

# 임베디드 시스템을 위한 탄소나노튜브 오실레이터의 특성 해석

이준하\*, 양승원\*\*

\*상명대학교 컴퓨터시스템공학과,

\*\*상명대학교 나노시스템연구센터

e-mail: junha@smu.ac.kr

## Characteristics of Carbon Nanotube Oscillator for Embedded System

Jun-Ha Lee\*, Seung-Won Yang\*\*

\*Dept. of Computer System Engineering, Sangmyung University

\*\*NanoSystems Research Center, Sangmyung University

### 요 약

탄소 나노 튜브(CNT)들로 구성된 다중벽 탄소 나노튜브 진동은 분자사이의 역학적인 시뮬레이션에 의해 조사되었다. 그 결과는, 벽간의 결합이 주파수 분할을 이끌고 세개의 주파수 제너레이터로써의 2차 함수 벽, 5차 벽, 6차벽으로 된 오실레이터와 직경으로부터 독립적인 적합성 제안을 위해 지속적인 세개의 정점이 있다는것을 보여준다. 더욱이 적어도 MWCNT 진동의 초기의 주파수중 하나는 이중벽 진동의 초기주파수보다 낮다.

### 1. 서 론

탄소 나노튜브(CNTs)에 기반을 둔 나노 전자 화학적 장치는 정밀 공학, 전자 장치, 의학 등 과 같은 다양한 어플리케이션을 위해 검토되어왔다. 다중벽 탄소 나노튜브(MWCNTs)는 관념적인 낮은 마찰과 낮은 사용태도[1] 로써 연구되어 왔지만 CNT 기반의 기가 헤르츠 오실레이터는 집중적으로 연구 되어왔다. CNT 오실레이터의 진동동작은 정밀한 기계적 컨트롤러나, 혹은 전자기적 영역, 레이저, 그리고 전자기적인 힘과 멀리 떨어져서 컨트롤 되어질 수 있다. 또한, CNT를 기반으로 한 기가 헤르츠오실레이터는 나노스케일 센서나 작동장치, 공진기, 급수기, 자동차 엔진, 필터, 메모리, 그리고 스위칭 장치에 적용할 수 있다.

이중벽 CNT (DWCNT) 오실레이터는 분자역학(MD) 시뮬레이션을 이용해서 집중적으로 연구 되어왔다 [2-9]. MWCNT 오실레이터에 대한 벽 사이의 결합이 CNT를 기반으로 한 오실레이터의 진동동작에 영향을 준다는 것은 확실하다. Core CNT가

MWCNT로부터 밀려날 때 제 2의 가장 깊숙한 CNT는 일반적으로 초과 반데르발스 힘에 의해 바깥쪽으로 밀려난다. 즉, 제 2의 가장 안쪽의 CNT가 밀려날 때, 제 3의 가장 안쪽의 CNT는 과잉 반데르 발스 힘에 의해 바깥쪽으로 잡아 당겨지는 것이다. 이와 같은 연속적 과정으로 인해 모든 MWCNT의 벽들은 진동한다. DWCNT 진동주파수는 주파수분할로 부터 인한 interwall 때문에 계산하고 있는 MWCNT의 진동 주파수가 다른 진술을 유도한 것에 비해서 간단한 방정식에 의해 계산되어졌다. MWCNT 오실레이터의 진동주파수에 영향을 미친 interwall 결합의 역학적 방법의 세부적인 시험을 위해서 2 에서부터 6 까지 n 정렬된 (5n,5n) CNTs 로 구성된 MWCNT 오실레이터의 결합된 진동의 전형적인 MD 시뮬레이션을 이용한 결과를 소개한다.

### 2. 본 론

탄소와 탄소사이의 상호작용을 위해 본 연구에서는 탄소조직 안에 넓게 적용되어져 온 Tersoff-Brenner

전위함수를 사용했다. 탄소의 세로 범위 상호작용은 Mae 등으로부터 얻어진 매개변수인 Lennard-Jones 12-6 (LJ 12-6)를 가지고 특성을 기술했다. 이 연구에서 LJ 12-6 전위에 대한 매개변수는 각각  $\epsilon_{\text{carbon}}=0.0042 \text{ eV}$  이고  $\sigma_{\text{carbon}} = 3.37 \text{ \AA}$ 이다. LJ 12-6 전위의 잘라낸 거리는  $10\text{\AA}$ 이다[10]. 사용했던 MD 시간 단계( $\Delta t$ )는  $5 \times 10^{-4} \text{ ps}$  였다. 모든 MD 시뮬레이션을 수행하는 동안 MD 시뮬레이션의 온도는  $1\text{K}$ 로 고정되었고 모든 에너지는 일정했다. 결합효과로 인한 주파수 분할을 연구하기 위해서, 원자의 배열은 에너지 소실을 피하기 위한 유일한 이행적 방침인  $z$ -axis로 구했다. 이 연구는 열에 의한 에너지 분산과 MWCNTs의 벽간 반데르발스 힘으로 인해 영향을 받는 주파수를 분석하기 위한 interwall 에너지 교환은 포함하지 않는다.

3nm 길이의 (5n,5n) CNTs 로 구성된 MWCNT를 사용하였으며, 벽들의 갯수는 2개에서부터 6개 까지였다. CNT 오실레이터가 구현되었을 때 외부의 CNT는 고정되거나 진동동작을 얻기 위해 다른 물질들과 연결 되어야 한다. 그러므로 모든 MD 시뮬레이션의 외부 CNT에 대한 질량 중심은 모든 MD steps 로부터 위치 조정 체계를 사용해서 일정하게 유지되었다. core CNT는 초기 이행적 속도( $v_0$ ),  $100\text{m/s}$  로부터 시작 되었고 진동 주파수( $f$ )는 fast Fourier transform (FFT)에 의해 해석되었다.

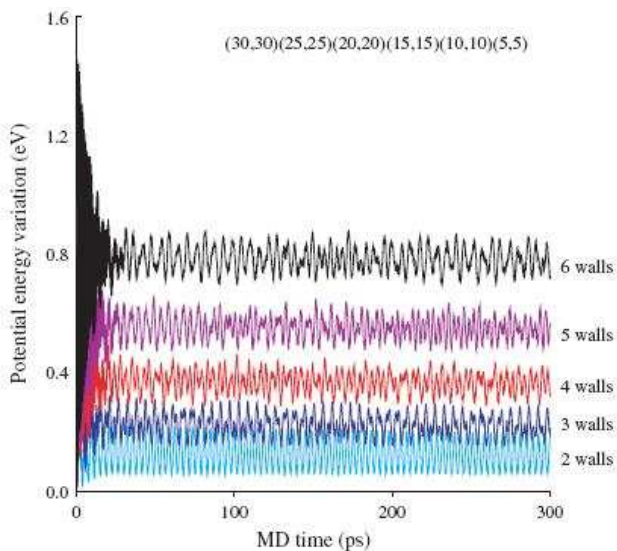


그림 1. 다양한 벽 갯수에 대한 MDtime의 함수로서의 MWCNT 오실레이터의 반데르발스 힘의 변화. core(5,5) CNT는 해석적 속도인  $100\text{m/s}$ 에서 시작되었다.

MWCNT 오실레이터의 반데르발스 에너지 변화는 그림 1에 나타난 것처럼 core(5,5) CNT에 대한 MD time의 함수로써 표시 되었다. MWCNT 오실레이터는  $30\text{ps}$  이후에 안정된다고 알려진다. DWCNT 오실레이터는 그림 1에서와 같이 2개의 벽에 의해 표시 되어진 반데르발스 에너지 변화로부터 약간 진동이 발견 되었다. DWCNT 오실레이터에 대한 반데르발스 에너지의 편차는 그림 3에서와 같이 3개의 벽에 대한 한쌍의 조화 진동으로 표시된것으로 생각된다. 벽 갯수의 증가에 따라, 반데르발스 에너지 변화는 벽간의 힘으로 인한 결합 작용으로인해 더 복잡해진다.

어떤 연구[3,4,8]는 벽의 갯수의 증가에 대한 MWCNT 오실레이터의 운용 주파수의 증가는 더 많은 벽들에 의한 것이고, 더 큰 복구 반데르발스 힘은 core wall 에서 활동한다는 것을 보여 주었다. 이 시뮬레이션에서 core wall을 제외한 모든 벽들은 고정되었다고 가정했고, 자연적 벽간 결합에 대한 연구는 이전에 가정된 상태 하에서 허용되지 않은 성취하기 위한 물리적 환경에서의 또 하나의 과제이다.

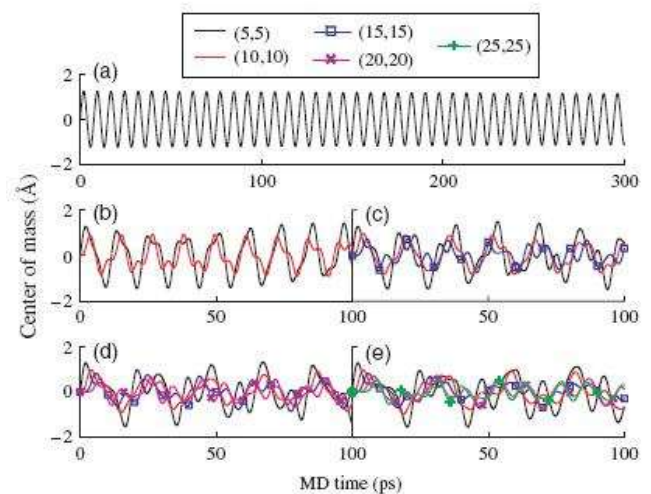


그림 2. MD time의 함수로써의 core(5,5) CNT에 대한 벽의 질량 중심 곡선. 이중(a), 삼중(b), 4중(c), 5중(d), 6중(e) 벽 CNT 오실레이터에 대한 MDtime의 함수로써의 각각 벽의 질량 중심.

그림 2(a-e)는 이중벽, 3중 벽, 4중 벽, 5중 벽, 그리고 6중벽 CNT 오실레이터에 대한 각각의 MD time 함수로써의 질량 중심을 보여준다. core(5,5) CNT가 MWCNT로부터 밀려났을 때, 반데르발스 힘으로부터 바깥으로 밀려난 (10,10) CNT는

(10,10)CNT에 영향을 준다. 즉, (10,10) CNT가 MWCNT로부터 밀려날때 반데르발스 힘으로부터 바깥으로 이동되어진 (15,15) CNT는 (15,15) CNT에 영향을 준다. 이런 연속적인 절차로써 외부벽을 대한 것을 제외한 모든 MWCNT 벽들은 그림 2(b-e)에서와 같이 표현된다.

만약 그 반동의 일정함이 상수에 의한 것이라고 가정한다면 뉴턴의 법칙에 의한  $l$  벽에 관한 MWCNT 오실레이터의  $n$ 개의 벽에 대한 운동의 방정식은 이 공식에 의해 표현되어진다.

$$M_n \ddot{x}_n = \sum_{i=1}^l -k_{n,i}(x_n - x_i), \quad n \geq 1 \quad (1)$$

$M_n$ 은  $n$ 개 CNT의 벽의 질량을 의미하고,  $x_n$ 은  $n$ 개 CNT의 위치를 나타낸다.  $k_{n,m}$ 은  $n$ 개와  $m$ 개벽 사이의 실제적 반동상수로써,  $k_{n,m}$ 은  $-k_{m,n}$ 과 같고  $k_{n,n}$ 은 0 과 같다. 따라서, MWCNT 오실레이터의 운용 주파수는 벽들과 질량들의 갯수에 의해 결정지어질 수 있다. Core CNT 직경의 증가에 따라, 벽간

의 전체 차이 비율은 감소한다. 동일한 중심을 가진 MWCNTs에 대한 interwall 간격은 대략 0.34 nm이다. 그러므로, interwall 전체 차이 비율은  $m_1 : m_2 : m_3 \dots = r_1 : r_1 + 0.34 : r_1 + 0.68 \dots$ 으로써 설명되어질 수 있다.  $m_i$ 와  $r_i$ 는 각각 각 벽의 질량과 직경을 뜻한다. Core CNT의 직경의 증가에 따라 질량 차이 결과는 감소한다. 따라서, 큰 직경 core CNT를 가진 MWCNT에 대해서, 결합된 오실레이터의 특징은 같은 질량을 가진 조화적으로 결합된 오실레이터와 유사할 수 있다. 본 연구에서는 각각 (5,5)에 대한 그림 3(a)과 (10,10)에 대한 그림 3(b)의 MWCNT 오실레이터에 대한 FFT 주파수 분석 결과를 나타내었고 각 라인은 그림 제목에 적어 놓은 것과 같이 오실레이션안의 각각의 벽이 상응 하다는 것을 보여주었다. 기대 했던 대로 이중 벽은 단일주파수를 가졌고 벽의 갯수의 증가에 따라서 주파수 분할이 일어났다. 삼중벽 오실레이터는 두개의 기본적인 주파수를 가졌고 흥미롭게도 그 (5n,5n) 오실레이터는 다른 오실레이션들이 그림3 (a와b)에서 보여진 것과 같이 무시할만한 작은 크기를 가지는 것 처럼

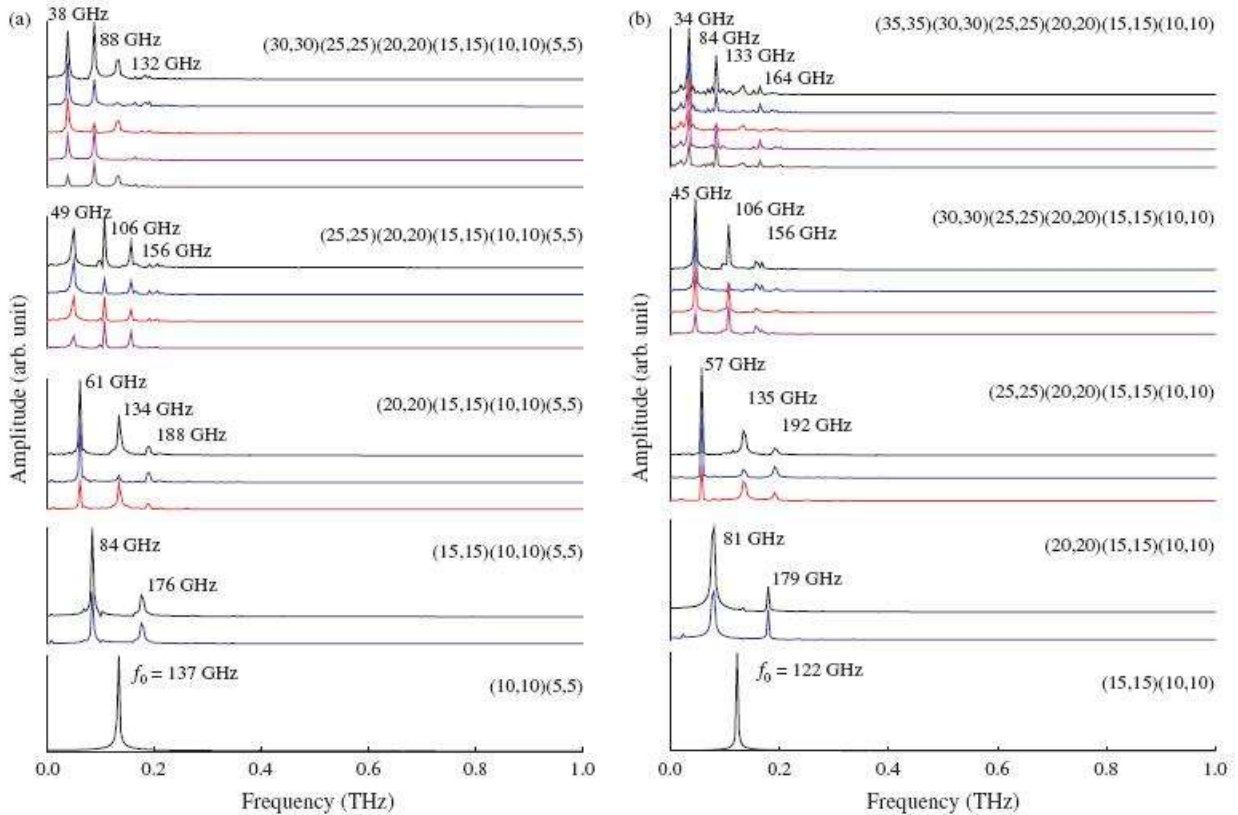


그림 3. 2에서부터 6까지의 n 경계에 대한 다중벽 (5n,5n) 오실레이터와 (a)에서의 (5,5) core에 대한, (b)에서의 (10,10)에 대한 주파수 분석결과. 각 오실레이터에 대한 외부 벽 질량 중심은 MD 시뮬레이션 동안에 고정되었다. 각 라인은 벽과 일치 일치한다. 가장 위의 선은 core 벽과 두번째, 세번째에 대한것이고 네번째와 다섯번째 라인들은 가장 위로부터 더 큰 직경을 가진 중간 벽들에 대한 것이다.

## 참고문헌

4에서 6까지 일관적인  $n$  범위에 대한 3개의 기본적인 주파수를 가진다. 더욱이 적어도 MWCNT 오실레이터의 기본적인 주파수중 한개는 이중 벽 한쪽의 주파수 보다 낮다.

식 (1)이 뜻하는 바로써, MWCNT 오실레이터의 주파수 분할은 전형적인 결합된 오실레이션의 주파수 특징과 비슷하다. 비록 그림3(b)의 core CNT가 그림 3(a)의 core CNT 보다 더 작을지라도 증가하는 벽의 갯수에 대한 주파수 정점은 사실상 비슷하게 나타난다. 이것은 MWCNT 오실레이터의 두 그룹 사이의 비슷한 interwall 결합 에너지 때문이다. 4중, 5중벽 오실레이터에 관한 가장 높은 주파수 구성요소는 모든 세개의 기본적인 주파수 구성요소가 부합하는 DWCNT 오실레이터보다 낮은 주파수를 가지는 동안 DWCNT 오실레이터 가장 높은 주파수 구성요소는 그들의 DWCNT 양쪽보다 더 높은 주파수를 가진다.

3중, 4중벽 CNT 오실레이터에 대해서는 기본적인 정점이 항상 그들의 가장 낮은 주파수 구성요소이다. 5중,6중 벽 CNT 오실레이터에 대해서는 각각의 벽의 기본적인 정점이 서로서로 다르다. 일반적으로 (10,10) CNT에 대한 MWCNT 오실레이터의 기본적인 정점에 비해 core(5,5) CNT에 대한 MWCNT 오실레이터의 기본적인 정점은 서로 다르다. 왜냐하면 이것은 MWCNT 오실레이터의 주파수가 벽들간의 interwall 질량 차이 비율에 좌우되기 때문이다. core CNT 직경의 증가에 따른 기본적인 정점은 MWCNT 오실레이터와 기본적인 넓이 사이의 차이와 2차적인 정점의 가장 낮은 주파수 구성요소로써 증가한다.

## 3. 결 론

요약하면, 병진적 오실레이션에 오직 하나의 기본적인 형태를 가지고 있는 DWCNT 오실레이터에 비해서 MWCNT 오실레이터의 interwall 결합은 오실레이션의 주파수 분할을 일으킨다는 사실을 발견했다. 주파수 분할의 가장 큰 특징은 core CNT의 독립으로 부터 나타난다. 4차적, 5차적, 6차적 CNT와 벽 직경의 독립성, 3개의 주파수 체너레이터로써의 제안된 어플리케이션을 위해서는 끊임없는 세개의 기본적인 정점이 있다.

- [1] J. Cumings and A. Zettl, Science 289,602 (2000); J. Cumings and A. Zettl, phys. Rev. Lett, 93, 086801 (2004)
- [2] M. F. Yu, B. I. Yakobson, and R. S. Ruoff, J. Phys. Chem. B 105, 10753(2001); D. Qian, G. J. Wagner, W. K. Liu, M. F. Yu, and R. S. Ruoff, Appl. Mech. Rev. 55, 495(2002).
- [3] Q. Zheng and Q. Jiang, Phys. Rev. Lett. 88, 045503 (2002); Q. Zheng, J. S. Liu, and Q. Jiang, Phys. Rev. B 65, 245409 (2002); W. Huo, Y. Guo, H. Gao, Q. Zheng, and W. Zheng, Phys. Rev. Lett. 91, 125001 (2003); W. Guo, W. Zhong, Y. Dai, and S. Li Phys. Rev. B 72, 075409(2005); Y. Zhao, C.-C. Ma, G. Chen, and Q. Jiang. Phys. Rev. Lett. 91. 175504 (2003).
- [4] S.B. Legoas, V. R. Coluci, S. F. Braga, P. Z. Coura, S. O. Dantas, and D. S. Galvao, Phys. Rev. Lett. 90. 055504(2003); S. B. Legoas, V. R. Coluci, S. F. Braga, P. Z. Coura, S. O. Dantas, and D. S. Galvao, Nanotechnology 15, S184 (2004)
- [5] J. L. Rivera, C. McCabe, and P. T. Cummings, Nano Lett. #. 1001 (2003); J. L. Rivera, C. McCabe, and P.T. Cummings, Nanotechnology 16, 186(2005); X. Zhao and P.T. Cummings. J. Chem. Phys. 124. 134705 (2006).
- [6] J. W. Kang and H. J. Hwang, J. Appl. Phys. 96, 3900 (2004); J. W. Kang, K. O. Song, O. K. Kwon, and H. J. Hwang, Nanotechnology 16. 2627 (2005); J. W. Kang and H. J. Hwang, J. Comput. Theor, Nanosci, 2. 348(2005); J. W. Kang, K. O. Song, H. J. Hwang, and Q. Jiang, J. Comput. 쏘덱. Nanosci. 3, 880 (2006)
- [7] Y. E. Lozovik, A. V. Minogin, and A. M. Popov, phys. Lett. A313, 112 (2003); Y. E. Lozovik, A. G. Nikolaev, and A. M. Popov, Chem Phys. Lett 385, 72 (2004); E. Bichoutskaia, A. M. Popov, A. El-Barbary, M. I. Heggie, and Y. E. Lozovik,, Phys. Rev. B 71, 113403 (2005)
- [8] P. Liu. Y. W. Zhang and C. Lu, J. Appl. Phys. 98, 014301 (2005); P. Liu. Y. W. Zhang, and C. Lu Carbon 44. 27 (2006)
- [9] P. Tangney, S. G. Louie, and M. L. Cohen. Phys. Rev. Lett. 93. 065503 (2004)
- [10] J. Tersoff. Phys. Rev B38, 9902 (1988). J. Tersoff. Phys. Rev. B39. 5566 (1989); D. W. Brenner. Phys. Rev. B 42, 9458 (1990)