

장력제어를 통한 가변형 탄소나노튜브 공진기에 대한 연구

최태호 · 이준하^{*†}

상명대학교 컴퓨터정보통신공학과

[†]*상명대학교 컴퓨터시스템공학과

Tension Control Tunable Carbon Nanotube Resonator

Tae Ho Choi and Jun Ha Lee^{*†}

Department of Computer Information Telecommunication Engineering, Sangmyung University

[†]*Department of Computer System Engineering, Sangmyung University

Abstract

Carbon Nanotube have been proposed for use in various applications for electromechanical systems. Nano-electromechanical resonators which provide high frequency resolution and long energy storage time, play an important role in wide area fields of science and engineering. Using the control of tension in carbon nanotube, can be made the tunable resonator. In the study, we analysis the tunable frequency change of resonator by tension changes due to the rotation angles of the single-walled carbon nanotube resonator. The frequency characteristics of a resonator as a function of the rotation angle. The tension was found to decrease with increasing rotation angle, and therefore the resonance frequencies could be changed by controlling the single-walled carbon nanotube rotation angle. The resonance frequencies decreased with increasing angle, and when the rotation angle was greater than 60°, these changes were marked.

Key Words : Tension, Control, Tunable, Carbon Nanotube, Resonator

1. 서 론

탄소나노튜브는 1991년 Ijima의 튜브형태의 탄소구조 발견이래로 다양한 분야의 신소재로 주목 받고 있다[1]. 탄소나노튜브(CNT : Carbon Nano Tube)는 크기가 나노 단위이며 높은 직경/길이 비를 가지는 섬유상 물질의 특징과 나노 구조에 의한 높은 비표면적과 탄소로 이루어진 경량 및 친환경소재의 특성을 구조적으로 가지고 있다[2].

또한, 공유결합 형태의 탄소결합구조로서 인장강도가 고강도금속에 비하여 수십배이며, 전류밀도 허용도가 크며 내열성과 우수한 전기전도도를 가지고 있는 특성으로 다양한 응용분야에 적용될 수 있다[3].

특히, 전자소자 분야인 트랜지스터와 금속배선등의 단위소자와 더불어 나노전자소자 구현을 위한 로직 어

레이, 메모리 어레이 및 칩 형태의 시스템 분야에도 응용 잠재력이 있다[4].

탄소나노튜브는 2차원적인 그래파이트 면이 나노미터 수준의 직경으로 등글게 말린 형태이며, 이 그래파이트 면이 말리는 각도와 형태에 따라서 특성이 서로 다른 다양한 구조를 가진다. 그래파이트 면으로 이루어진 벽의 개수에 따라서 단일벽 탄소나노튜브(Single-walled carbon nanotube : SWCNT) 또는 다중벽 탄소나노튜브(Multi-walled carbon nanobue : MWCNT)로 구분할 수 있으며, 여러 개의 탄소나노튜브가 뭉쳐있는 형태의 다발형(Carbon nanotube rope)로 존재하기도 한다. SWCNT는 높은 전기전도도로 ITO대체 투명전극등으로 활용이 가능한 유망한 구조이지만 현재 대량 생산이 어려워 MWCNT에 비해 매우 큰 생산원가가 요구되고 있다. 탄소나노튜브의 전기적 특성은 자유전자의 운동방식이 바뀌게 되어 나선형 또는 카이랄성(Chirality)에 의존한다. 즉 카이랄 벡터 (n,m)에 대하여 (n,m)이 3의 배수가 되면 자유전자의 운동이 완전히 자

[†]E-mail : junha@smu.ac.kr

유로워져서 금속성의 전도성을 띠게 되며, 이외에는 반도체처럼 밴드갭이 형성되어 전하이동을 위해서는 외부의 에너지가 필요한 형태가 된다 [5].

CNT를 이용한 나노 공진기의 연구분야에서 필요한 주파수를 얻을 수 있는 가변 공진기의 활용도는 매우 높을 것이다. 최근의 연구들에서는 공진기의 유효길이 변화 또는 유효질량 변화를 통해 가변성을 얻는 결과가 나오고 있지만, 보다 효과적으로 주파수를 변화시킬 수 있는 방법은 CNT의 장력 제어를 통한 카이랄성의 조절로 부터 나노전자 공진기의 응용이 가능할 것이다.

본 논문은 SWCNT 공진기의 회전각으로부터 발생하는 장력의 변화에 의하여 공진기의 주파수 변화에 대한 현상을 분자동역학 모델링을 통하여 해석하였다.

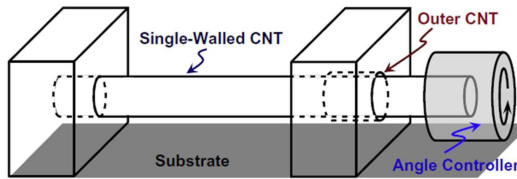


Fig. 1. Schematic view of single-walled CNT with tunable resonator

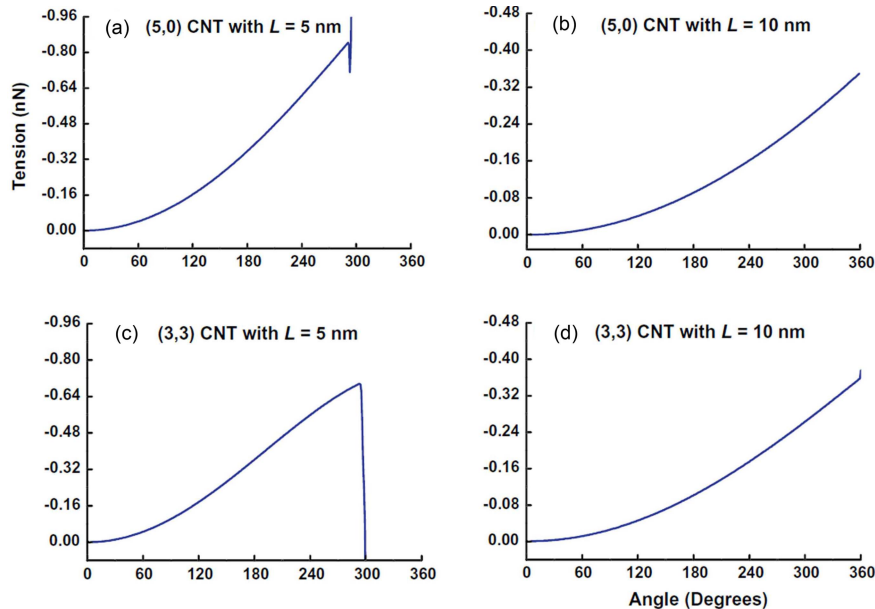


Fig. 2. Tension as a function of rotation angle (For (5,0) SWCNT with (a)L = 5 and (b)L = 10 nm, For (3,3) SWCNT with (c)L = 5 and (d)L = 10 nm).

2. CNT 공진기 구조 및 시뮬레이션 방법

Fig. 1은 단일벽 탄소나노튜브로 형성된 가변형 공진기의 소자 구조를 보여준다. 최초에는 다중벽 탄소나노튜브로 부터 구조가 만들어지나, 선택 식각 공정을 통해 양 옆의 격벽을 형성하는 공정 중, 격벽 사이의 탄소나노튜브는 Outer CNT는 식각되어 상실되고SWCNT만이 남게 되는 구조로 형성된다. 좌측부는 고정되어 있고 우측부는 회전축 제어부와 연결되어 있다. 단일벽 탄소나노튜브 공진기의 회망 진동 주파수는 우측부에 연결되어 있는 각도제어기를 통한 회전각을 변화시킴으로 얻어질 수 있다. 유효 진동길이(L)은 두 고정된 노드 사이에 존재하게 됨으로, 실제의 탄소나노튜브의 길이는 유효 진동 길이보다는 크게 된다.

본 연구에서는 (5,0)과 (3,3) SWCNT와 같은 두가지 SWCNT에 대하여 모델화하고 시뮬레이션을 수행하였다. 실제SWCNT의 길이는 유효 진동길이보다 2 nm 크게 설정하였으며 시뮬레이션시 변형되지 않는 상수로 설정하였다.

CNT를 구성하고 있는 공유결합형태의 탄소 원자간의 상호작용에 대한 동작은 Tersoff-Brenner 포텐셜을 적용하여 모델화하였다. 탄소의 장기 상호작용은 Lennard-Jones 12-6 포텐셜을 이용하여 모델화하여 분자동역학 코드를 자체 작성하였다[6]. 본 코드의 알고리즘은 Verlet velocity algorithm을 이용하였으며, 온

도제어를 위해서는 Gunsteren-Berendsen 모델을 적용하였다[7].

3. 결과 및 고찰

나노 공진기의 주파수 해석을 위하여 제작된 분자동역학 코드를 이용하여 초기의 원자 속도는 해석 구조 시스템의 온도에 따른 속도 에너지를 Maxwell 분포에 따라 설정하여, 시뮬레이션 시간간격과 양 끝단의 CNT는 고정조건으로 설정하였다.

Fig. 2에서는 회전각에 따른 장력의 변화를 함수로 나타내었다. 우측의 각도 제어기를 1도 회전함에 따라 steepest-descent method로 SWCNT 변형이 최적화되었다. 이러한 과정을 360° 회전할 때까지 반복하였다. (a)와 (b)는 카이랄 (5,0) SWCNT에 대하여 길이 L = 5 nm 와 L = 10 nm에 대해 수행하였으며, (c)와 (d)는 카이랄 (3,3)에 대해 수행한 결과를 나타낸 것이다.

회전각이 증가할 수록 장력은 감소하는 경향, 즉 압축이 증가하는 경향을 나타내었는데 이 결과는 이전의 타 연구에서 보여준 튜브의 비틀림 방향으로 전단응력이 가해짐에 따라 SWCNT 카이랄성이 줄어드는 효과를 보여준 것과 같은 현상을 나타낸다[8].

Fig. 3은 시뮬레이션 시간 진행에 따른 각각의 각도에서의 장력의 변화를 나타내고 있다. 회전각이 증가함에 따라 장력은 감소함이 확실히 나타나고 있다. 이 결과는 또한 이전의 유사 연구 결과가 보여준 armchair 및 zigzag SWCNT가 SWCNT 카이랄성의 방향과 상관없이 비틀렸을때, 항상 짧아졌다는, 즉, 전단응력 증가에 따라 감소한다는 결과와 잘 일치하고 있다[9].

Fig. 4는 길이 L = 5 nm의 (5,0) 및 (3,3) 구조의 SWCNT에 대하여 회전각도 0°, 60°, 120°, 180° 및 240°에 대해 얻어진 주파수에 따른 스펙트럼을 나타내고 있다.

Fig. 5은 (5,0) 및 (3,3) SWCNT 공진기의 회전각도

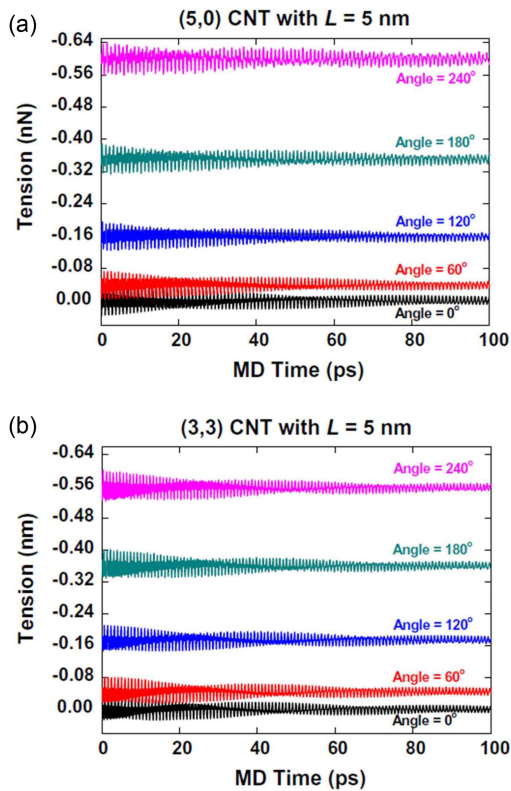


Fig. 3. Tension variations as a function of MD time with rotation angles of 0°, 60°, 120°, 180° and 240° for SWCNT resonators composed of (a) (5,0) SWCNT and (b) (3,3) SWCNT with L=5 nm.

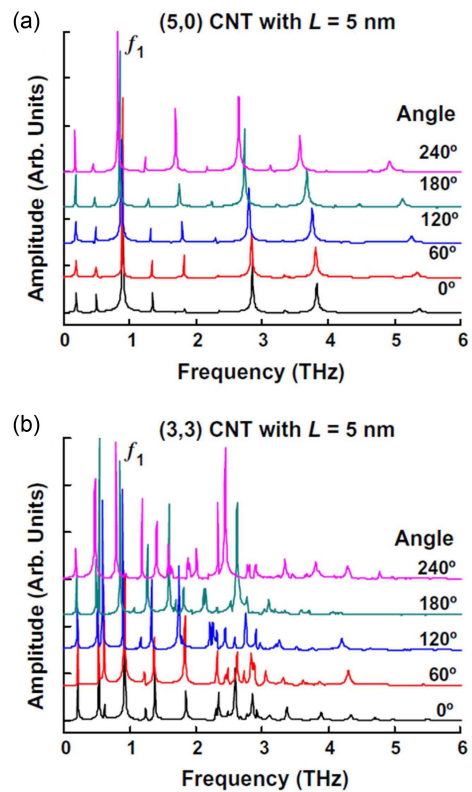


Fig. 4. Spectra as a function of frequency with rotation angles of 0°, 60°, 120°, 180° and 240° for SWCNT resonators composed of (5,0) SWCNT and (b) (3,3) SWCNT with L=5 nm

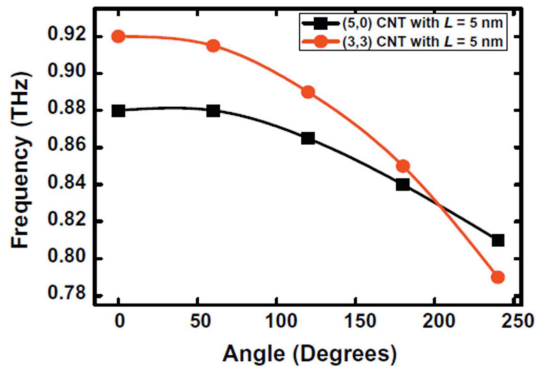


Fig. 5. Resonance frequency as a function of rotation angle for (5,0 and (3,3) CNT with L=5 nm

0°, 60°, 120°, 180° 및 240°에서의 주파수를 함수로 나타낸 것이다. 공진주파수는 회전각의 증가에 따라 감소하는 경향을 나타내었고, 특히 회전 각도가 60°이상인 영역에서는 변화율이 크게 나타났다. 또한 (3,3) SWCNT가 (5,0)SWCNT에 비하여 보다 큰 대역폭을 나타내었다.

4. 결 론

본 논문에서는 SWCNT의 구조적인 장력의 제어에 따른 나노공진기의 주파수 변화에 대한 분자동역학 모델링 및 시뮬레이션을 수행하였다. 회전각을 증가함에 따라 장력은 반비례하게 감소되었으며, 이러한 결과로 제안한 기본적인 구조에서 회전각의 제어를 통한 나노 공진기의 제작이 가능하다는 결과를 얻을 수 있었다.

참고문헌

1. S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon," *Nature*, Vol. 354, No.6348, pp.56-58, 1991
2. A. Suri and A. Misra, "Coupling of Photomechanical and electromechanical actuations in carbon nanotubes," *Nanotechnology*, Vol. 24, No. 10, 2013
3. D. Carr, S. Evoy, L. Sekaric, H. Craighead and J. Papria, "Measurement of mechanical resonance and losses in nanometer scale silicon wires," *Applied Physics Letters*, Vol. 75, No. 7, pp.920-922, 1999
4. F. Galantini, S. Bianchi, V. Castelvetro and G. Gallone, "Functionlaized carbon nanotubes as a filter for dielectric elastomer composites with imporved actuation performance," *Smart Material and Structures*, Vol. 22, No.5, 2013
5. B. Liu and H. Jiang, "Chirality-dependent reactivity of individual single-walled carbon anotubes," *Small*, Vol. 9, No. 8, pp.1379-1386, 2013
6. K. Samadikhah, R. Larsson, F. Bazooyar and K. Bolton, "Continuum-molecular modeling of graphene," *Computational Materials Science*, Vol.53, No. 1, pp. 37-43, 2012
7. H. Vlbricht, G. Moos and T. Hertel, "Interaction of C60 with carbon nanotubes and graphite," *Physical Review Letters*, Vol. 90, No. 9, pp095501/1-4, 2003
8. H. Liang and M. Upmanyu, "Axial-strain-induced torsion in single-walled carbon nanotubes," *Physical Review Letters*, Vol. 96, No. 16, 2006
9. A. R. Hall, M. R. Falvo, R. Superfine and S. Washburn, "A self-sensing nanomechanical resonator built on a single-walled carbon nanotube," *Nano Letters*, Vol. 8, No. 11, pp.3746-3749, 2008

접수일: 2013년 5월 27일, 심사일: 2013년 6월 11일,
게재확정일: 2013년 6월 17일