

## 탄소나노튜브 내 유체유동의 분자동역학 모사

우영석\*·이우일\*\*

### Fluid flow simulation in carbon nano tube using molecular dynamics

Y.S. Woo, and W.I. Lee

#### Abstract

The dynamics of fluid flow through nanomachines is completely different from that of continuum. In this study, molecular dynamics simulations were performed for the flow of helium, neon, argon inside carbon(graphite) nanotubes of several sizes. The fluid was introduced into the nanotube at a given initial velocity according to given temperature. Diffusion coefficients were evaluated by Green-Kubo equation derived from Einstein relationship. The behaviour of the fluid was strongly dependent on the density of fluid and tube diameter, not on the tube length. It was found that the diffusion coefficients increased with decreasing the density of molecules and increasing the diameter and temperature.

**Key Words** : molecular dynamics simulation, Nano, Helium, Neon, Argon, Carbon, Carbon Nano Tube, Lennard-Jones Potential, Ensemble, Green-Kubo equation, Diffusivity

#### 1. 서론

미시적 영역인 나노스케일에서의 유동현상은 근본적으로 거시적 영역의 시스템의 유동현상과 근본적으로 다르게 고려되어야 한다. 예를 들어 수  $\mu\text{m}$ 나 수  $m$ 의 파이프 내의 유동은 연속체 가정과 이론에서 그 현상이 해석되며, 이러한 연속체이론에서는 유체를 구성하고 있는 원자 혹은 분자구조 등이 무시되며, 점도나 밀도, 그외 거시적인 물성치 등에 의해 유동의 해석이 이루어진다. 또한, 흔히 부여되는 벽면과의 경계조건에서는 no-slip condition으로 벽면에서의 유체의 속도는 영(zero)으로 고려되고 있다. 이에 반해, 나노스케일에서의 유동현상은

no-slip condition 등 연속체라는 가정이 부합되지 않는 영역이며, 개개의 분자들의 상호작용(interaction)으로 인해 각각의 분자들의 위치와 속도, 에너지 등이 결정된다. 또한 벽면과의 경계조건에서도 무수한 원자들의 집합체로 벽면이 구성되어 있으므로, 벽면 위의 유동하는 분자들과 벽면에 위치한 원자들과도 많은 상호작용을 하게 되는 등 연속체로 가정될 수 있는 영역과는 근본적으로 많은 차이를 갖고 있다.

수십년 전부터 분자동역학(molecular dynamics : MD) 기법은 분자의 시간 및 공간적 거동과 이를 지배하는 분자사이의 포텐셜(intermolecular potential)이론[1]을 통하여 나노스케일 시스템의 미세 특성 또는 나노공정(nano

\* 서울대학교 기계항공공학부 대학원

\*\* 서울대학교 기계항공공학부

machining process)등을 예측 및 모사하는 이론적인 수단으로 개발 및 응용되고 있다. 이러한 분자동역학이라는 효과적인 방법을 이용하여 분자의 위치와 속도, 에너지로 정의되는 여러 가지 물성치 등을 예측할 수 있는데, 그 중에서도 전달계수에 대한 예측도 가능하여 이에 대한 연구도 발표되었다. 순수한 기상이나 액상에서의 확산 계수는 Einstein의 상관관계에서 유도된 Green-Kubo의 관계식을 이용하여 구할 수 있고[2,3], 전달계수는 모두 시간 상관관계 함수로써 정의된다.

나노스케일에서의 최근 많은 관심과 연구가 이루어지고 있는 소재인 탄소나노튜브(Carbon Nano Tube; CNT)는 탄소로 이루어진 탄소동소체로서 하나의 탄소가 다른 탄소원자와 육각형 벌집무늬로 결합되어 튜브형태를 이루고 있는 물질이다. 탄소나노튜브는 그래파이트면(graphite sheet)이 수 나노에서 수십 나노크기의 직경으로 둥글게 말린 상태이며, 이 그래파이트 면이 말리는 각도 및 형태에 따라서 전기적으로 도체 또는 반도체의 특성을 보인다. 이러한 탄소나노튜브는 우수한 기계적 특성, 전기적 선택성, 뛰어난 전계방출 특성, 고효율의 수소저장매체 특성 등을 지니고 있으며, 특히 다양한 물리적 성질을 가지고 있어서 각종장치의 미세소자 및 재료로의 다양한 응용가능성을 보이고 있다.

이와 같은 탄소나노튜브내에서의 물질의 저장 및 전달 [4]에 대한 연구는 각종 전기소자와 가스센서 등의 개발에 관한 기초연구로 필연적이라고 고려되며, 본 연구에서는 분자동역학을 이용하여 분자의 거동을 해석한 후 Green-Kubo의 전달계수식 중에서 확산계수(diffusion coefficient)를 구하는 식을 이용하여, 탄소로 이루어진 나노튜브내에서 헬륨(Helium), 네온(Neon), 아르곤(Argon)과 같은 기체 원자에 레나드 존스(Lennard-Jones)12-6 포텐셜 함수를 사용[5,6,7]하고 NVT앙상블(ensemble) 알고리즘(N:계의 원자개수, V:계의 부피, T:계의 온도)[5,6]을 이용하여, 기체의 종류별 밀도 변화와 튜브의 길이와 직경의 변화 그리고, 기체의 온도변화 등에 따른 확산계수를 예측하였다.

## 2. 본 론

### 2.1 지배방정식 및 모사조건

본 연구에서는 탄소나노튜브내에서 헬륨, 네온, 아르곤과 같은 단원자 분자에 대한 전산모사를 수행하였고, 이러한 비활성 단원자 분자에 대한 포텐셜 에너지 함수는 보통 레나드 존스12-6 포텐셜 함수[5] (fig. 1)를 사용하는데, 그 형태는 다음과 같다.

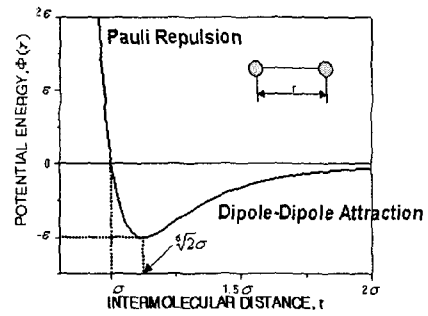


Fig. 1 Lennard-Jones(12-6) potential

$$\Phi(r_{ij}) = 4\epsilon \left\{ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right\} \quad (r_{ij} \leq r_c)$$

$$\Phi(r_{ij}) = 0 \quad (r_{ij} > r_c) \quad (1)$$

여기서,  $\Phi$ 는 포텐셜 함수,  $r_{ij}$ 는 임의의 분자  $i$ 와  $j$ 사이의 거리이고,  $r_c$ 는 임계거리(cut-off radius)를 나타낸다. 어느 정도의 분자간의 거리가 멀어지면 포텐셜 에너지 값은 영(zero)으로 수렴하기 때문에 분자간의 힘을 계산할 때 임계거리까지만 계산을 해도 오차는 크지 않은 것으로 알려져 있다[5].  $\sigma$ 와  $\epsilon$ 값은 각각 포텐셜 함수를 대표하는 거리와 에너지 파라미터로 헬륨과 네온, 그리고 아르곤에 대해 table 1에 다음과 같이 정리하였다[4].

분자간에 작용하는 힘은 식(1)에 나와있는 포텐셜 에

property		value
$\sigma$ [nm]	He-He	0.2633
	Ne-Ne	0.2740
	Ar-Ar	0.3350
	He-C	0.3191
	Ne-C	0.3245
	Ar-C	0.3573
$\epsilon$ [J]	He-Ne	0.2687
	He-He	1.5065e-22
	Ne-Ne	5.00e-22
	Ar-Ar	19.9608e-22
	He-C	2.6747e-22
	Ne-C	4.6174e-22
mass[g/mol]	Ar-C	19.7167e-22
	He-Ne	3.2532e-22
	C	12.0110
	He	4.0026
	Ne	20.1797
	Ar	39.948

Table 1 Properties of He, Ne, Ar molecules

너지 함수를 미분함으로써 아래와 같은 Newton방정식을 이용하여 계산할 수가 있다.

$$F_i = -\sum_{j \neq i}^{N_a} \frac{\partial \Phi(r_{ij})}{\partial r_i} = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2}$$

where,

$$\frac{\partial \Phi(r_{ij})}{r_i} = -24 \frac{\epsilon}{\sigma} \left\{ 2 \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{13} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^7 \right\} \quad (2)$$

여기서  $F_i$ 는 원자  $i$ 가 주변의 다른 분자로부터 받는 힘의 총합이고,  $N_a$ 는 총 원자의 개수이다.

탄소나노튜브의 구조는 다이아몬드와 그래파이트에서처럼 탄소들의 공유결합(covalent bonding)으로 이루어져 있는데, 튜브내에서 탄소들은 약 0.142nm의 간격으로 육각구조를 이루고 있으며, 공유 결합된 탄소의 방향에 따라, 크게 fig. 2에서와 같이 arm-chair구조와 zigzag구조의 형태 등으로 구분되고 있다.

본 연구에서는 초미세 전기소자 등으로의 응용이 예상되는 metallic한 재료인 arm-chair형태의 구조를 고려하여 fig. 3과 fig. 4에서와 같이 원주방향으로는 60, 80, 100개, 축방향으로 50, 75, 100, 125개의 탄소를 위치시켜, 총 3000, 4000, 4500, 5000, 6000, 7500개의 탄소를 구성된 다양한 세 장비(aspect ratio)를 갖는 단일벽(single

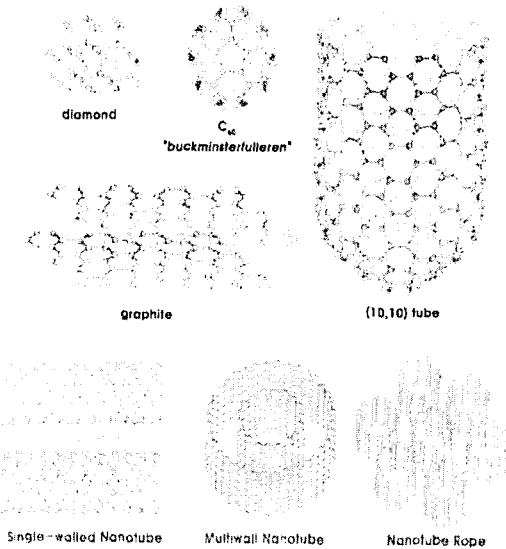


Fig. 2 Various kinds of carbon based materials and carbon nano tube

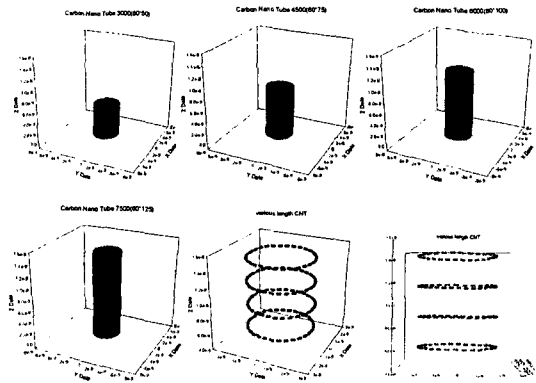


Fig. 3 Various length size of carbon nano tube lattice

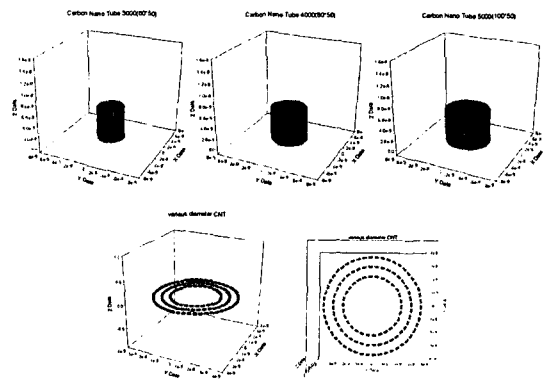


Fig. 4 Various diameter size of carbon nano tube lattice

-walled) 형태의 탄소나노튜브를 형성한 후 그 내부에 기체분자를 흘려보내도록 하였다.

탄소나노튜브내의 탄소끼리의 결합은 공유결합으로 이루어져 있는데 이 결합력은 내부의 유동에 의해 생성되는 압력에 충분히 견딜 만큼 상대적으로 강한 구조를 이루고 있으며, 또한 모사하고자 하는 온도범위에서는 탄소나노튜브의 구조가 안정한 형태를 이루고 있는 영역이므로, 유동현상 등을 관찰하는데는 큰 영향을 미치지 않는 것으로 가정하여, 본 연구에서는 탄소원자간의 결합력과 거동은 해석하지 않았으며, 마치 정지해 있는 원자와 같이 고려(frozen carbon nano tube)하여 내부의 분자들과의 포텐셜에너지에 의한 상호작용은 하위 위치의 변화 등은 없는 것으로 고려하였다.

온도분포는 통계열역학 등에서 정의되는 분자들의 운동에너지를 이용하여 다음과 같이 결정하였다[5].

$$T = \frac{1}{3N_a k_B} \sum_{i=1}^{N_a} m_i v_i^2 \quad (3)$$

여기서  $T$ 는 온도[K],  $k_B$ 는 볼츠만(Boltzmann) 상수 ( $1.380622e-22$ [J/K]),  $m_i$ 와  $v_i$ 는 각각  $i$ 원자의 질량과 속도를 나타낸다.

압력은 계의 부피와 개개의 분자들의 포텐셜 에너지 함수 등의 조합으로 다음과 같이 구할 수 있다[6].

$$P = \frac{N_a k_B T}{V} - \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j>i}^{N_a} \frac{\partial \Phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \cdot r_{ij} \quad (4)$$

여기서  $V$ [m<sup>3</sup>]는 계의 부피를 나타낸다.

또한, 분자동역학을 이용하여 비평형 값인 확산계수를 계산하기 위해서는 다음과 같은 Green-Kubo의 관계식이 이용된다[2,3].

$$D = \frac{1}{3N_a} \int_0^{\infty} \left\{ \sum_{i=1}^{N_a} v_i(t) \cdot v_i(0) \right\} dt \quad (5)$$

여기서,  $D$ [m<sup>2</sup>/s]는 확산계수,  $v_i(t)$ 와  $v_i(0)$ 는 각각  $i$ 분자의 시간  $t$ 에서의 속도와 초기속도이다.

전산모사는 table 2에서처럼 크게 네 종류로 구분하여 수행되었으며, 첫째, 헬륨, 네온, 아르곤 등 다양한 기체에 대한 밀도변화에 따른 탄소나노튜브 내에서의 확산계수 측정(s1), 둘째, 탄소나노튜브의 길이와 직경의 변화에 따른 확산계수의 측정(s2), 셋째, 기체의 온도변화에 따른 탄소나노튜브에서의 확산계수의 측정(s3), 그리고 마지막으로, 서로 다른 이종기체인 헬륨에 대한 네온의 상대적인 밀도변화에 따른 탄소나노튜브 내에서의 확산계수 측정(s4) 등이다.

## 2.2 해석방법

고려하고자 하는 기체분자는 탄소나노튜브 내부에 균일한 분포를 갖도록 임의로 위치시키고, 온도와 속도의 상관관계식을 이용하여 001방향 즉, Z축 방향으로 초기속도를 부여함으로써 모사하고자 하는 온도를 구현하였다. 또한, 탄소나노튜브의 윗단으로 나오는 분자들은 역학적 에너지(kinetic energy)를 보존하면서 다시 아랫단으로 넣어줌으로써, 제한된 길이의 튜브 내에서 지속적인 유동을 할 수 있도록 하였으며, 중력은 무시하였다.

단일 종의 분자에 대해 모사를 시행할 경우에는 튜브에 위치한 탄소와 유동하는 기체분자, 그리고 유동하는 기체 분자끼리의 포텐셜 이론을 차례로 적용하여 거동을 추적하였고, 이종의 분자에 대해 모사를 시행할 경우에는 탄소와 유동하는 기체분자, 유동하는 동종의 기체분자끼리, 그리고 유동하는 이종의 기체분자끼리의 포텐셜을

condition		CNT	molecule	$N_a$	T[K]	
single gas	s1 density	3000(60*50)	He	10 20 30 40	100	
		3000(60*50)	Ne	10 20 30 40	100	
		3000(60*50)	Ar	10 20 30 40	100	
	s2 CNT size	length	3000(60*50)	He	20	100
			4500(60*75)			
	s2 CNT size	diameter	6000(60*100)	He	20	100
7500(60*125)						
s3 temperature	temperature	3000(60*50)	He	20	100 150 200 250	
					3000(60*50)	He(20) & Ne
binary gas	s4 density	30(60*50)	He(20) & Ne	10(Ne) 20(Ne) 30(Ne)	50	

□ : variation

Table 2 Simulation conditions

분자종류별로 각각 적용하여 모사를 수행하였다. 여기서 온도조건에 해당하는 속도성분을 확산계수를 측정하고자 하는 종류의 기체분자는 Z축 방향으로, 다른 종류의 기체분자는 임의의 방향으로 부여하였다.

이와 같은 전산모사의 경우 정확한 거동의 추적을 위해서는 많은 연산량을 필요로 하는데, 본 연구에선 효율적인 계산시간을 위하여 비교적 분자의 거동과 분포를 효과적으로 예측할 수 있는 임계거리로 알려진 값인, 2.5  $\sigma$ 로  $r_c$ 값을 채택하여 임계거리내부에 위치한 분자들끼리만 포텐셜 이론을 적용하여 분자간에 작용하는 힘을 계산하였다.

모사를 하는 도중에 시스템 내에서 시간이 지남에 따라 운동량은 보존이 되어야 하기 때문에, 속도가 계속해서 보정이 되어야 하고, 속도를 보정하기 위해 여러 가지 알고리즘이 사용되지만, 본 연구에서는 분자의 개수, 부피, 온도를 일정하게 유지시키는 NVT양상을 알고리즘[5,6]을 사용하였고 다음과 같다.

$$\lambda = \sqrt{\frac{3k_B T_0}{m \cdot v_i^2}}$$

$$v_i^{new} = v_i^{old} \cdot \lambda \quad (6)$$

여기서,  $\lambda$ 는 속도 보정계수(velocity scaling factor)이다.

그리고, 거리의 함수인 포텐셜 에너지의 미분값으로 구해진 분자간의 힘으로부터 개개의 분자들의 가속도와 위치 등이 구해지는데 이를 구하기 위한 수치해석 적분 방법으로는 predict-correct의 대표적인 방법인 Runge Kutta 2<sup>nd</sup> order의 방법을 이용하여 수행하였다.

연산시간에 대해서는 time step을 0.625fs(femto sec :  $10^{-15}$ sec)으로 채택하여, 헬륨과 같이 네온과 아르곤에 비해 상대적으로 질량이 작은 분자의 빠른 운동에도 정확한 위치를 추적할 수 있도록 하였고, 연산종료시간은 여러 모사조건에서 확산계수의 값이 비교적 일정한 값으로 수렴하는 것으로 보이는 1.2ns까지 192만 step을 수행하였다.

### 3. 결과 및 고찰

온도와 압력은 앞서 기술한 NVT앙상블에 의해 fig. 5

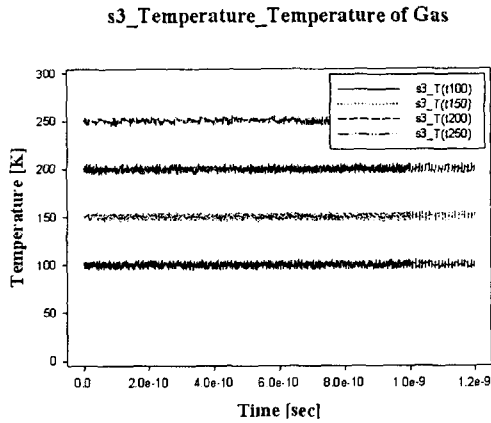


Fig. 5 Temperature of gas according to NVT ensemble

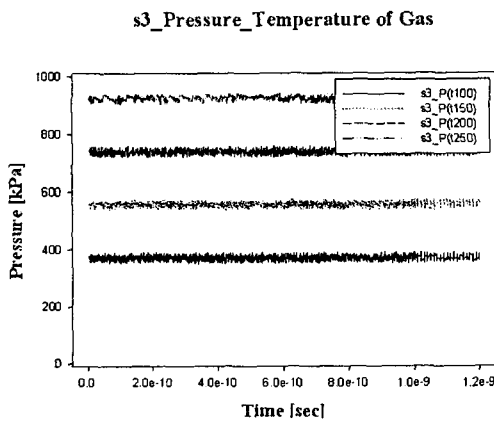


Fig. 6 Pressure of gas according to NVT ensemble

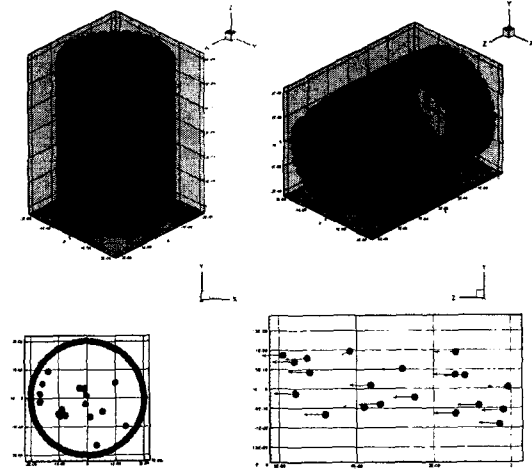


Fig. 7 Simulation of single gas flow in carbon nano tube and velocity vector at 3.59ps

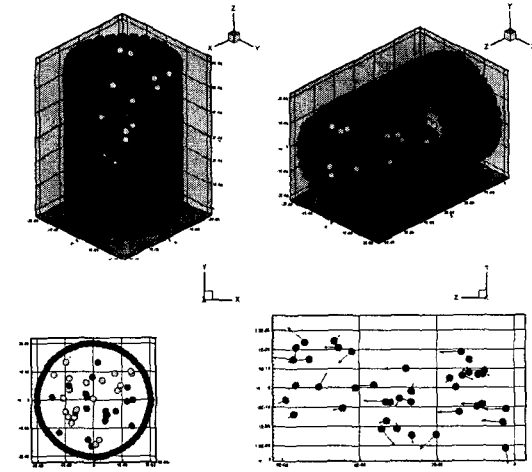


Fig. 8 Simulation of binary gas flow in carbon nano tube and velocity vector at 3.59ps

와 fig. 6에서와 같이 일정한 범위 내에서 초기조건을 유지하는 것을 볼 수 있다.

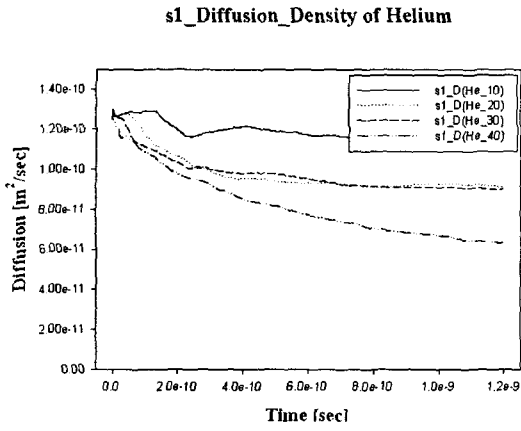
Fig. 7과 fig. 8에서는 각각 단일종기체와 이종기체의 탄소나노튜브 속에서 유동과 약 3.59ps(pico sec :  $10^{-12}$ sec)에서의 속도성분(velocity vector)을 화살표로 나타내었다.

#### 3.1 다양한 기체분자의 밀도변화(s1)

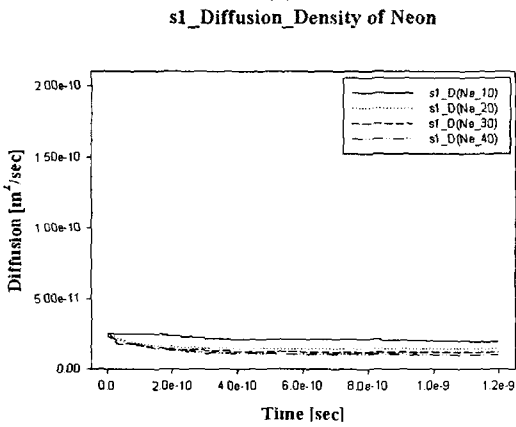
Fig. 9에서와 같이 헬륨(a), 네온(b), 아르곤(c) 순으로 기체의 원자번호가 증가하여 비중이 크고, 원자 반지름이 큰 기체분자일수록 확산이 둔화되는 것을 알 수 있으며, 또한 각각의 분자별로는 분자의 개수가 증가할수록 확산이 둔화되는 것을 관찰할 수 있었다.

분자의 개수가 증가할수록 즉, 밀도가 커지면 제한된

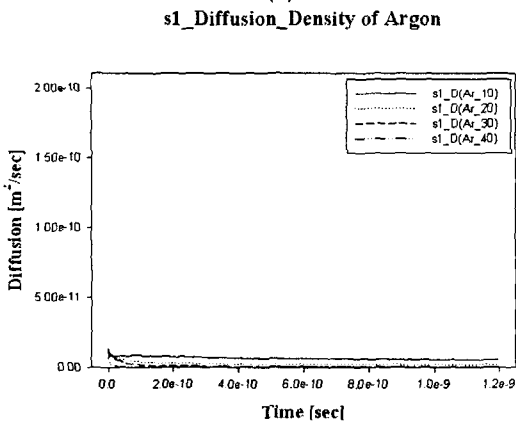
탄소나노튜브의 공간 속에서 충돌빈도가 증가함에 따라 분자의 운동은 밀도가 작을 때보다 더 큰 제약을 받게되므로 결국 확산계수는 줄어들게 된다.



(a)



(b)



(c)

Fig. 9 diffusion coefficient according to density of gas

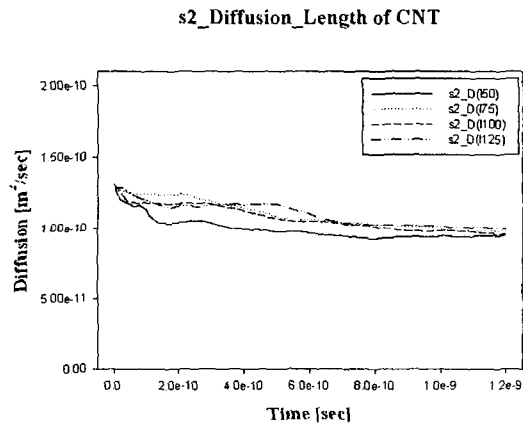
### 3.2 탄소나노튜브의 길이와 직경의 변화(s2)

Fig. 10에서와 같이 탄소나노튜브의 길이의 변화에 대해서는 확산계수의 큰 차이가 나타나지 않았으며, 직경의 변화에 따라서는 직경이 커질수록 확산이 잘 이루어지는 것으로 나타났다.

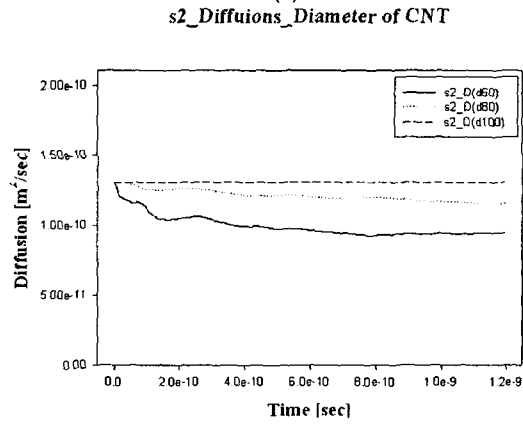
튜브의 길이의 변화에 따라서는 연산시간의 효율성을 위해 상대적으로 짧은 길이의 튜브(3000=60×50)를 고려한 모사조건에서 구한 확산계수의 값이 일정시간(약 1ns)이 흐른 후의 긴 튜브관에서의 확산계수와 큰 차이가 없음을 알 수 있다. 또한 직경의 변화는 튜브내의 기체분자의 상대적 밀도차를 가져오므로 앞서 기술한 3.1에서의 결과에서처럼 기체분자들의 충돌빈도에 영향을 주는 것으로 보여진다.

### 3.3 기체분자의 온도변화(s3)

기체분자의 온도의 변화에 따라서는 fig. 11에서와 같이



(a)



(b)

Fig. 10 diffusion coefficient according to length & diameter of carbon nano tube

s3\_Diffusion\_Temperature of Gas

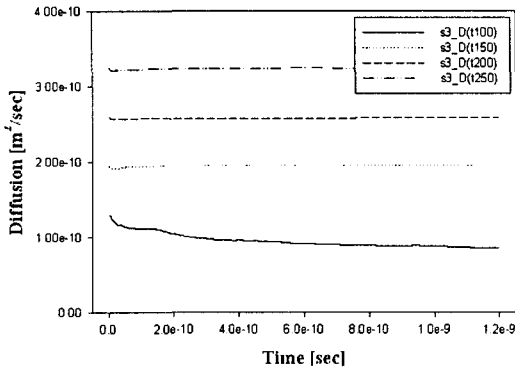


Fig. 11 diffusion coefficient according to temperature of gas

온도의 증가에 따라 확산계수의 값이 증가하는 것을 볼 수 있는데, 이는 온도의 증가에 따른 기체분자의 속도의 증가, 즉 운동이 활발해져 확산이 잘되는 것으로 해석된다.

### 3.4 이중기체분자의 상대적 밀도변화(s4)

헬륨과 네온의 이중기체를 탄소나노튜브에 넣고 헬륨의 분자개수를 일정하게 고정한 후 네온의 분자개수를 증가시키기에 따라, 헬륨의 확산계수의 값은 급격히 감소하는 것으로 나타났다(fig. 12). 이는, 같은 온도조건으로 두 종의 기체분자에 대해 초기조건을 부여하였지만, 임의의 방향으로 움직이는 네온이 Z축 방향으로 운동하는 헬륨의 운동을 방해한 것이며, 이에 따라 네온의 기체분자 개수가 증가할수록 헬륨의 확산은 반비례하는 것으로 나타났다.

단일기체 및 혼합기체 등에서의 확산계수는 Fuller등

s4\_Diffusion\_Density of Binary Gas

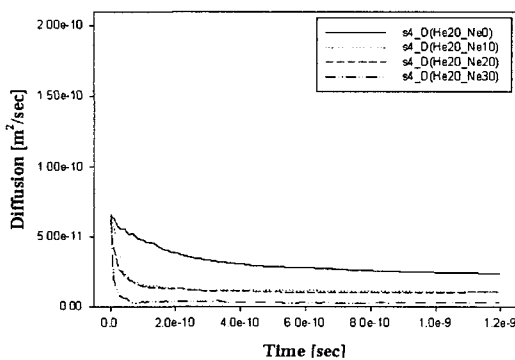


Fig. 12 diffusion coefficient according to temperature of gas

[8,9]이 제안한 다음의 식에서 이론적으로 구할 수 있다.

$$D_{12} = \frac{0.1013T^{1.75} \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^{0.5}}{P \left[ \left( \sum v_{d1} \right)^{\frac{1}{3}} + \left( \sum v_{d2} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^2} \quad (7)$$

여기서, D는 확산계수[m<sup>2</sup>/s], T는 온도[K], M은 분자량[g/mol], P는 압력[pa]을 나타내며, v<sub>d</sub>는 원자 확산 부피(atomic diffusion volume)로써, 헬륨, 네온, 아르곤에 대해 각각 2.88, 9.45, 16.1이란 값을 갖는다.

식(7)에서 구한 값과 전산모사를 통해 평형을 이룬 후에 구한 값을 비교하여보면(table 3), 정성적으로는 같은 경향을 관찰할 수 있으나, 정량적으로는 그 값의 차이가 매우 큰 것을 알 수 있다. 이는 실제 이론적인 확산계수의 값이 제한된 부피를 갖고 있는 시스템에서의 값이 아니라 경계조건이 고려되지 않는 상황에서 구해지는 값이기 때문이며, 본 연구에서처럼 탄소나노튜브라는 제한된 벽면조건을 추가적으로 갖고 있는 상황에서 구해지는 확산계수의 값과는 많은 차이를 나타낼 것으로 생각된다. 벽면조건의 영향을 보여주는 fig. 13과 같이 실제 탄소나

simulation condition			simulation result D[m <sup>2</sup> /s] *e10	calculated from Eq(7) D[m <sup>2</sup> /s] *e4
single gas	s1 density	He 10	1.3011	4.2392
		He 20	0.9421	2.1445
		He 30	0.9067	1.4276
		He 40	0.6474	1.0695
		Ne 10	0.1974	0.8663
		Ne 20	0.1424	0.4325
		Ne 30	0.1166	0.2881
		Ne 40	0.1003	0.2162
		Ar 10	0.0572	0.4304
		Ar 20	0.0215	0.2151
		Ar 30	0.0056	0.1432
		Ar 40	0.0046	0.1039
s2 CNT size	length	3000(60*50)	0.9421	2.1445
		4500(60*75)	0.9839	3.3981
		6000(60*100)	0.9701	4.5301
		7500(60*125)	1.0059	5.6992
	diameter	3000(60*50)	0.9421	2.1464
		4000(80*50)	1.1617	3.8188
5000(100*50)		1.3037	5.9362	
s3 temperature	100K	0.8651	2.1464	
	150K	1.9521	2.8928	
	200K	2.5811	3.6032	
	250K	3.2432	4.2505	
binary gas	s4 density	He20	0.2416	0.2635
		He20 & Ne10	0.1082	0.1509
		He20 & Ne20	0.1023	0.1131
		He20 & Ne30	0.0321	0.0895

Table 3 Comparison of diffusion coefficient

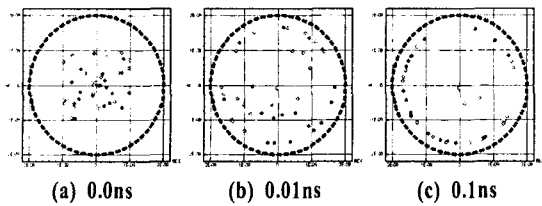


Fig. 13 location of binary gas in z-direction at each time

노튜브에서의 기체의 유동은 내부의 기체인 헬륨(또는, 네온, 아르곤)과 튜브벽면에 위치한 탄소간의 포텐셜 에너지의 영향으로 분자간에 힘이 평형을 이루고 있는 위치에 유동하는 기체가 탄소와의 인력에 의해 끌려오게 된다. 이와 같은 현상은 시간이 지남에 따라 증가하여, 점차 대부분의 유동하는 기체분자가 튜브의 벽면 안쪽으로 끌려오게 되며, 마치 튜브의 단면에서 볼 때 원형의 띠를 이루는 형태로 유동이 진행을 하게 된다. 이와 같이 유동하는 기체분자와 탄소원자간의 인력은 유동에 저항처럼 작용하여 벽면효과가 고려되지 않는 일반적인 확산계수의 측정 또는 계산된 값과 비교하였을 때와는 그 값이 많이 줄어드는 차이를 보이게 되는 것으로 생각된다.

#### 4. 결론

본 연구에서는 분자 동역학(molecular dynamics) 및 Einstein의 상관관계에서 유도된 Green-Kubo식을 이용하여 탄소나노튜브에서의 유체유동에 대한 확산계수를 예측하였고, 그 결과는 다음과 같다.

- (1) 탄소나노튜브 내에서의 유동하는 기체분자는 기체의 원자번호가 증가할수록, 즉 분자량이 증가하여 비중이 크고 원자반지름이 큰 기체일수록 확산이 둔화되는 것을 알 수 있었으며, 동일 기체의 경우에도 분자의 개수가 증가할수록 확산이 둔화됨을 알 수 있었다.
- (2) 탄소나노튜브의 길이의 변화에 따라서는 유동하는 기체분자의 확산계수가 큰 차이를 나타내지 않으며, 직경의 변화에 따라서는 직경이 커질수록 확산이 잘 이루어지는 것으로 나타났다.
- (3) 유동하는 기체분자의 온도가 상승할수록 확산계수는 증가하는 경향을 보였다.
- (4) 헬륨과 네온의 이종기체를 탄소나노튜브에 넣고

헬륨의 확산계수를 측정하여 본 결과, 일정한 헬륨의 분자개수의 조건에서 네온의 상대적 분자개수가 증가함에 따라 감소하는 경향을 나타내었다.

#### 후 기

본 논문은 과학기술부 21세기프론티어연구개발사업의 나노메카트로닉스기술개발(M102KN010001-02K1401-01220)에 의해 수행되었으며, 이에 관계자 여러분들께 감사드립니다.

#### 참 고 문 헌

- (1) Gawajoye Yosiyuki, Molecular dynamics and Monte Carlo computing simulation, chap2, 1996
- (2) David M. Heyes, 1988, "Transport coefficients of Lennard-Jones Fluids : A molecular-dynamics and effective-hand-sphere treatment", physical Review B, Vol.37, No.10, pp.5677-5699
- (3) K.Y. Kim and J.S.Lee, Estimation of diffusion coefficient at the interface between liquid and vapor phases using the equilibrium molecular dynamics simulation, M. Eng- Thesis, Seoul National University, Dept. of Mech. Eng., 2003
- (4) Robert E Tuzun, Donald W Noid, Bobby G Sumpter and Ralph C Merkle, 1996, "Dynamics of fluid flow inside carbon nanotubes", nanotechnology, Vol. 7, pp241-246.
- (5) D.C. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation, Cambridge university press., chap2, 1995
- (6) V. Vitek, Atomistic modeling of structures and properties of Materials, Pennsylvania university, 2003
- (7) J.M. Haile, Molecular dynamics simulation, A Wiley interscience publication., chap5, 1997
- (8) Robert H. Perry, Perry's chemical engineers' handbook 7th edit, McGraw-Hill, chap2, 1997
- (9) Fuller, E. N., P. D. Shettler, and J. C. Giddings, Ind. Eng. Chem, 58(1966): 19.