

탄소나노튜브로 둘러싸인 나노와이어 구조의 오실레이터 응용

송 영 진[†]

[†]건양대학교 전자정보공학과

Application of Carbon Nanotube Encapsulating Nanowire

Young Jin Song[†]

[†]Department of Electronic Information Engineering, Konyang University

ABSTRACT

Carbon nanotube oscillators encapsulating copper nanowire were investigated by molecular dynamics simulations. The excess forces due to the carbon-carbon van der Waals interactions are higher than the excess force due to carbon-copper interactions. And the masses of copper atoms are higher than those of carbon atoms. So, the carbon atoms are easier accelerated than the copper atoms. When the encapsulated copper nanowire deforms the encapsulating nanotube, the frequency can not be estimated by the mass-frequency dependence in classical oscillation theory.

Key Words : Carbon, Nanotube, Oscillator, Nanowire, Simulation

1. 서 론

탄소나노튜브를 응용한 나노 전기기계장치는 정밀공학, 전자장치, 의학 등과 같은 다양한 분야에서 각광받고 있다. 금속 나노와이어나 클러스터로 둘러싸인 다중 탄소나노튜브(Multi-Walled Carbon Nanotube: M@CNT)에 대한 응용 연구 또한 기가 헤르츠 오실레이터를 비롯한 다양한 분야의 응용으로 시도 되고 있다[1]. 외부 전자영역에 의해 초기값이 맞춰진 칼륨 이온을 둘러싼 Carbon Nanotube (CNT)와 자기 물질을 둘러싼 다중벽 CNT등이 나노-자기 소스와 나노-자기 메모리에 적용될 수 있는 가능성이 발표되었다[2,3].

다중벽 CNT 기반의 CNT 오실레이터는 MD 시뮬레이션을 통해 폭넓게 연구되었다. Zheng[4]은 밀어내고 당기는 힘으로 인한 잉여 반데르발스 에너지를 연구하기 위해 세부적인 이론적 계산을 사용하였으며, 그 이후 오실레이터의 에너지 손실또한 연구되었다. 기가헤르츠 오실레이터와 같은 장치의 신뢰성을 위하여 다양한 나노튜브 유형이 고려되었는데, 나노 오실레이터의 내부와 외부 튜브 사이 반경 차이가 약 3.4Å일때 동력

학적으로 안정되어 있다는 사실과 반데르발스 포텐셜에 따라 이중벽 CNT 오실레이터의 불안정한 진동 동작으로 연결되는 메커니즘등이 연구되었다[5, 6].

본 논문에서는 M@CNT 를 이용한 오실레이터에 대한 해석을 분자동력학 시뮬레이션을 사용해서 연구하였다. 구리 나노와이어를 둘러싼 이중벽 CNT 오실레이터의 진동동작을 관찰하고, 종속물질 진동변화를 둘러싸인 나노와이어가 둘러싼 CNT 모양 변화에 대해서 일반적인 진동이론과 결합한 방법을 통하여 해석하였다.

2. 시뮬레이션 방법

본 연구에서는 3 nm 길이의 CNT와 (5,5)-(10,10) 다중벽 BNNT를 고려하였다. C@BN 나노케이블은 BNNT에서 캡슐로 보호되어있는 C₆₀ 분자를 합성함으로써 형성할 수 있다. 합성과정 동안에 튜브 안쪽의 직경 변화는 반데르발스 거리를 만족시키기 위한 안쪽과 바깥쪽 사이에 층막을 조절하기 위하여 발생되었다. 그 결과 직경이 약 7Å인 CNT의 수는 열을 가한 시간에 따라 감소되었고, 보다 큰 직경을 가진 CNT의 수는 증가하였다. 구리 나노와이어를 둘러싼 이중벽 CNT 오실레이터에 대한 Molecular Dynamics(MD) 시뮬레

[†]E-mail : songjin@konyang.ac.kr

이전을 수행하기 위해서 두 가지 실험에 근거를 둔 전위식을 사용하였다[7,8]. 탄소-탄소 상호작용에 대해서는 탄소체계에서 폭넓게 적용되고 있는 Tersoff-Brenner 전위식을 이용하고, 탄소의 광범위한 상호작용은 Mao로부터 획득한 파라미터를 가진 Lennard-Jones 12-6(LJ12-6) 전위식을 가지고 특성을 기술하였다[9]. LJ12-6 전위식에 대한 파라미터는 각각 $\epsilon_{\text{carbon}}=0.0042\text{eV}$ 와 $\sigma_{\text{carbon}}=3.37\text{\AA}$ 으로, LJ12-6 전위식의 컷오프 거리는 10\AA 으로 설정하였다 [10]. MD 시뮬레이션을 통해 (10,10)(5,5)와 (15,15)(10,10)의 두 가지 이중벽 CNT를 고찰하였다. 3 nm의 길이를 가진 500개와 750개의 원자로 구성된 (15,15)와 (10,10)의 바깥쪽 CNT를 열고 3.3nm의 길이를 가진 270개와 640개의 원자로 구성된 (5,5)와 (10,10)의 안쪽 CNT를 덮었다. Fig. 1은 구리 나노와이어를 둘러싼 이중벽 CNT의 원자구조를 나타내고 있다. 46개와 330개의 원자로 구성되어 있는 구리 나노와이어는 armchair CNT로 둘러싼 최적화된 구리 나노와이어를 연구한 이전의 연구로부터 획득했다[11]. CNT 오실레이터는 바깥쪽 CNT가 고정되어 있거나 진동동작을 하는 다른 물질과 접촉해 있을 때 실행될 수 있었다. 그러므로, 모든 MD 시뮬레이션의 바깥쪽 CNT에 대해 그 덩어리의 중심은 매 MD 단계마다 위치를 재설정함으로써 끊임없이 유지시켰다. 가운데 CNT는 당초에 일반 구조로부터 바꾸어 놓고서 진동 주파수(f)는 300ps 동안의 MD 시뮬레이션으로 획득한 데이터를 사용하여 FFT(Fast Fourier Transform) 변환을 이용하여 분석하였다.

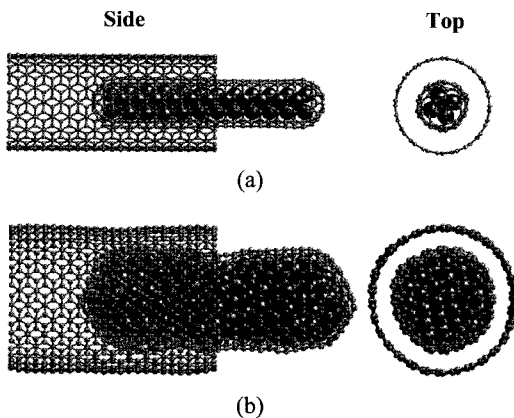


Fig. 1. Atomic structure of the double-walled CNTs encapsulating copper nanowires. (a) $\text{Cu}_{46}@(10,10)(5,5)$ CNT, (b) $\text{Cu}_{330}@(15,15)(10,10)$ CNT oscillators.

3. 결과 및 토의

그림 2(a)-(b)는 최초 변위에 대한 (10,10)(5,5) CNT와 $\text{Cu}@(10,10)(5,5)$ CNT 오실레이터의 주파수를 나타낸다. 최초 변위가 증가함에 따라 주파수는 감소되었다. 13\AA 과 23\AA 의 최초 변위에 대한 CNT 오실레이터의 주파수는 각각 76GHz와 57GHz로 계산되었다. 이 결과는 Rivera에 의해 증명되었고 수식에 의해 예측된 CNT 오실레이터의 진동주파수가 최초 변위의 제곱 루트에 반비례한다는 것을 보여준 이전의 연구와도 일치한다[12]. 13\AA 과 23\AA 의 최초 변위에 대한 $\text{Cu}@(10,10)(5,5)$ CNT 오실레이터의 주파수는 각각 53GHz와 42GHz이었다. 간단한 일차의 탄성-질량 체계에 대한 주파수는 일반적인 이론에 의하여 질량의 탄성 상수 비율 제곱 루트에 비례한다.

그림 2(c)는 최초 변위 10\AA 에 대한 (15,15)(10,10) CNT와 $\text{Cu}@(15,15)(10,10)$ CNT 오실레이터의 주파수를 나타낸다. (15,15)(10,10) CNT와 $\text{Cu}@(15,15)(10,10)$ CNT 오실레이터의 주파수는 각각 76GHz와 23GHz이었다. 동일한 최초 변위에서 이중벽 CNT 오실레이터의 직경이 증가함에 따라 그것의 진동 주파수는 $95\exp(-2.3d) + f_{\infty}$ 에 의해 표현됨으로써 감소하였

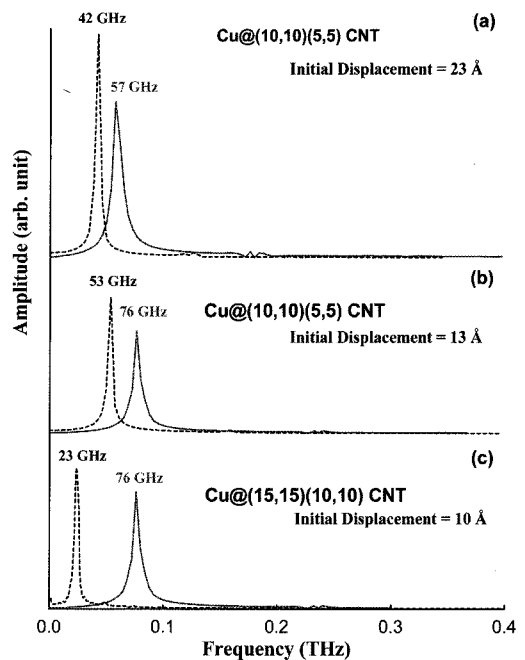


Fig. 2. Frequencies of (a) the (10,10)(5,5) CNT, (b) the $\text{Cu}@(10,10)(5,5)$ CNT, and (c) $\text{Cu}@(15,15)(10,10)$ CNT oscillators for the initial displacements.

다. d 는 나노미터 크기의 바깥쪽 CNT의 직경, f_{∞} 는 매우 큰 직경을 가진 이중벽 CNT 오실레이터의 주파수를 의미한다.

10\AA 의 최초 변위를 가진 (15,15)(10,10) CNT 오실레이터에 대해서 이러한 관계식은 77GHz 의 예측을 가능케 하였다. $\text{Cu}@(\text{10,10})(\text{10,10})$ CNT 오실레이터에 대하여 식 (1)로부터 추정된 39GHz 의 주파수는 MD 시뮬레이션으로부터 얻은 23GHz 의 주파수와는 차이가 있었다. $\text{Cu}@(\text{10,10})(\text{5,5})$ CNT 오실레이터의 주파수가 질량-주파수 의존관계를 보여주는 식 (1)에 의해 알맞게 추정된 반면에 $\text{Cu}@(\text{15,15})(\text{10,10})$ CNT 오실레이터의 주파수는 그렇지 못하였기 때문이다.

$$f_{M@CNT} \propto \sqrt{\frac{F_x}{m}} \quad (1)$$

이러한 결과는 두가지 이유로 설명될 수 있다. 첫째는 캡슐로 들어간 구리 나노와이어의 질량 의존성이다. $\text{Cu}@(\text{10,10})(\text{5,5})$ CNT 오실레이터에 대한 구리 나노와이어의 질량은 (5,5) CNT의 질량보다 작은 반면에 $\text{Cu}@(\text{15,15})(\text{5,5})$ CNT에 대해서는 구리 나노와이어의 질량이 (10,10) CNT의 질량보다 2.7배 더 크다. 구리 나노와이어 질량의 일부가 증가함에 따라 $\text{Cu}@CNT$ 오실레이터 동작은 CNT 질량보다 구리 나노와이어의 질량 영향을 받게 된다. $\text{Cu}@CNT$ 오실레이터가 움직일 때 구리 나노와이어는 둘러싼 CNT와 약간 충돌한다. 그러면 큰 질량을 가진 구리 나노와이어 동작은 힘과 에너지의 이동면에 있어 작은 질량을 가진 CNT 동작보다 훨씬 중요하다. 그러므로, 나노와이어 크기가 증가함에 따라 나노와이어 동작은 훨씬 더 중요해진다. 그러나 $\text{Cu}@(\text{15,15})(\text{10,10})$ CNT 오실레이터의 주파수는 질량-주파수 의존관계를 보여주는 식 (1)로부터 얻은 것보다 훨씬 더 작았다. 그러므로, $\text{Cu}@(\text{15,15})(\text{10,10})$ CNT 오실레이터의 주파수는 질량 증가의 영향뿐만 아니라 다른 영향도 받았다. 두 번째는 벽 사이 마찰 의존성이다. 그림 1(a)에서 보여주듯이 $\text{Cu}@(\text{10,10})(\text{5,5})$ CNT 오실레이터에 대한 (5,5) CNT는 변형되지 않았고 그것은 매우 작은 표면 마찰과 에너지 손실과 함께 진동되었다. 그러나 $\text{Cu}@(\text{15,15})(\text{10,10})$ CNT 오실레이터에 대한 (10,10) CNT는 그림 1(b)에서 보여주듯이 변형되었다. 그러므로 변형된 $\text{Cu}@(\text{10,10})$ CNT는 움직이는 동작 동안에 높은 표면 마찰과 함께 진동되었고 이것은 높은 에너지 손실을 일으켰다. 높은 표면 마찰은 $\text{Cu}@(\text{10,10})$ CNT의 회전 동작을 일으킨다. $\text{Cu}@(\text{10,10})$ CNT 오실레이터의 회전 동작을 보기위해서 (10,10) CNT의 탄소 원자의 위치 변화를 Fig. 3에

서 좌표에 그렸다. Fig. 3은 MD 시간함수에 따른 $\text{Cu}@(\text{15,15})(\text{10,10})$ CNT 오실레이터에 대한 (10,10) CNT의 회전 동작을 보여준다. 투영도 x_i - y_i 좌표는 (10,10) CNT의 회전 동작으로 인한 원형을 정확하게 보여준다.

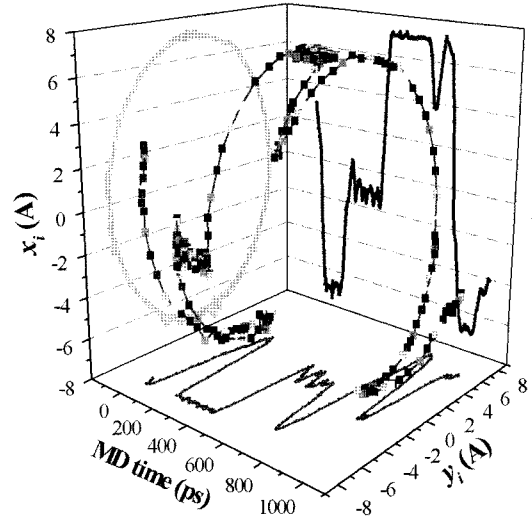


Fig. 3. To see the rotational motion of the $\text{Cu}@(\text{10,10})$ CNT oscillator, the position variation of an carbon atom of the (10,10) CNT was plotted as a function of the MD time.

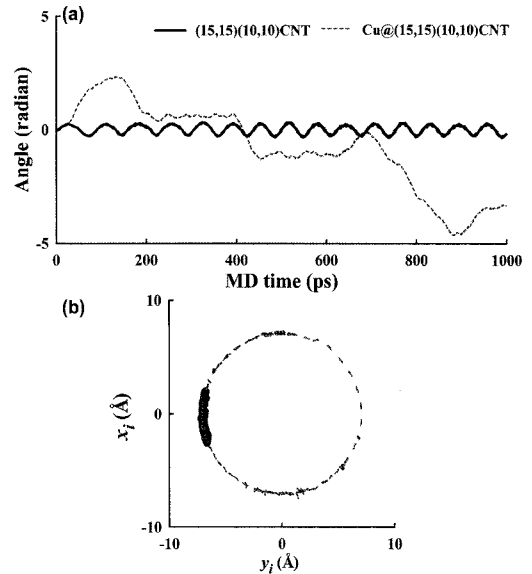


Fig. 4. (a) Angle variations as a function of the MD time and (b) the projective x_i - y_i plots for both the (15,15)(10,10) CNT and the $\text{Cu}@(\text{15,15})(\text{10,10})$ CNT oscillators.

Fig. 4(a)와 (b)는 MD 시간함수에 따른 (15,15)(10,10) CNT와 Cu@(15,15)(10,10) CNT 오실레이터에 대한 각도 변화와 투영도 x_i-y_i 좌표를 각각 보여준다. (15,15)(10,10) CNT 오실레이터의 회전은 작은 각도와 주기적인 특징하의 진동을 보여준다. 즉 (10,10) CNT는 바깥쪽 튜브의 접선 위치를 따라서 육각형의 고리에서 그것의 안정을 유지했다. 그러므로 Fig. 4(b)에서 (15,15)(10,10) CNT 오실레이터의 x_i-y_i 좌표는 (10,10) CNT의 회전 동작이 CNT의 육각형의 고리에 상응하는 원주 길이에 한정되었다. 즉 이것은 (10,10) CNT 오실레이터의 회전 동작으로 인한 에너지 손실이 매우 작다는 것을 의미한다. 그러나 Cu@(15,15)(10,10) CNT 오실레이터에 대한 회전 동작의 주기적인 변화는 (10,10) CNT가 캡슐로 들어간 구리 나노와이어에 의해서는 변형되기 때문에 근거로 들 수 없었고 이것은 Fig. 3과 Fig. 4(a)에서의 불규칙한 회전 동작에 근거를 들 수 있었다.

4. 결 론

본 논문은 MD 시뮬레이션을 사용하여 BNNT와 혼합 오실레이터를 연구하였다. BNNT와 BNNT-혼합 오실레이터는 BNNT와 BNNT-혼합 오실레이터의 반데르발스 힘이 CNT 오실레이터의 반데르발스 힘보다 더 크기 때문에 CNT 오실레이터보다 더 높은 주파수를 나타내었다. BNNT-혼합 오실레이터의 감폭 결과는 BNNTs의 마찰영향이 CNTs보다 크기 때문에 CNT 오실레이터보다 더 컸다. 시뮬레이션 결과는 BNNT-기반의 오실레이터가 CNT-기반의 오실레이터보다 더 높은 주파수 장치에 적용되어질 수 있다는 것을 보여주었다.

감사의 글

본 연구는 2005.08 - 2006.07까지 건양대학교 연구년도 지원 (미국 UCSC)에 의해 수행되었습니다.

참고문헌

1. W. Mickelson, S. Aloni, W-Q. Han, J. Hwang, *Physica E* 25, 347, 2004.
2. J. W. Kang and H. J. Hwang, *J. Appl. Phys.* 96, 3900, 2004.
3. Y. Kimoto, H. Mori, T. Mikami, S. Kata, Y. Nakayama, K. Higashi and Y. Hirai, *Jpn. J. Appl. Phys.* 44, 1641, 2005.
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. J. W. Kang, J. H. Lee, H. J. Lee and H. J. Hwang, *Physica E* 25, 347, 2004.
8. S. Bandow, M. Takizawa, K. Hirahara, M. Yudasaka and S. Iijima, *Chem. Phys. Lett.* 337, 48, 2001.
9. D. E. Luzzi and B. W. Smith, *Carbon* 38, 1751, 2000.
10. J. Tersoff, *Phys. Rev. B* 38, 9902, 1988.
11. S. L. Mayom, B. D. Olafson and W. A. Goddard, *J. Phys. Chem.* 94, 8897, 1990.
12. N. G. Chopra and A.Zettl, *Solid State Comm.* 105, 297, 1998.