

---

# 이중벽 탄소 나노튜브 공진기의 주파수 변동 특성 분석

김진태\* · 이준하\*\*

Frequency Vibrational Behavior Analysis of Double-Wall Carbon Nanotube Resonator

Jin-Tae Kim\* · Jun-Ha Lee\*\*

## 요 약

짧은 바깥쪽 탄소 나노튜브를 가진 이중벽 탄소 나노튜브 공진기의 경우, 자유로운 끝은 긴 안쪽 벽의 진동에 중요한 역할을 한다. 짧은 안쪽 탄소 나노튜브를 가진 이중벽 카본 나노튜브 공진기의 경우, 안쪽은 부드러운 코어로 작동하여 기본 주파수가 이들의 길이에 의해 영향을 받는다. 본 논문에서는 서로 다른 길이를 가지고 나노튜브로 구성된 이중벽 탄소 나노튜브 공진기의 주파수 변화를 분석한다. 분석 결과, 안쪽 혹은 바깥쪽 탄소 나노튜브 길이를 제어하는 다양한 주파수 소자를 구현하는데 널리 응용될 수 있을 것으로 판단된다.

## ABSTRACT

For a double-walled carbon nanotube resonator with a short outer nanotube, the free edge of the short outer wall plays an important role in the vibration of the long inner nanotube. For a double-walled carbon nanotube resonator with a short inner nanotube, the short inner nanotube can be considered as a flexible core, thus, the fundamental frequency is influenced by its length. In this paper, we analysis frequency variation in ultrahigh frequency nanomechanical resonators based on double-walled carbon nanotubes with different wall length. This results will widely apply to the realization of frequency devices controlling the length of the inner or outer nanotube.

## 키워드

나노튜브, 이중벽, 공진기, 주파수 분석

## Key words

Nanotube, Double-walled, Resonator, Frequency Analyzation

---

\* 정회원 : 한서대학교 컴퓨터정보공학과 (교신저자, jtkim@hanseo.ac.kr) 접수일자 : 2010. 08. 02  
\*\* 정회원 : 상명대학교 컴퓨터시스템공학과 심사완료일자 : 2010. 09. 16

## I. 서 론

1991년도에 탄소 나노튜브(Carbon Nanotube: CNT)의 발견 이후로 CNT에 관한 집중적인 연구가 이루어져 왔다. 또한 CNT는 나노 크기 소자, 나노 전자회로, 나노 복합 물질의 개발을 위한 기본적인 물질로 응용이 가능하여 단일벽 탄소 나노튜브 혹은 이중벽 탄소 나노튜브에 대한 기계적인 동작에 대한 연구가 최근 활발히 전개되고 있다[1].

나노 크기에서의 실험을 실제로 수행하는 것은 환경상 매우 어렵기 때문에 최근에는 분자 동역학 시뮬레이션 방법이 널리 사용되고 있다[2]. 이 분야에서의 컴퓨터 시뮬레이션은 차세대 기술로 각광받고 있다. 기계적인 공진기는 신호 처리 시스템에서 중요한 역할을 담당하는 부품이다[3]. 공진기의 크기가 줄어들면 공진 주파수가 증가하고 에너지 소모도 줄기 때문이다[4]. 센서인 경우 공진 주파수가 높다는 의미는 감도가 높다는 의미와 같고[5], 무선 통신인 경우 고주파 공진기는 고주파 필터, 발진기, 믹서 등에 응용이 가능하다.

고주파 나노-전기기계적인 시스템 분야의 발전으로 이러한 분야에서의 새로운 연구가 진행되고 있다. 최근에는 탄소 나노튜브를 이용한 공진기와 발진기가 활발히 연구되기 시작했다[6-7]. 나노튜브의 진동 특성에 대한 연구, 끝이 벽에 매달린 나노튜브의 열 진동에 대한 진폭 연구 등이 나노튜브의 영향을 예측하는데 사용되고 있다[8].

탄소 나노튜브는 매우 높은 탄성율과 열전도도와 같은 매우 이상적인 특성을 가지고 있다. 이러한 이상적인 특징과 더불어 나노미터 크기라는 점과 완벽한 원자 구조 등으로 인하여 CNT는 나노-전기기계 시스템, 즉 신호 처리 응용 분야 등에서 쓰이는 고주파 발진기의 부품 등으로 유망한 물질이다.

본 논문에서는 이중벽 카본 나노튜브 공진기의 경우, 짧은 안쪽 탄소 나노튜브는 부드러운 코어로 작동하여 기본 주파수가 이들의 길이에 의해 영향을 받는 것을 고려하여 원자 단위 모델링 기법을 적용함으로써 이중벽 탄소 나노튜브(Double Walled Carbon Nanotube: DWCNT)를 이용한 나노 크기 공진기의 주파수를 분석하는 기법을 새롭게 제안한다. 본 논문에서 제안한 주파수 분석 기법은 안쪽 혹은 바깥쪽 탄소 나노튜브 길

이를 제어하는 다양한 주파수 소자를 구현하는데 널리 응용될 수 있을 것으로 판단된다.

## II. 원자단위 모델링 기반 주파수 분석법

Jiang 등은 고전적인 MD(Molecular Dynamics) 시뮬레이션 기법을 이용하여 끝이 매달려있는 CNT 발진의 에너지 소모에 대한 연구를 수행하였다[7]. 또한 최근에는 DWCNT 공진기의 진동 특성을 연속체 모델법으로 연구한 결과가 발표되었다[9-10]. 그러나 이러한 연구에서 사용한 DWCNT는 안쪽과 바깥쪽 CNT의 길이가 같은 것을 사용하였다. 실제로 나노튜브를 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.

본 논문에서는 그림 1과 같이 서로 다른 길이를 가지고 끝이 매달린 DWCNT 공진기를 대상으로 MD 시뮬레이션을 수행한다.

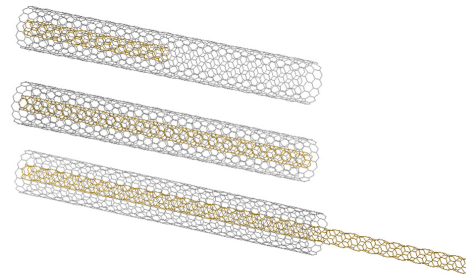


그림 1. 끝이 매달린 DWCNT 공진기 구조  
Fig. 1. Structure of double walled carbon nanotube resonator

DWCNT의 벽간 간격에 관한 정밀한 실험에 의하면 그 값은 3.0Å에서 5.4Å까지 변할 수 있는 것으로 분석되었다[11]. 그러나 높은 안정도를 보이는 CNT 간격은 주로 3.5Å이었다[12]. 본 논문에서는 서로 다른 길이를 갖는 DWCNT 공진기를 분석하기 위해 (5,0) (14,0) DWCNT를 사용하였고, CNT 간격은 3.4Å를 사용하였다. 이 CNT 간격은 가장 안정적인 DWCNT를 구성하는데 최적이기 때문에 선택하였으며 그 결과 CNT 길이 차

이에 의한 기본 주파수의 변화에 관한 새로운 사실을 발견하였다.

두 가지 경우로 MD 시뮬레이션을 수행하였다. 첫 번째는 안쪽(5,0) CNT는 5nm( $L_I$ )로 고정되고, 바깥쪽(14,0) CNT의 길이( $L_O$ )가 0에서 10nm까지 변하는 경우이다. 두 번째는 바깥쪽 (5,0) CNT는 5nm로 고정되고 안쪽(14,0)의 길이가 0에서 10nm 까지 변하는 경우이다.

분자동역학 시뮬레이션에서 가장 중요한 모델은 적절한 원자상호작용 모델식을 사용하는 것이다. 단일벽 탄소 나노튜브에서 탄소원자 사이의 원자결합은 공유결합을 이루는데, 이러한 결합은 일반적으로 Tersoff-Brenner 전위식(potential)을 사용하여 계산한다[14].

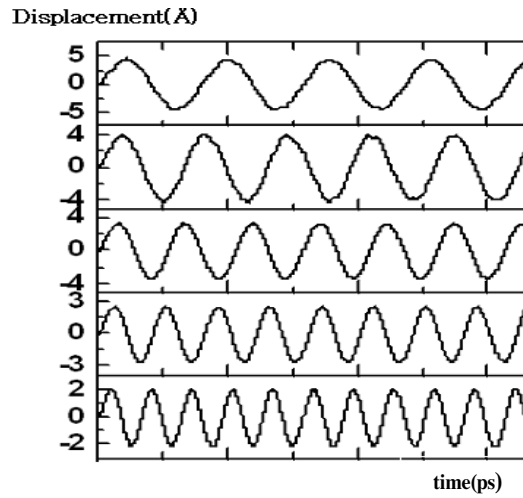
탄소 나노튜브 벽간의 탄소 원거리 상호작용은 반데르발스(van der Waals) 상호작용이다. 이러한 반데르발스 상호작용은 Lennard-Jones 12-6 전위식을 사용하여 모델링되고 있다. 탄소 원자는 CNT에서 공유결합을 유지하므로 Tersoff-Brenner 전위식을 사용하였고[13], 탄소의 원거리 반응은 Lennard-Jones 12-6(LJ12-6) 전위식을 사용하였으며 여기에 사용되는 파라미터는 Ulbricht 등이 유도한 데이터를 이용하였다[15].

LJ12-6 전위식을 위해 사용한 파라미터는  $\epsilon_{carbon} = 2.4038 \times 10^{-3} \text{eV}$ 와  $\sigma_{carbon} = 3.37 \text{\AA}$ 이다. 그리고 cutoff 거리는  $10 \text{\AA}$ 이며, MD 시간 간격은  $5 \times 10^{-4} \text{ps}$ 이다. 초기 속도는 맥스웰 분포로 정하였고, 모든 MD 시뮬레이션 동안 온도는 1K로 고정하였으며, 총 에너지는 일정하게 하였다. 탄소 원자의 왼쪽 끝은 MD 시뮬레이션 동안 고정하였다.

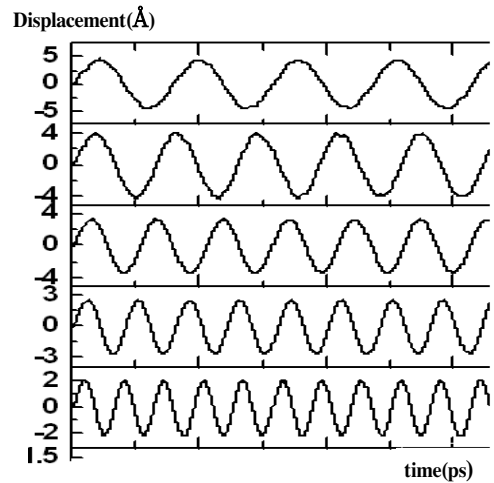
DWCNT 공진기의 진동을 유도하기 위해, 처음 2.5ps 동안 오른쪽 끝에 외부 힘을 가했으며 2.5ps 이후 시간에는 DWCNT 공진기는 500ps 동안 자유롭게 진동하였다.

### III. 컴퓨터 시뮬레이션

본 실험에서는 서로 다른 길이를 가지는 DWCNT 공진기를 분석하기 위해 (5,0) (14,0) DWCNT를 사용하고, CNT 간격은  $3.4 \text{\AA}$ 를 사용하였으며 두 가지 경우로 나누어 MD 시뮬레이션을 수행하였다.



(a)



(b)

그림 2. 나노튜브의 변위.

(a)  $L_O$ 가 0에서 10nm까지 변화할 경우의 MD 시간에 따른 변위 (b)  $L_I$ 가 0에서 10nm까지 변화할 경우의 MD 시간에 따른 변위

Fig. 2. Displacement of nanotube

(a) Displacement as MD time from 0 to 10nm of  $L_O$   
(b) Displacement as MD time from 0 to 10nm of  $L_I$

그림 2는 나노튜브의 변위를 나타낸 것으로 그림 2(a)에는  $L_I=5\text{nm}$ 이고  $L_O$ 가 0에서 10nm까지 변화할 때 MD 시간에 따른 튜브의 변위를 나타내었고, 그림 2(b)는  $L_O=5\text{nm}$  이고  $L_I$ 가 0에서 10nm까지 변화할 때 MD 시간에 따른 튜브의 변위이다.

그림 2에서 CNT 길이 차이에 의한 주파수 변화는 그림 3(a)와 그림 3(b)에서 분석할 수 있다. 길이 변화에 따른 기본 주파수를 유도하기 위해 그림 2에 나타난 데이터를 FFT(Fast Fourier Transform)하여 그림 3에 나타난 주파수 스펙트럼을 분석하였다.

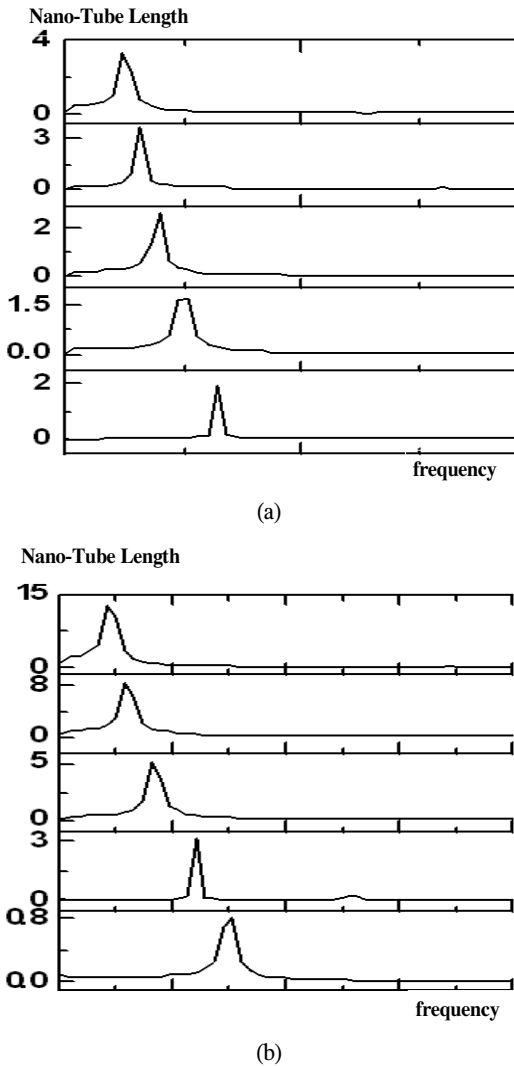


그림 3. 나노튜브 길이에 따른 스펙트럼  
 (a)  $L_o$ 의 증가에 따른 스펙트럼  
 (b)  $L_l$ 의 증가에 따른 스펙트럼  
 Fig. 3. Spectrum according to changes in the length of nanotube  
 (a) Spectrum according to increase of  $L_o$   
 (b) Spectrum according to increase of  $L_l$

그림 3(a)에서  $L_l=5nm$ 인 경우,  $L_o$ 가 4nm를 초과할 때 기본 주파수가 감소하는 것을 알 수 있다. 그러나 그림 3(b)에서  $L_o=5nm$ 일 때  $L_l$ 가 증가함에 따라  $L_l=4nm$ 까지 기본 주파수는 일정했고,  $L_l$ 가 5nm 이상에서는 감소하였다.

그림 4에서는  $L_l$  또는  $L_o$ 의 비율에 의한 기본 주파수를 나타냈다. 길이가 5nm인 끝이 매달린 (14,0) CNT의 기본 주파수는 같은 길이의 (5,0) CNT의 기본 주파수보다 약 2배 정도 높았다. 길이가 5nm인 바깥쪽 (14,0) CNT인 경우, 안쪽 (5,0) CNT의 길이가 증가함에 따라 기본 주파수는  $L_l=4nm$ 의 비율까지는 약간 증가하지만 그 이후로는 감소하였다.

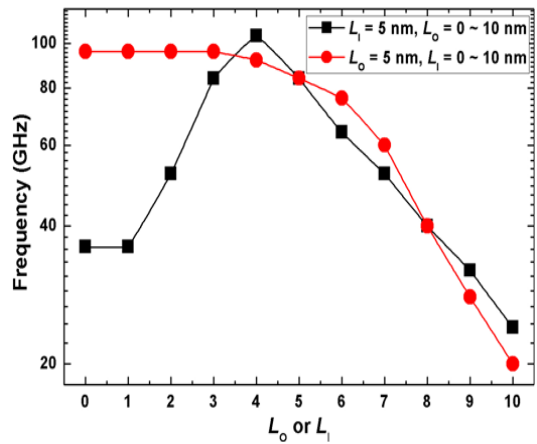


그림 4. 나노튜브 공진기의 기본 주파수 분석  
 Fig. 4. Frequency analysis of nanotube resonator

$L_l=5nm$ 인 경우에  $L_o$ 의 길이가 2~7nm 사이에서 주파수 변화는 가우스 분포와 잘 일치하였다. 5nm 길이의 안쪽 (5,0) CNT인 경우, 바깥쪽 (14,0) CNT의 길이가 증가함에 따라 기본 주파수는  $L_o$ 가 4nm 까지는 증가하였으나 그 이후로는 감소하였다.

MD 시뮬레이션 결과를 가우스 분포로 회귀 분석한 결과로부터 길이가 5nm를 초과하는 (5,0)(14,0) CNT 공진기의 최대 주파수는  $L_o=3.8nm, L_l=5nm$ 일 경우에 해당한다.  $L_l$  또는  $L_o$ 가 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 감

소된다.

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 서로 다른 CNT 길이의 끝이 벽에 매달린 DWCNT 공진기의 기본 주파수 변화를 분석하였다. 길이가 10nm 이하의 (5,0)(14,0) DWCNT에서 MD 시뮬레이션을 수행하여 CNT 길이의 변화에 따른 기본 주파수의 변화를 분석하였다. 분석 결과로부터 DWCNT 공진기는 서로 다른 chiral indices에 따라 다양한 성능의 변화를 나타낼 수 있는 것으로 해석되었다. 안쪽 혹은 바깥쪽 CNT 길이가 변화할 때 다양한 주파수 소자가 구현될 수 있음을 MD 시뮬레이션을 통해 검증하였다. 바깥쪽이 짧은 CNT를 가진 DWCNT 공진기인 경우, 자유로운 끝은 긴 안쪽 CNT의 진동에 중요한 역할을 한다. 그러므로 3가지의 모든 경계조건에 따라 안쪽의 짧은 CNT는 부드러운 코어로 작동하여 기본 주파수가 이들의 길이에 의해 영향을 받는다는 것을 확인하였다.

#### 참고문헌

- [ 1 ] 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.
- [ 2 ] 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.
- [ 3 ] H. J. De Los Santos, *Introduction to Microelectromechanical Microwave Systems*, Artech House Publishers, London, 1999.
- [ 4 ] C. Li and T.-W. Chou, "Single-walled carbon nanotubes as ultrahigh frequency nanomechanical resonators," *Physical Review B*, Vol. 68, pp. 073405, 2003.
- [ 5 ] K. Jensen, K. Kim, and A. Zettl, "An atomic-resolution nanomechanical mass sensor," *Nature Nanotechnology*, Vol. 3, pp. 533-537, 2008.
- [ 6 ] 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.
- [ 7 ] Q. Zheng and Q. Jiang, "Multiwalled carbon nanotubes as gigahertz oscillators," *Physical Review Letters*, Vol. 88, pp. 045503, 2002.
- [ 8 ] 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.
- [ 9 ] 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.
- [ 10 ] 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.
- [ 11 ] 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.
- [ 12 ] 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.
- [ 13 ] J. Tersoff, "New empirical model for the structural properties of silicon," *Physical Review Letters*, Vol. 56, pp. 632-635, 1986.
- [ 14 ] 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.
- [ 15 ] H. Ulbricht, G. Moos, and T. Hertel, "Interaction of C60 with carbon nanotubes and graphite," *Physical Review*

Letters, Vol. 90, pp. 095501, 2003.

- [16] 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.

### 저자소개



**김진태(Jin-Tae Kim)**

1987년: 중앙대학교 전자공학사  
1989년: 중앙대학교 전자공학석사  
1993년: 중앙대학교 전자공학박사  
1995년 ~ 현재: 한서대학교  
컴퓨터정보공학과 교수

※ 관심분야: 영상처리, 디지털 포렌직 등



**이준하(Jun-Ha Lee)**

1990년: 중앙대학교 전자공학사  
1992년: 중앙대학교 전자공학석사  
1996년: 중앙대학교 전자공학박사  
2003년 ~ 현재: 상명대학교 컴퓨터  
시스템공학과 조교수

※ 관심분야: 나노시스템, 임베디드시스템 등