탄소 나노튜브의 나노 모터 응용 해석

이준하*

*상명대학교 컴퓨터시스템공학과

초록

We investigated the fluidic gas-driven carbon-nanotube motor based on multi-wall carbon nanotubes and fluidic gas flow. Since the origination of the torque was the friction between the carbon nanotube surface and the fluidic gases, the density and the flow rate of the working gas or liquid were very important for the carbon nanotube motor. Molecular simulation results showed that multi-wall carbon nanotubes with very low rotating energy barriers could be effectively used for fluidic gas-driven carbon-nanotube motors.

1. 서론

나노공학의 급속적인 발달과 함께, 나노미터 단위의 전기적-기계적 장치를 구현할 가능성은 현실로 다가오고 있다. 나노공학을 이용한 기계류의 중요한 요소는 제어적인 방법으로 구성요소들의 동작을 구동하여야 하는 것이다. 근래 들어 나노공학 연구는 수치해석의 결과들로 더욱 발전하였고 미래 실현 가능한 기술로서 각광받게 되었다 [1,2]. 많은 연구로 분자동력학(Molecular Dynamics : 이하 MD)의 광범위한 사용이 나노디바이스의 특성에 관한 연구에도 기여하였으며 특히, 나노스케일 기계들의 구성요소의 실행을 예측하는데 유용하였다[3,4]. 다이아몬드, 나노튜브 및 풀러렌과 같은 탄소 구조체들은 나노머신의 실현(fullerene nona ball bearings, nanotube needle bearings, nanotube gears, nanotube drills, nanotube motors, nanotube oscillators, nanotube pipettes, nanotube nozzles, etc)을 위한 유용한 재료로 고려되고 있다. Drexler 는 다이아몬드형, 흑연 같은 다양한 분자형태를 제안했다 [5]. Merkle 은 분자형태의 대칭속성을 발표했다. Tuzun 등은 여러 흑연모델이나 나노튜브형태를 위한 MD 시뮬레이션을 보고했다 [6]. Han 과 공동저자들은 벤자인 반응을 통해 톱니가 더하여진 탄소나노튜브(이하 CNT)로부터 만들어진 분자 기어의 특성을 조사하는데 MD 시뮬레이션을 사용했다 [7]. Srivastava 는 CNT 에 기반하는 나노모터를 논의하고 검사하기 위해 MD 시뮬레이션을 사용했다 [8]. Cagin 등은 분자기계와 MD 분석기를 사용하여 Drexler 와 Merkle 이 제안한 구조와 네온펌프의 최적화를 조사하였다 [9]. Srivastaba 와 Tuzun 등은 MD 시뮬레이션을 사용하여 레이저방식의 CNT 모터를 조사하였다 [10]. Tu 와 Ou-Yang 은 온도 변화에 의해 구동되는 이중벽으로된 CNT 로부터 구성된 분자 모터를 조사했다 [11]. 이 논문에서는 고전적인 MD 시뮬레이션을 사용하여 fluidic gas 로 구동되는 CNT 모터의 응용을 분석한다.

2. 해석 방법

탄소를 위해, 본 연구에서는 탄소 시스템에 일반적으로 적용되어지는 Terso-Brenner 전위함수를 사용했다. Long-range 상호작용은 Lennard-Jones 12-6(LJ12-6)전위와 함께 묘사되었다. 그래서 그 시스템의 계산을 사용한 결합된 표현은 식(1)과 같다.

$$E_b = E_{Tersoff-Brenner} + E_{vdW} \tag{1}$$

여기서 $E_{Tersoff-Brenner}$ 와 E_{vdW} 는 각각 Tersoff-Brenner 전위함수로부터 얻어진 공유결합 에너지와 LJ12-6 전위함수로부터 얻어진 van der Waals 에너지 이다. $_{vdW}$ 는 Tersoff-Brenner 전위가 0 이 된 후 0 이 아닌 값으로, 식(2)와 같은 Mao 의 파라미터 값을 이용하였다.

$$E_{vdW} = \begin{cases} 0.0 : r_{ij} < R_S \\ c_{3,k}(r_{ij}-r_k)^3 + c_{2,k}(r_{ij}-r_k)^2 : R_S \le r_{ij} < R_M \\ 4\varepsilon[(\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6) : R_M \le r_{ij} < R_B \end{cases} \tag{2}$$

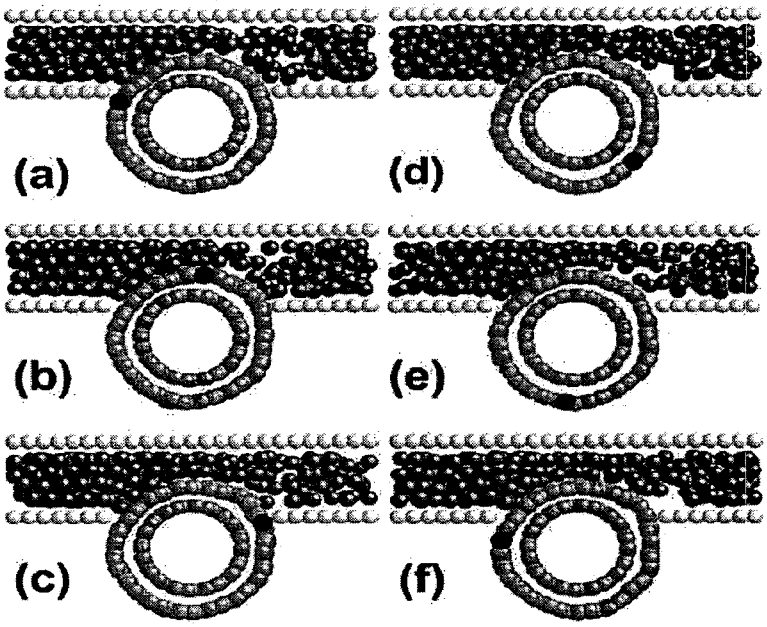

그림 1. MD time 가스 흐름속도가 20Å/ps 일때의 사진. (a)부터 (f)까지 각각 5,55,105,155,205,255ps.

그림 1 은 fluidic-gas driven CNT 모터의 MD 시뮬레이션 결과를 보여준다. 헬륨가스는 나노스케일과 그 두배되는(10,10)-(15,15) 경로를 통해 흐른다. 그림 1 에 나타나는 것과 같이 CNT 는 나노스케일 경로의 쪼개진 틈에서 부분적으로 끼워 넣어진다. 주기적인 경계 조건은 튜브의 축(z-axis)과 나노스케일의 경로에서의 가스 흐름 방향(x-axis)에 따라 적용된다. 나노스케일의 높이는 13Å 이고, 가스는 오른쪽으로 흐른다. 헬륨의 밀도는 2.8 1032/cm3 이다. 처음의 구조는 SD 시뮬레이션을 사용하여 최적화되었는데 안쪽(10,10)CNT 는 x 였고 가스 흐름 속도는 20 50Å/ps 였다. 가스가 나노스케일의 노즐을 통과했을 때 가스 흐름속도는 증가될 수 있었다. 그림 1 은 다양한 MD 시간 동안의 스냅사진을 보여준다. 그리고 그 가스 흐름 속도(vgas)가 20Å/ps 이었을 때 바깥(15,15)의 CNT 의 회전하는 주기는 거의 250ps 였다.

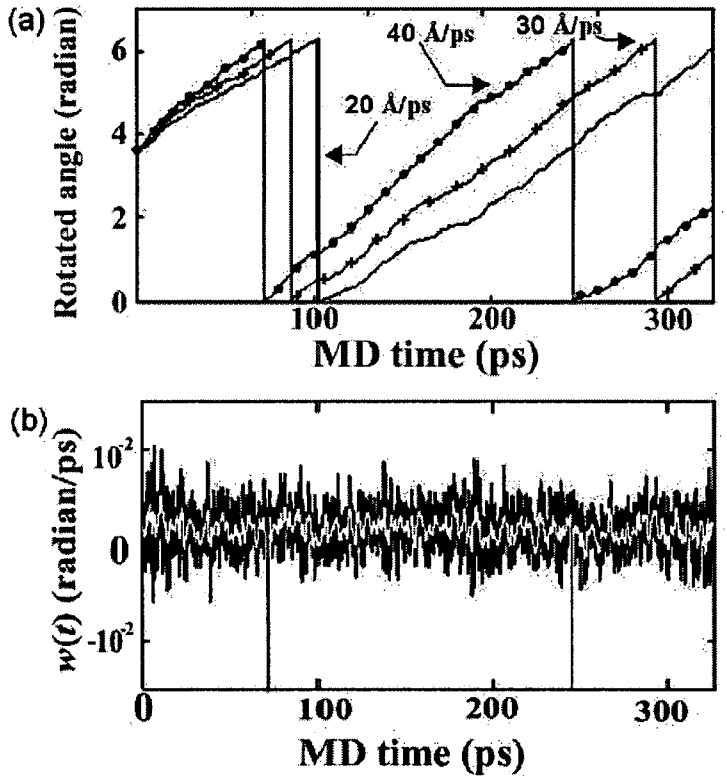

그림 2. (a)다양한 가스 흐름 속도를 가진 MD 시간 함수와 같은 바깥 CNT 에 있는 한 원자의 각도 변화. 각각의 최대치가 라디안을 나타내므로, CNT 모터가 회전함을 알 수 있다. (b)가스 흐름 속도를 위한 MD 시간 함수의 CNT 각속도는 40Å/ps 이다.

그림 2(a)는 MD 시간의 함수로서 바깥의 CNT 위에 한 원자(그림 1 의 검은부분)의 각도 변화를 보여준다. 각각의 최대치가 라디안을 나타내므로, CNT 모터가 회전함을 알 수 있다. 따라서 CNT 모터의 회전운동을 MD 시간 증가로서 빠르게 할 수 있다. 가스 흐름 속도가 증가함에 따라 각속도 또한 증가한다. vgas = 20,30,그리고 40Å/ps 일때의 CNT 모터의 각속도는 각각 0.026, 0.030,그리고 0.037 radian/ps 이다. 그 회전력의 기원은 CNT 표면과 가스 흐름 사이의 마찰력이다. 그러므로 종류, 밀도, 움직이는 가스나 액체의 흐름비율은 fluidic gas-driven CNT 모터를 위해 매우 중요하다. 그림 2(b)는 가스 흐름속도가 40Å/ps 일때 MD 시간 함수의 CNT

각속도를 보여준다. 흰선은 운용중의 평균값이다. 그림 2(a)에서 나타난 것과 같이 CNT 모터의 각속도가 변동할지라도, 평균 각속도는 양수이다. 그림 2(b)의 두 개의 최고점은 원자의 각도가 2radian 일때 나타난다. CNT 모터의 속력은 fluidic 흐름의 속력을 사용함으로서 제어할 수 있다. CNT 모터의 최대속도가 fluidic 흐름의 속력을 초과할 수 없으므로, CNT 모터의 필수 속력은 fluidic 흐름 속도의 제어에 의해 빨라질 수 있다. CNT 모터가 높은 각속도로 회전할 때, CNT 모터의 속력은 낮은 각속도와 일치하는 속력으로 감소된 fluidic 흐름 속력과 같은 낮은 각속도로 점차로 감소될 수 있다. 외부 차단 또한 CNT 모터의 속도를 줄이는데 이용될 수 있다. 전통적인 엔진과 마찬가지로, CNT 모터가 다양한 기어를 가지고 연결될 수 있을 때, 그 내장된 시스템의 속력은 또한 기어 이의 수에 의해 관리될 수 있다. 그림 2 의 결과로부터, fluidic gas-driven CNT 모터 동작의 wall-wall 상호작용에서 기원하는 CNT 모터의 회전하는 에너지로 고려할 수 있다.

3. 결론

본 연구에서는 가스 흐름에 의해 관리된 탄소나노튜브 모터를 조사하기 위해 고전적인 분자의 동력 시뮬레이션을 이용했다. fluidic gas-driven 탄소나노튜브 모터에 대해, 그 비트는 힘의 기원은 탄소나노튜브 표면과 그 가스 흐름 사이의 마찰이었다. 종류,밀도,동작하는 가스나 액체의 흐름 비율은 탄소나노튜브 모터의 작동에 매우 중요하다. 매우 낮은 회전 에너지 장벽이나 매우 낮은 회전 한계힘을 가진 multi-wall 탄소나노튜브가 탄소나노튜브모터에 이용됐을 때, fluidic gas-driven 탄소나노튜브 모터는 가스 흐름 비율을 사용함으로서 효과적으로 동작되고 관리될 수 있다.

참고문헌

[1] K. E. Drexler, Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing and Computation, Wiley, New York, 1992.

[2] R. P. Feynman, Eng. Sci. 23, 22 (1960); R. P. Feynman, J. Microelectromech. Syst. 1, 60, 1992.

[3] B. C. Crandall and J. Lewis, Nanotechnology: Research and Perspectives, MIT Press, Cambridge, MA 1992.

[4] J. W. Kang and H. J. Hwang, Nanotechnology 15, 614, 2004.

[5] S. B. Legoas, R. Giro and D. S. Galv~ao, Chem. Phys. Lett. 386, 425. 2004.

[6] S. Zhang, W. K. Liu and R. S. Ruo, Nano Lett. 4, 293, 2004.

[7] J. Han, A. Globus, R. Jae and G. Deardor, Nanotechnology 8, 95, 1997.

[8] D. Srivastava, Nanotechnology 8, 186, 1997.

[9] W. V. Belikov, Yu. E. Lozovik, A. G. Nikolaev and A. M. Popov, Chem. Phys. Lett. 385, 72, 2004.

[10] Yu. E. Lozovik, A. V. Minogin and A. M. Popov, Phys. Lett. A 313, 112, 2003.

[11] Z. C. Tu and Z. C. Ou-Yang, J. Phys.: Condens. Matter 16, 1287, 2004.