNT만의 질량을 의미하며, A 는 CNT의 단면적, ρ 는 CNT의 밀도, 그리고 L 는 CNT의 길이를 의미한다.

그러므로 식 (2)는 다음과 같이 식 (4)와 같이 변형될 수 있다.

$$f_{res} = \frac{f_0}{\sqrt{1+\xi M}} \quad (4)$$

여기서, $\xi = \mu/\rho AL$ 는 부착 나노클러스터와 관계된 CNT의 유효밀도를 의미한다.

그러므로 본 연구의 결과가 식 (4)와 유사하다면 유효밀도 인자 ξ 는 Δm , z/L , μ_l 와 같은 변수들의 함수이며 식 (5)와 같이 표현된다.

$$\xi(\Delta m, z/L, \mu_l) = \frac{1}{M} \left(\frac{f_0^2}{f_{res}^2} - 1 \right) \quad (5)$$

식 (5)의 유효밀도인자 ξ 의 값은 Fig. 2 및 Fig. 3의 데이터로부터 계산되어 진다. Fig. 4는 캡슐화된 나노클러스터 $z/L = 0.8$ CNT에 대한 부착 질량과 부착 선

형 밀도의 함수로 구성된 유효밀도인자(ξ)의 관계를 3차원적 도식으로 표시한 것이다. 부착 나노클러스터의 위치(z/L)는 공진 주기에 직접적인 영향을 미치며, 부착 질량의 선형 밀도(μ_l) 및 부착 질량(Δm)이 증가함에 따라 증가하게 되는 비례관계를 가지게 된다.

Fig. 5에서는 유효밀도인자(ξ)를 서로 다른 부착 질량(ξ)에 대한 나노클러스터의 선형 밀도(μ_l)의 함수로 표시하였다. 각각의 서로 다른 부착 질량(Δm)의 경향은 서로 유사한 경향을 나타내었으며, 이러한 원인은 유효밀도인자(ξ)의 변수로서 나노클러스터의 선형 밀도(μ_l)와 부착 질량(Δm)은 독립 변수라는 것을 의미하고 있다. 즉, CNT의 캡슐화된 나노클러스터의 선형 밀도는 중요한 변수로서 역할을 하며, 나노 클러스터를 포함하는 CNT 공진기의 진동 동작으로부터 독립적인 영향을 받는다는 것으로 해석할 수 있다.

그러므로, CNT-공진기의 해석과 활용에는 부착 나노클러스터에 의한 유효 질량의 변화가 실제 질량보다 더욱 중요하다는 것으로 분석되었다. 탐침이 부착된 빔 진동기에 관한 연구에서와 같이, 더 높은 온도는 CNT 공진기로 하여금 특징 인자를 더욱 크게 증가시키도록 만들 것이다.

4. 결 론

본 연구에서는 분자동역학 모델링을 통한 시뮬레이션을 이용하여 탐침이 장착된 CNT-공진기의 진동 특성을 해석하였다. 나노클러스터에 대한 모델링은 유한

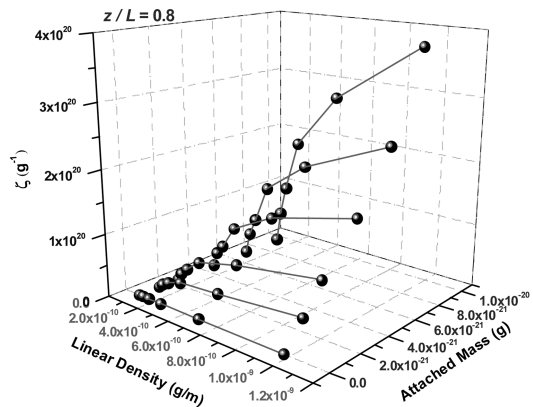


Fig. 4. Three-dimensional plot for the effective density factor (ξ) of the CNT involving the encapsulated nanocluster as functions of the attached mass (Δm) and the linear density (μ_l) of the attached nanocluster for $z/L = 0.8$.

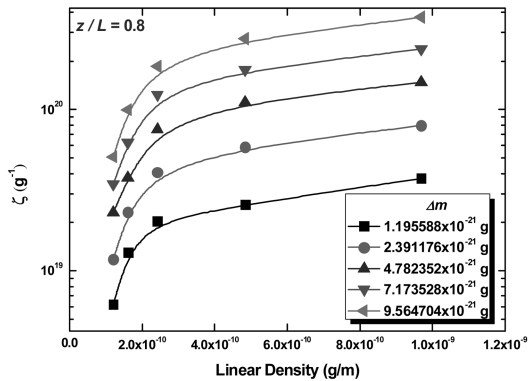


Fig. 5. Effective density factor (ξ) plots as a function of the linear density (μ) of the nanocluster for the different attached mass (Δm).

길이를 가진 나노클러스터를 원자 고리를 이용해 모델화하였고, 나노클러스터의 질량은 원자 고리로 구성된 탄소 원자에 균등하게 분배되고 원자 고리의 수는 나노클러스터의 길이가 원자 고리의 길이와 거의 동일하다는 조건으로 설정하였다. 공진주기 변화에 영향을 미치는 단일 변수로 고려될 수 있는 유효밀도인자는 부착 나노클러스터의 질량, 위치, 선형 밀도의 영향을 크게 받았다.

감사의 글

이 논문은 2007년도 남서울대학교 학술연구비 지원에 의해 연구되었음.

참고문헌

1. S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon," Nature 354, pp. 56-58, 1991.
2. R. Poncharal, Z.L. Wang, D. Ugarte, and W.A. de

- Heer, "Electrostatic deflection and electromechanical resonances of carbon nanotubes," Science 283, pp.1513-1521. 1999.
3. V. Sazonova, Y. Yaish, H. Ustunel, D. Roundy, T.A. Arias, and P.L. McEuen, "A tunable carbon nanotube electromechanical oscillator," Nature 431, pp.284-287, 2004.
4. Q. Zheng and Q. Jiang, "Multiwalled carbon nanotubes as gigahertz oscillators," Phys. Rev. Lett. 88 045503, 2002.
5. X.M.H. Huang, C.A. Zorman, M. Mehregany, and M.L. Roukes, "Nanoelectromechanical systems: Nanodevice motion at microwave frequencies," Nature 421, pp. 496-504, 2003.
6. D. Qian, G.J. Wagner, W.K. Liu, M.F. Yu, and R.S. Ruoff, "Mechanics of carbon nanotubes," Appl. Mech. Rev. 55 pp. 495-503. 2002.
7. K. Jensen, J. Weldon, H. Garcia, and A. Zettl, "Nanotube Radio," Nano Lett. 7, pp.3508-3511, 2007.
8. J. Tersoff, "Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems," Phys. Rev. B 39, pp.5566-5574, 1989.
9. D. W. Brenner¹, O. A. Shenderova¹, J. A. Harrison, S. J. Stuart, B. Ni, and S. B. Sinnott, "A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons," J. Phys.: Condens. Matter 14, pp. 783-802, 2002.
10. R. Chowdhury, S. Adhikari, and J. Mitchell, "Vibrating carbon nanotube based bio-sensors," Physica E 42 pp. 104-112, 2009.
11. S.K. Georgantizinos and N.K. Anifantis, "The calibration of carbon nanotube based bionanosensors," Physica E 42, pp. 1795-1803, 2010.

접수일: 2012년 6월 5일, 심사일: 2012년 6월 13일,
게재확정일: 2012년 6월 18일