

서로 다른 길이를 갖는 이중벽 탄소 나노튜브 공진기의 초고주파 주파수 특성

김진태*, 이준하**, 이강호***, 최종호****

Ultra-High Frequency Characteristics of Double-Wall Carbon Nanotube Resonator with Different Length

Jin-Tae Kim*, Jun-Ha Lee**, Kang-Ho Lee***, Jong-Ho Choi****

요약

본 논문에서는 고전적인 분자 동역학 시뮬레이션을 통해서 다양한 길이를 가진 이중벽 탄소나노 튜브로 만들어진 초고주파 나노 기계 공진기의 주파수 변동 특성을 분석한다. 분석의 목적은 이중벽 탄소나노 튜브 벽의 길이에 따라 변동하는 공진기의 주파수 분석이다. 실험 결과, 주파수 변동이 여러 가지 외벽 길이 값 L10에 대해서는 내벽/외벽 길이 비율 L5/L10의 함수로 최대 주파수로 정규화된 공진 주파수가 Pearson VII 함수에 잘 맞고, 여러 가지 내벽 길이 값에 대해서는 외벽/내벽 길이 비율의 함수로 최대 주파수로 정규화된 공진 주파수가 Gauss 분산 함수에 잘 맞는 것을 보여준다.

Abstract

In this paper, we have investigated ultrahigh frequency nano-mechanical resonators, made of DWCNTs with various wall lengths, via classical molecular dynamics simulations. We have aimed our analysis on the frequency variations of these resonators with the DWCNT wall lengths. The results show that the variations can be well fitted by either the Pearson VII function when the resonant frequency of normalized by its maximum frequency is plotted as a function of the inner/outer wall length ratio L5/L10 for different values of the outer wall length L10, and the Gauss distribution function when the resonant frequency of normalized by its maximum frequency is plotted as a function of the outer/inner wall length ratio for different values of the inner wall length.

▶ Keyword : Nanotube(나노튜브), DWCNT, Resonator(공진기)

• 제1저자 : 김진태 교신저자 : 이강호

• 투고일 : 2010. 10. 18, 심사일 : 2010. 11. 02, 게재확정일 : 2010. 11. 15.

* 한서대학교 컴퓨터정보공학과 교수 ** 상명대학교 컴퓨터시스템공학과 교수 *** 국립한국재활복지대학 정보보안과 교수

**** 강남대학교 전자공학과 교수

1. 서론

1991년 일본 NEC연구소에서 탄소 나노튜브(Carbon Nanotube: CNT)의 발견 이후로 CNT에 관한 집중적인 연구가 이루어져 왔다.[1] 또한 CNT는 나노크기 소자, 나노 전자회로, 나노 복합 물질의 개발을 위한 기본적인 물질로 응용이 가능하여 단일벽 탄소나노튜브 혹은 다중벽 탄소나노튜브에 대한 기계적인 동작에 대한 연구가 최근 활발히 전개되고 있다.[2]

탄소 나노튜브는 매우 우수한 기계적, 전기적, 열적, 화학적 특성을 가지고 있어 다양한 분야에 응용될 수 있는 미래의 신소재로 차세대 정보산업 분야, 대체 에너지 분야 및 복합소재 분야 등에서 장기 계획으로 폭넓게 이용될 것으로 예측되고 있다.

특히, 탄소 나노튜브는 아주 높은 평면 탄성계수 및 열전도성과 같은 매력적인 특성이 있다. 또한 나노미터 규모에서 완벽한 원자 구조는 CNT가 나노 전자 기계 시스템에서 감지 및 신호 처리용 고주파 진동자의 부품으로 적용될 수 있다는 것을 뜻한다.[3] 이중벽 탄소 나노튜브(Double Wall CNT: DWCNT) 공진기는 탄소에 대해 반 데르 발스(van der Waals: vdW) 포텐셜(potential)로 특징지어지는 층간 상호작용으로 인하여 단일벽 탄소 나노튜브(Single Wall CNT: SWCNT) 공진기와 다른 기계적 구조를 가지고 있다. SWCNT는 지름 약 1-2nm를 가지는 단일 외벽으로 이루어진 것을 말하며, DWCNT는 안쪽의 SWCNT를 Graphene 층이 한겹 더 싸고 있는 형태이다. 그리고 여러 겹의 Graphene 층이 둘러싸여 있는 형태를 멀티 탄소 나노튜브(MWCNT)라고 한다. 그림 1에 Graphene, SWCNT, DWCNT의 구조를 보인다. 이들은 각각의 독특한 기계적, 전기적, 열적 성질들 때문에 탄소 나노기술 분야에서 매우 활발한 연구가 이루어지고 있다.

현재 DWCNT와 MWCNT의 생산은 SWCNT에 비해 매우 저조하며, 그 합성 기술 또한 보유하고 있는 나라가 많지 않다. DWCNT의 합성 기술은 플렉서블 디스플레이 소재 뿐만 아니라 다양한 응용 산업에서 중요한 소재로서 그 수요가 기하급수적으로 증가할 것으로 예측되고 있어, DWCNT의 연구가 매우 필요한 실정이다.

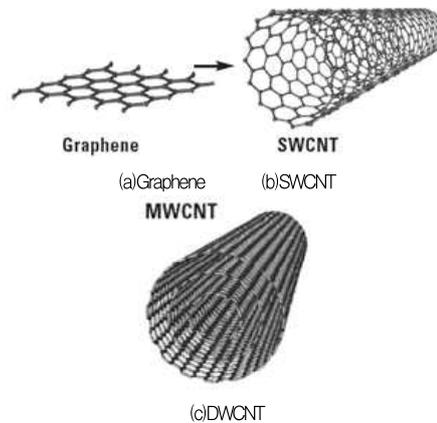


그림 1. Graphene, SWCNT, DWCNT의 구조
Fig.1. The Structure of Graphene, SWCNT, and DWCNT

나노크기에서의 실험을 실제로 수행하는 것은 환경상 매우 어렵기 때문에 최근에는 분자 동역학 시뮬레이션 방법이 널리 사용되고 있다.[4] 이 분야에서의 컴퓨터 시뮬레이션은 차세대 기술로 각광받고 있다. 기계적인 공진기는 신호 처리 시스템에서 중요한 역할을 담당하는 부품이다.[5] 공진기의 크기가 줄어들면 공진주파수가 증가하고 에너지 소모도 줄기 때문이다.[3]

Jiang 등은 고전적 분자 동역학(Molecular Dynamics: MD) 시뮬레이션을 사용하여 캔틸레버가 있는 단일 벽 CNT 진동자의 에너지 소실을 연구했는데, 약한 층간 결합력이 DWCNT의 에너지 소실에 크게 기여한다는 것을 확인했다.[6] 최근의 기술 진보는 여러 가지 기법으로 DWCNT가 서로 다른 벽 길이로 합성되는 것을 가능하게 했다. 짧은 외벽이 있는 DWCNT는 이산화탄소를 사용하여 DWCNT를 산화시켜 얇게 만들어서 열고 외벽을 전류를 사용하여 연소시킴으로써 만들어질 수 있다. 짧은 내벽이 있는 DWCNT는 나노피파드 DWCNT 전이를 통해서 만들어질 수 있다.[7]

본 논문에서는 서로 다른 길이를 갖는 이중벽 탄소 나노튜브 공진기에 대하여, 원자 단위 모델링 기법을 적용한 나노크기 공진기의 초고주파 주파수 특성을 분석하는 기법을 제안한다. 그 결과를 분석하여 안쪽 혹은 바깥쪽 탄소 나노튜브 길이를 제어하는 다양한 주파수 소자를 구현하는데 응용될 수 있도록 한다. 분석 결과, 다양한 벽 길이가 있는 DWCNT 공진기를 사용하여 매우 세밀한 동조기를 만드는 것에 대한 설계 지침을 개발하는데 유용할 수 있다.

본 논문은 1장 서론에 이어, 2장에서는 DWCNT를 갖는 공진기의 초고주파 특성을 실험에 의해 주파수 분석을 하고,

3장에서는 분석 결과를 토의한다. 마지막으로 4장에서 결론과 향후 발전방향에 대해 논하는 순으로 구성한다.

II. 초고주파 주파수 특성 분석

Jiang 등은 고전적인 분자 동역학 시뮬레이션을 이용하여 끝이 매달려있는 CNT 발진의 에너지 소모에 대한 연구를 수행하였다.[8] 또한 최근에는 DWCNT 공진기의 진동 특성을 연속체 모델법으로 연구한 결과가 발표되었다.[9] 그러나 이러한 연구에서 사용한 DWCNT는 안쪽과 바깥쪽 CNT의 길이가 같은 것을 사용하였다. 실제로 나노 튜브를 기반으로 하는 공진기는 CNT 길이가 서로 다른 DWCNT가 사용될 수 있다. 그러나 이와 같이 서로 다른 길이를 갖는 DWCNT 경우에 대한 연구는 아직까지 수행되고 있지 않다.

따라서 본 논문에서는 그림 2와 같이 서로 다른 길이를 가지고 끝이 매달린 DWCNT 공진기를 대상으로 MD 시뮬레이션을 수행하였다.[10]

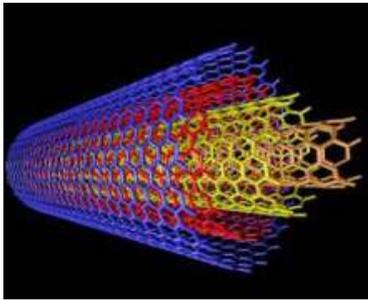


그림 2 서로 다른 길이를 갖는 DWCNT 공진기 구조
Fig. 2 Structure of Double-Wall Carbon Nanotube Resonator with Different Length

캔틸레버(cantilever)가 있는 (5,5)(10,10) 이중벽 탄소 나노튜브 공진기의 초고주파 주파수 변동 특성을 분석하기 위해서 고전적인 MD 법을 사용하였다. 분자동역학 시뮬레이션에서 가장 중요한 모델은 적절한 원자상호작용 모델을 사용하는 것이다. CNT에 공유 결합을 형성하는 탄소 원자 사이의 상호작용은 탄소 체계에 광범위하게 적용되고 시뮬레이션 결과의 실험적 효과성에 관련되는 Tersoff-Brenner 퍼텐셜을 사용하여 실험하였다.[11][12] 탄소의 긴 범위의 상호작용은 Ulbricht 등이 실험에 의해 구한 파라미터에 근거하여 Lennard-Jones 12-6(LJ12-6) 퍼텐셜을 사용하여 표현한다.[13] 주파수 특성 분석을 위해 사용한 LJ12-6 퍼텐셜 각각의 파라미터는 $\epsilon_{\text{carbon}}=2.4038 \times 10^{-3} \text{eV}$ 및 $\sigma_{\text{carbon}}=3.37 \text{\AA}$ 이고, LJ12-6 퍼텐셜의 절단 거리는 10\AA 이다. MD법은 속도

Verlet 알고리즘, 온도를 제어하기 위한 Gunsteren-Berendsen 온도 조절 장치, 그리고 연산 성능을 개선하기 위한 근간 목록을 사용하여 구현되었다. MD시간 간격은 $5 \times 10^{-4} \text{ps}$ 이다. 최초의 원자 속도는 Maxwell분산에 따라 판단되고 그 크기는 시스템의 온도에 맞추기 위하여 조정된다. 모든 MD 시뮬레이션에서 온도는 1K로 설정하였다.

내벽 (5,5) 및 외벽 (10,10)의 길이는 각각 L_5 과 L_{10} 으로 표시한다. 두 벽의 왼쪽 끝은 고전적 MD 시뮬레이션 동안에 고정된다. 내부 (5,5) CNT의 길이(L_5)는 0에서 10nm까지 1nm 단위로 변경하였고, 외부 (10,10) CNT의 길이도 0에서 10nm까지 1nm 단위로 변경하였다. 따라서 120건의 MD 시뮬레이션을 수행하였다. 공진 주파수를 얻기 위해서 최초에 2.5ps의 시간 동안 가로 방향으로 가해지는 원자 당 0.001eV/\AA 의 외력 하에서 MD 시뮬레이션을 수행하였으며, 휘는 힘을 제거한 후에 CNT 공진기가 자유로이 진동하게 했다. 기본 공진 주파수(f)는 0.05ps 시간에 채취된 자료에 근거하여 고속 푸리에 변환(fast Fourier Transform: FFT)을 통해서 분석하였다.

III. 분석 결과

그림 3과 그림 4는 L_5 와 L_{10} 의 함수로서의 공진 주파수와 L_5 와 L_{10} 에 대한 공진 주파수 곡선을 각각 보여준다. 그림 3과 4에서 보듯이, 공진 주파수의 피크는 길이가 1nm 인 DWCNT에서 일어나고 공진 주파수는 L_5 와 L_{10} 의 길이가 증가함에 따라 크게 감소했다. 공진 주파수 곡선의 융선은 피크에서 $L_{10}=7 \text{nm}$ 인 지점까지 생긴다. 자세한 비교를 위해서 공진 주파수를 L_5 의 함수로 그림 5에 나타내었다.

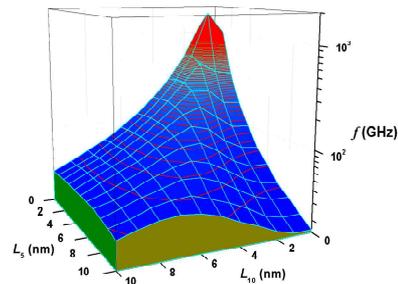


그림 3 L_5 및 L_{10} 의 함수로서 공진기 주파수
Fig. 3. Resonance Frequency as Function of L_5 and L_{10}

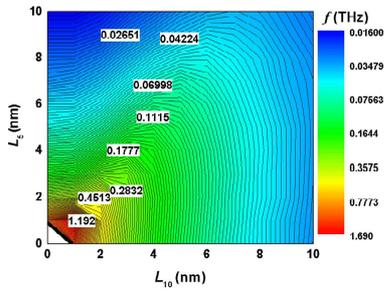


그림 4. L₅ 및 L₁₀의 공진 주파수 곡선
Fig. 4. Contour of Resonance Frequency of L₅ and L₁₀

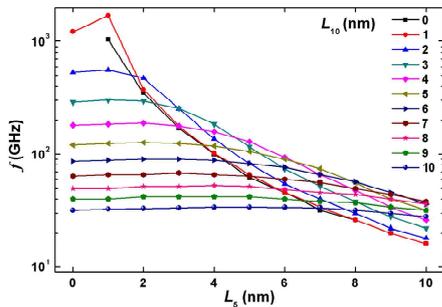


그림 5. L₁₀의 값에 대한 L₅의 함수로서의 공진 주파수
Fig. 5. Resonance Frequency as a Function of L₅ for Various of L₁₀

그림 4에서 보듯이 (5,5) 및 (10,10) SWCNT 나 (5,5)(10,10) DWCNT로 만들어진 공진기는 벽 길이가 증가함에 따라 주파수가 증가한다. 이것은 고전적 빔 진동 이론과 일치하는 경향이다. 그러나 고전적 이론과 달리 하나의 길이가 고정되었을 때 다른 하나의 길이의 변동에 따른 주파수 변동은 회귀 등식으로 정의될 수 없다.

그림 4에서 L₅ ≤ L₁₀일 경우에는 공진 주파수는 거의 일정하지만, L₅ > L₁₀일 경우에는 공진 주파수가 L₅가 증가함에 따른 SWCNT의 주파수 감소 경향에 따라서 감소한다. 이 결과는 내벽이 외벽 안에 완전히 싸여 있을 경우에는 DWCNT의 진동은 외벽의 진동에 의해 크게 영향을 받는다는 것을 보여준다. 그러나 쌓여 있는 내벽이 반 테르 발스 상호작용이 있는 상응하는 DWCNT의 진동에 의해 약간 영향을 받는다는 것을 알아냈다. 그래서 DWCNT의 공진 주파수는 외벽에 대해서 SWCNT의 공진 주파수보다 15%정도 감소한다.

그림 6에서는 L₅와 L₁₀의 비율에 의한 기본 주파수를 분석하여 나타내었다. 길이가 5nm인 끝이 매달린 (10,10) CNT의 기본 주파수는 같은 길이의 (5,5) CNT의 기본 주파수보다 약 2배 정도 높았다. 길이가 5nm인 바깥쪽 (10,10)

CNT인 경우, 안쪽 (5,5) CNT의 길이가 증가함에 따라 기본 주파수는 L₅=4nm의 비율까지는 약간 증가하지만 그 이후로는 감소하였다.

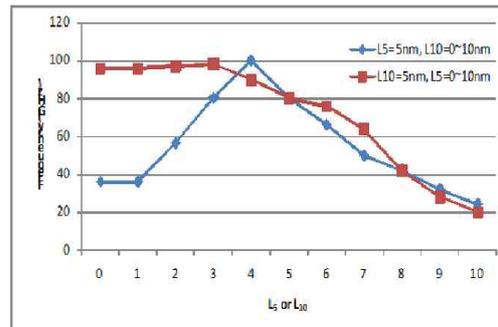


그림 6. 나노튜브 공진기의 기본 주파수 분석
Fig. 6. Frequency Analysis of Nanotube Resonator

L₅=5nm인 경우에 L₁₀의 길이가 2~7nm 사이에서 주파수 변화는 가우스 분포와 잘 일치하였다. 5nm 길이의 안쪽 (5,5) CNT인 경우, 바깥쪽 (10,10) CNT의 길이가 증가함에 따라 기본 주파수는 L₁₀가 4nm 까지는 증가하였으나 그 이후로는 감소하였다.

MD 시뮬레이션 결과를 가우스 분포로 회귀 분석한 결과로부터 길이가 5nm를 초과하는 (5,5)(10,10) CNT 공진기의 최대 주파수는 L₁₀=3.8nm, L₅=5nm일 경우에 해당한다. L₅ 또는 L₁₀가 5nm를 초과하면 주파수는 모두 구조적인 차이에도 불구하고 유사한 것을 알 수 있다. 안쪽 벽의 길이가 바깥쪽 벽의 길이를 초과하는 경우, 노출된 안쪽 벽의 길이는 바깥쪽 벽의 길이가 증가함에 따라 감소된다.

본 논문의 시뮬레이션 구조에서 안쪽과 바깥쪽 벽의 모서리 한쪽은 고정되어 있으나, 다른 쪽 끝은 자유롭게 움직인다. 따라서 바깥쪽 벽의 길이가 안쪽 벽의 길이를 초과하면, 짧은 안쪽 벽은 바깥쪽 벽의 진동에 영향을 미친다. 그러므로 짧은 안쪽 벽은 기본 주파수가 약간 증가하게 되는 것이다.

IV. 결론

본 논문에서는 고전적인 분자 동역학 시뮬레이션을 통해서 여러 가지 벽 길이를 가진 DWCNT로 만들어진 초고주파 나노 기계 공진기의 주파수를 분석하였는데, 분석의 목적은 DWCNT 벽의 길이에 따라 변동하는 공진기 주파수 변동 특성 분석이었다. 실험 결과에 의하면, 내벽이 외벽보다 길 경우에는 밀려나온 내벽의 진동은 DWCNT 진동에 상당히 더

강하게 영향을 미친다. 여러 가지 벽 길이에 따른 DWCNT의 공진 주파수 변동은 Pearson VII 및 Gauss 분산 함수에 잘 맞을 수 있다는 것이 보여진다. 이 결과는 여러 가지 벽 길이가 있는 DWCNT 공진기를 사용하여 매우 세밀한 동조기를 만드는 것에 대한 설계 지침을 개발하는데 유용할 수 있음을 나타낸다. 향후 연구과제로는 보다 다양한 환경하에서 주파수의 변동 특성을 분석하는 것이 필요하고, MWCNT로의 적용이 필요할 것으로 보인다.

참고문헌

- [1] <http://www.nec.co.jp/>
- [2] D. Qian, G. J. Wagner, W. K. Liu, M. F. Yu, and R. S. Ruoff, "Mechanics of carbon nanotubes," *Applied Mechanics Reviews*, Vol. 55, pp. 495, 2002.
- [3] C. Li and T.-W. Chou, "Single-walled carbon nanotubes as ultrahigh frequency nanomechanical resonators," *Physical Review B*, Vol. 68 pp. 073405, 2003.
- [4] B. I. Yakobson, C. J. Brabec, and J. Bernholc, "Nanomechanics of carbon tubes: Instabilities beyond linear response," *Physical Review Letters*, Vol. 76, pp. 2511-2514, 1996.
- [5] H. J. De Los Santos, *Introduction to Microelectromechanical Microwave Systems*, Artech House Publishers, London, 1999.
- [6] H. Jiang, M.-F. Yu, B. Liou, and Y. Huang, "Intrinsic energy loss mechanisms in a cantilevered carbon nanotube beam oscillator," *Physical Review Letters*, Vol. 93, pp. 185501, 2004.
- [7] S. C. Tsang, P. J. F. Harris, and M. L. H. Green, "Thinning and opening of carbon nanotubes by oxidation using carbon dioxide," *Nature*, Vol. 362, pp.520-522, 1993.
- [8] Q. Zheng and Q. Jiang, "Multiwalled carbon nanotubes as gigahertz oscillators," *Physical Review Letters*, Vol. 88, pp. 045503, 2002.
- [9] K. Y. Xu, X. N. Guo, and C. Q. Ru, "Vibration of a double-walled carbon nanotube aroused by nonlinear intertube van der Waals forces," *Journal of Applied Physics*, Vol. 99, pp. 064303, 2006.
- [10] <http://www.dolcera.com/wiki/images/>
- [11] J. Tersoff, "New empirical model for the structural properties of silicon", *Physical Review Letters*, Vol. 56, pp. 632-635, 1986.
- [12] J. Tersoff, "Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems," *Physical Review*, Vol. B39, pp.5566-5568, 1989.
- [13] Y.-J. Song, J.-H. Lee, J.-T. Kim, and J.-H. Choi, "A study of ultra-high frequency characteristics of twin-wall carbon nanotube resonator," *Proc. 2010 International Conference on Electronics, Informations and Communications*, pp. 417-418, 2010.
- [14] P. G. Collins, M. Hersam, M. Arnold, R. Martel, and P. Avouris, "Current saturation and electrical breakdown in multiwalled carbon nanotubes," *Physical Review Letters*, Vol. 86, pp.3128-3131, 2001.
- [15] C. Li, E. T. Thostenson, and T.-W. Chou, "Sensors and actuators based on carbon nanotubes and their composites: A review," *Composites Sci. Tech.*, Vol. 68, pp.1227-1249, 2008.
- [16] H. Ulbricht, G. Moos, and T. Hertel, "Interaction of C60 with carbon nanotubes and graphite," *Physical Review Letters*, Vol. 90, pp. 095501, 2003.
- [17] K. Jensen, K. Kim, and A. Zettl, "An atomic-resolution nanomechanical mass sensor," *Nature Nanotechnology*, Vol. 3, pp. 533-537, 2008.
- [18] V. Sazonova, Y. Yaish, H. Ustunel, D. Roundy, T. A. Arias, and P. L. McEuen, "A tunable carbon nanotube electromechanical oscillator," *Nature*, Vol. 431, pp. 284-287, 2004.
- [19] M. M. J. Treacy, T. W. Ebbesen, and T. M. Gibson, "Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes," *Nature*, Vol. 381, pp. 678-680, 1996.
- [20] C. E. Guisca, Y. Tison, V. Stolojan, E. Borowiak-Palen, and S. R. P. Silva, "Inner-Tube

chirality determination for double-walled carbon nanotubes by scanning tunneling microscopy," Nano Letters, Vol. 7, pp. 1232-1239, 2007.

- [21] S. L. Lair, W .C. Herndon, and L. E. Murr, "Stability comparison of simulated double-walled carbon nanotube structures," Carbon, Vol. 46, pp. 2083-2095, 2008.
- [22] D. W. Brenner, "Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films," Physical Review B, Vol. 42, pp. 9458-9471, 1990.
- [23] 김종식, 김관하, 김창일, "촉매화학기상증착법에 의한 단일벽 탄소나노튜브의 합성과 미세구조", 대한전기학회 논문지, 제 55권, 제 7호, 359-363쪽, 2006년.
- [24] 정승일, 이승백, "이중층 탄소나노튜브 전계전자 방출원의 신뢰성 있는 전계방출 특성", 한국진공학회지, 제 17권, 제 6호, 566-575쪽, 2008년.

저 자 소 개



김진태
 1987년: 중앙대학교 공학사
 1989년: 중앙대학교 공학석사
 1993년: 중앙대학교 공학박사
 1995년 - 현재 :
 한서대학교 컴퓨터정보공학과 교수
 관심분야: 영상처리, 디지털 포렌직



이준하
 1990년: 중앙대학교 공학사
 1992년: 중앙대학교 공학석사
 1996년: 중앙대학교 공학박사
 2003년 - 현재 :
 상명대학교 컴퓨터시스템공학과 조교수
 관심분야: 나노시스템, 임베디드시스템



이강호
 1986년: 중앙대학교 공학석사
 1991년: 중앙대학교 공학박사
 2003년 - 현재:
 국립한국재활복지대학 정보보안과 교수
 관심분야: 정보보안, 디지털영상처리



최종호
 1982년: 중앙대학교 공학사
 1984년: 중앙대학교 공학석사
 1987년: 중앙대학교 공학박사
 1990년 - 현재:
 강남대학교 전기공학과 교수
 관심분야: 컴퓨터 시각, 영상정보통신