

분자동역학 방법을 이용한 다중벽 탄소 나노튜브 진동자 응용 해석

이준하*, 이홍주*

*상명대학교 컴퓨터시스템공학과

e-mail: junha@smu.ac.kr

Analysis of Nanotube Actuator Application using Molecular Dynamics Method

Jun-Ha Lee*, Hoong-Joo Lee*

*Dept of Computer System Engineering, Sangmyung University

요 약

본 논문은 금속 이온에 둘러싸인 다중벽 탄소 나노튜브를 이용한 기가급 진동자의 응용 가능성에 대한 해석을 수행하였다. 탄소 나노튜브 오실레이터 안쪽에 포함된 칼슘 이온들은 외부에서 공급된 전계에 의해 가속될 수 있고 $nK^+@CNT$ 오실레이터로 구성된 기가 헤르쯔 진동자는 본 연구의 분자동역학 시뮬레이션에서 공급된 전계에 의해 초기화될 수 있었다.

1. 서론

탄소 나노튜브를 이용한 다양한 응용을 위해 분자 베어링으로 사용 가능한 rotaxane 복합체[1]의 합성에 대한 연구와 더불어 Cumings와 Zettl [2]은 최근에 수십 나노미터 크기의 지름을 가진 다중벽 탄소 나노튜브의 바깥쪽을 깎아서 이상적으로 낮은 마찰력과 low-wear bearing을 보고하였다. 외부 shell은 열려져있고 nano manipulator는 움직일 수 있도록 안쪽 shell에 붙어있는 모습이 HRTEM (High Resolution Transmission Electron Microscope)으로 관찰되었다. 그들은 코어를 밖으로 당기거나 안으로 바깥쪽 shell을 당김으로써 이 시스템의 베어링에 관한 성질을 연구할 수 있었다. 그들은 또한 코어가 미끄러지는 것에 대한 shell 사이의 저항력은 무시할 만큼 작다고 결론이 났다. 이것은 이완된 후 밀려난 코어 shell에 작동하는 반데르 발스 반응의 복원력에 의해 바깥 shell을 안쪽으로 완전하고 빠르게 오그라짐을 관찰하여 밝혀진 것이다. 그들이 이번 실험에서 보여준 것들은 1 기가 헤르쯔를 넘어서 작동하는 다양한 나노 기계 시스템을 만드는 과정에서 의미가 깊

은 것이다. 이런 1 기가 헤르쯔가 넘는 시스템은 분자 제작의 로드 맵 상에서 중요한 전기가 되는 것이다[3]. 탄소 나노튜브 오실레이터의 에너지 손실은 Guo와 Zhao등에 의해 연구되었다 [4]. 최근에 Legoas 등은 기가 헤르쯔 오실레이터와 같은 소자가 실현 가능한지를 확인하기 위해 다양한 나노튜브 형태가 고려된 분자 동역학 시뮬레이션을 수행하였다.

이러한 소자들을 조절 가능한 방법으로 초기화하는 방법에 관해서는 아직 의문으로 남아있다. Legoas 등은 이러한 시스템의 초기화는 내부에 금속을 포함하는 반도체 나노튜브 혹은 외부 반도체 나노튜브를 사용하여, 전하 주입을 통한 외부 전계의 공급 혹은 여러 자기력장의 공급을 통해 이루어질 수 있음을 연구하였다. 그러나 그들은 이러한 조건 하에서는 분자 동역학 시뮬레이션을 수행하지 않았다. 본 논문의 목적은 원자 단위 시뮬레이션 방법을 통하여 칼슘 이온을 포함하는 내부의 나노튜브와 바깥쪽 나노튜브로 이루어진 탄소 나노튜브 진동자의 유용성을 밝히는 것이다.

2. 분자동역학방법

문헌들 중에는 아직 흑연판 삽입 화합물 내에서의 전하 이동[5]에 관한 논쟁이 아직 있지만, 칼슘이 존재하는 합성 조건 하에서 바로 형성된다고 알려져 있는 칼슘을 포함한 풀러렌에서, 본 연구에서는 칼슘 원자의 전하가 풀러렌 shell로 완전히 이동한다고 가정하였다[6]. 또한 본 연구에서는 칼슘 원자의 전하가 완전히 단일벽 탄소 나노튜브로 이동한다고 가정하였다. Kwon 등[7]에 의한 논문에서, 칼슘을 포함한 풀러렌의 이온화 전위는 흑연판의 일함수보다 작으므로, 풀러렌은 흑연판의 외부 캡슐로 초과 전자를 쉽게 이동시킬 것이라고 사료되었다. 초과 전자는 bucky shuttle 메모리를 유지하는 흑연판 구조로 더욱 이동하고 포함된 K^+ 이온은 풀러렌의 본질을 변화시키지 않기 때문에, Kwon 등은 중성인 C_{480} 안에 든 $K@C_{60}^+$ 이온의 동역학을 C_{60} shell 전체에 $+1e$ 의 고정 전하가 고르게 분포한다는 가정 하에 모델화 하였다. 본 연구에서는 칼슘 원자로부터 탄소 나노튜브로 이동하는 전자들은 제안된 시스템을 유지해주는 구조로 움직인다고 가정한다. 그러므로, 모든 탄소 원자들은 중성으로 생각하였다. 외부 전계가 시스템에 가해졌을 때, 포함된 K^+ 이온들만이 가속되었다.

본 연구에서는 SD와 분자동역학 방법 모두를 사용하였다. 여기서 쓰인 분자 동역학 방법은 기존의 알려진 방법들을 기초로 이용하여 사용하였다. 본 연구에 쓰인 MD 코드에는 velocity Verlet 알고리즘을 사용하였고, Gunsteren-Berendsen thermostat를 사용하여 온도를 제어하고, 계산 효율을 높이기 위해 인접원자 목록(neighbor list)을 채택하였으며, MD time step은 5×10^{-4} ps 이다.

3. 시뮬레이션 및 해석 결과

바깥쪽 탄소 나노튜브에서, 양쪽 끝이 닫혀있는 탄소 나노튜브를 만들기 위해서, Bandow 등[8]에 의해 개발된 기술로부터 금속 이온을 포함한 탄소 나노튜브를 만들 수 있다. 이것은 단일벽 탄소 나노튜브 안에서 발생하는 풀러렌 분자들의 체인으로부터 이중벽 탄소 나노튜브가 만들어질 수 있다는 것을 보여주었다. 단일벽 탄소 나노튜브 안에 든 풀러렌 분자들은 800 도까지는 변하지 않고 남아있다. 1200 도를 넘어서까지 가열되면 풀러렌 분자들이 서

로 융합하여 결국 풀러렌 분자들은 양쪽 끝이 닫힌 탄소 나노튜브로 변환된다. Luzzi와 Smith는 캡슐 안에 든 풀러렌이 100 keV 전자 빔에 의해 융합되는 것을 보여줬다. Zhao와 그의 동료들은 고전적인 분자 동역학 시뮬레이션을 사용하여 풀러렌 분자들의 융합에 관한 위상 기하학과 에너지학을 보여주었고, Kim 등은 두 개의 풀러렌 분자의 융합 동역학을 보여주었다. 본 연구에서 쓰인 풀러렌 사이의 분자간 거리는 9.6 Å 이고 풀러렌의 평균 지름은 7.13 Å 이다. 풀러렌들의 융합은 (5,5), (10,10), (12,0), (6,6) 등과 같은 것을 형성할 수 있다. 본 연구에서 바깥쪽 탄소 나노튜브는 (10,10) 이기 때문에, (5,5) 탄소 나노튜브가 가장 안정한 안쪽 탄소 나노튜브이고 격자 상수 $c=2.49$ Å 이다. 그러므로 안쪽 (5,5) 탄소 나노튜브의 길이는 풀러렌 분자들의 연속적인 체인 길이의 78.5 % 이다. 바깥쪽 탄소 나노튜브의 안쪽에 $nM^{qt}@CNT$ 는 그림 1(c)와 1(d)에 보이는 바와 같이 외부 전계를 가함으로써 초기화될 수 있다. 그러므로 본 연구에서의 기술은 Cumings와 Zettl과 Zheng 과 Jiang에 의해 사용된 것과는 다르다. 본 연구에서는, 안쪽 탄소나노튜브에 칼슘이온이 포함되어 있다고 가정하였는데 이는 $K^+ @C_{60}$ 이 가장 간단한 endo-fullerene 중의 하나이기 때문이다[9]. 그림 1(b)에서 안쪽 탄소 나노튜브의 지름은 바깥쪽 탄소 나노튜브 지름에 의해 조절이 될 수 있으므로, 반도체 탄소 나노튜브 오실레이터는 그림 1(a)에서와 같이 적당한 바깥쪽 탄소 나노튜브가 사용될 때 얻어질 수 있다.

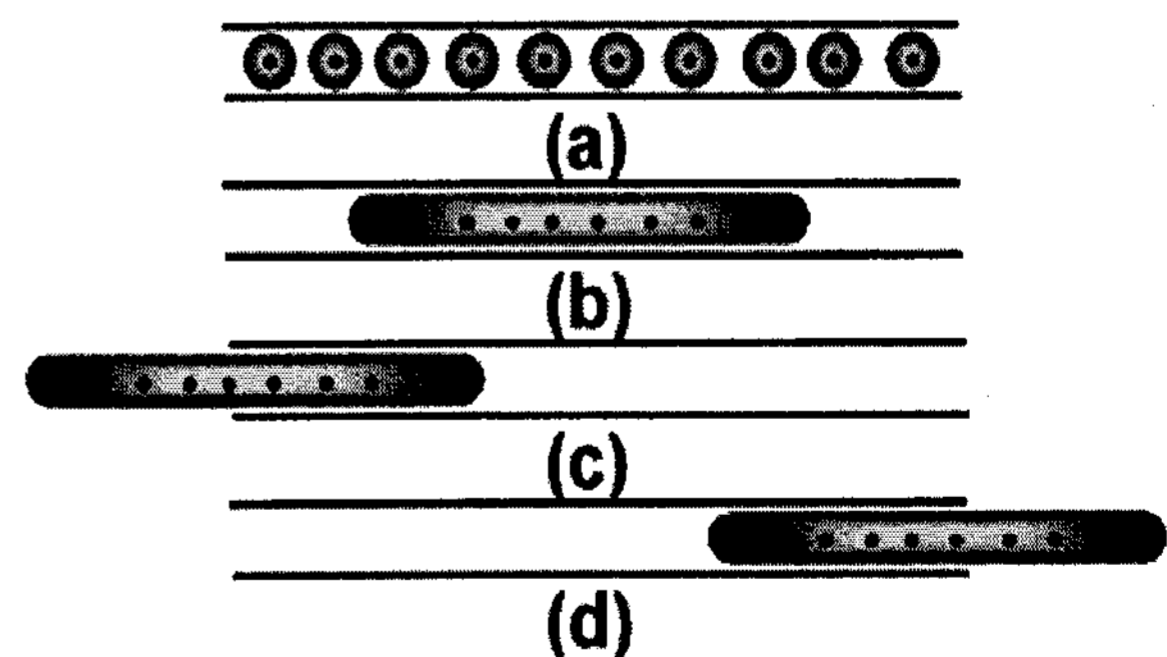


그림 1. 바깥쪽 탄소 나노튜브 내부의 $nM^{qt}@CNT$ 합성을 위한 모델 개요도 (a) 바깥쪽 탄소 나노튜브 내부로 $M^{qt}@C_n$ metallofullerene을 포함시켜서 $n(M^{qt}@C_n)$ peapod 만들기 (b) 고온 어닐링 혹은 전자빔 방사와 같은 풀러렌 합성 기술을 사용하여 바깥쪽 탄소 나노튜브 안쪽에 $nM^{qt}@CNT$ 오실레이터 합성. (c,d) 외부 전계에 의한 기가 헤르쯔 진동자의 초기화 가능성을 보여줌.

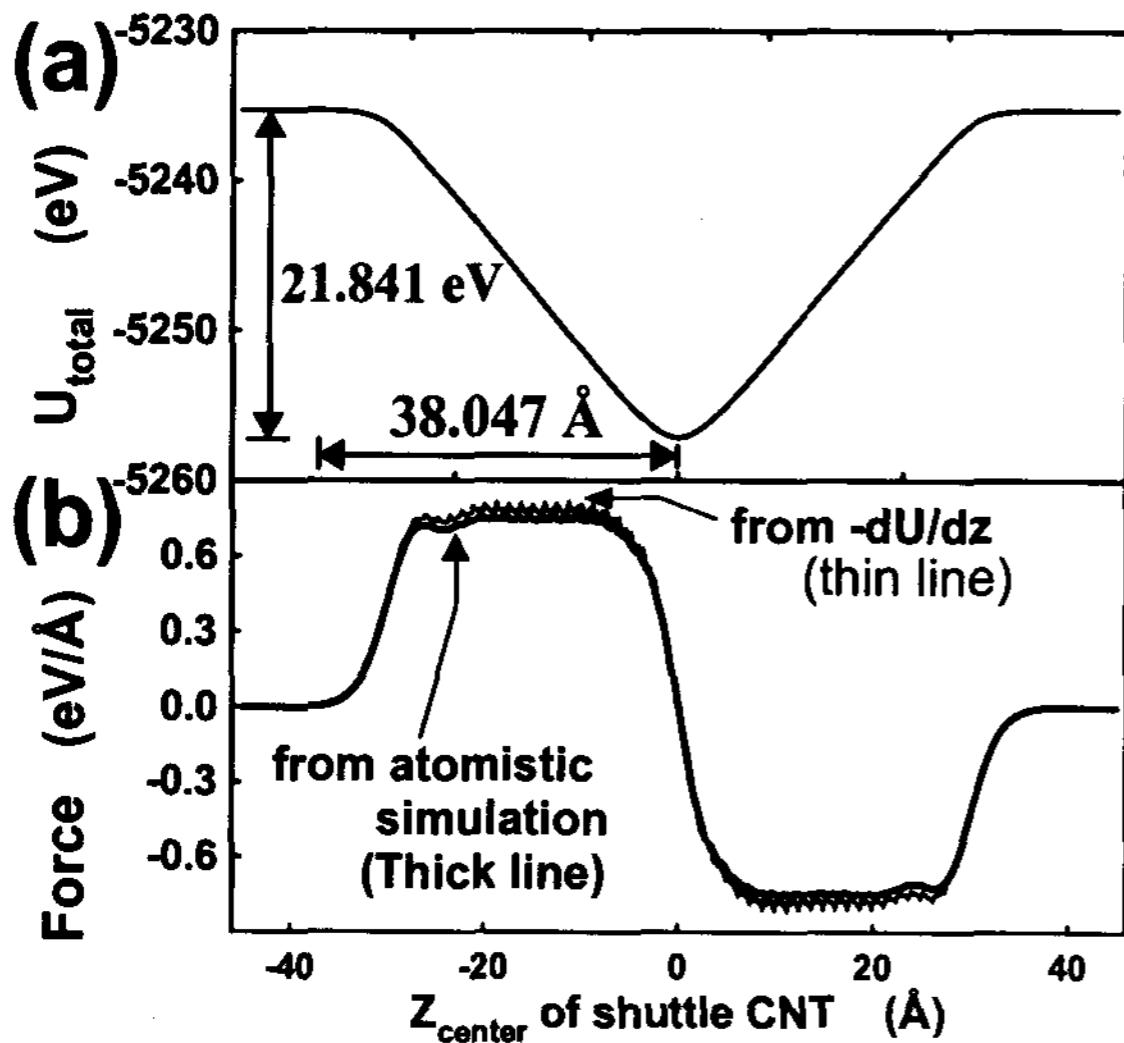


그림 2. 튜브 축에 따른 Z_{center} 의 함수인 $7K^+@CNT$ 오실레이터에 미치는 (a) 시스템의 U_{total} 과 (b) F_{vdw} . 두꺼운 직선과 얇은 직선은 각각 SD 시뮬레이션에서 얻은 F_{vdw} 와 식(3)에서 얻은 F_{vdw} 값이다.

그림 2는 튜브 축을 따라 왕복하는 탄소 나노튜브의 Z_{center} 의 함수인 F_{vdw} 와 U_{total} 을 보여준다. 바깥쪽 탄소 나노튜브가 최대로 안쪽 탄소 나노튜브와 접칠 때, U_{total} 이 최소화된다. 왕복 탄소 나노튜브의 위치가 바깥쪽 탄소 나노튜브의 중심으로부터 멀어짐에 따라, 왕복 탄소 나노튜브에 미치는 힘은 안쪽과 바깥쪽 탄소 나노튜브 사이에 미치는 반데르 발스 반응에 의해 증가하였다. $7K^+@CNT$ 시스템의 복원 반데르 발스 힘 0.801 eV/Å (1.282 nN)은 속이 빈 탄소 나노튜브에 대한 분자 동역학 시뮬레이션으로부터 얻어진 0.8 nN 값과 유사하다. 초기에 $Z_{center} = 0$ 에 위치한 왕복 $7K^+@CNT$ 를 바깥쪽 탄소 나노튜브로부터 빠져나오게 하기 위해서는, ΔU 가 21.841 eV 이고 $Z_{center} = 0$ 에서 U_{total} 이 ΔU 의 99.99% 인 위치까지의 거리인 Δx 는 38.047 Å 이기 때문에, 일정한 힘 $F_{appl} \geq 0.574 \text{ eV/Å}$ 가 지속적으로 왕복 탄소 나노튜브에 공급되어야 한다. 위의 결과들은 속이 빈 탄소 나노튜브의 동작과 에너지학은 바인딩 에너지, 안에 포함된 이온들에 의해 증가된 질량, 연관된 충돌들을 제외하고는 $7K^+@CNT$ 시스템과 유사하다. $7K^+@CNT$ 진동자 시스템의 총 전위 에너지는 속이 빈 탄소 나노튜브 오실레이터 시스템 보다는 4.28 eV 만큼 낮다. $7K^+@CNT$ 진동자 시스템의 총 질량은 속이 빈 탄소 나노튜브의 그것보다 약간 무겁기 때문에, 속이 빈 탄소 나노튜브 셔틀의 주파수는 $7K^+@CNT$ 셔틀의 주파수보다 약간 높다.

최고값은 한 주기 동안 2.1% 감소하고, 계산된 F_r 은 F_{vdw} 가 1.282 nN 일 때 0.0275 nN 이다.

4. 결론

본 논문에서는 고전적인 분자 동역학 시뮬레이션을 사용하여 칼슘 이온들을 포함한 다중벽 탄소 나노튜브를 기반으로 한 기가 헤르쯔 진동자를 연구하였다. 탄소 나노튜브 오실레이터 안쪽에 포함된 칼슘 이온들은 외부에서 공급된 전계에 의해 가속될 수 있고 $nK^+@CNT$ 오실레이터로 구성된 기가 헤르쯔 진동자는 본 연구의 분자동역학 시뮬레이션에서 공급된 전계에 의해 초기화될 수 있었다. 탄소 나노튜브와 칼슘 이온 사이 혹은 칼슘 이온들끼리 연관된 충돌 등이 복원력 변동과 주파수와 같은 진동 역학에 영향을 미쳤다. 이러한 결과로부터 본 연구에서 제안된 $nM^q@CNT$ 가 제작이 가능할 것이며 이러한 시스템의 응용 범위는 나노 크기 영역의 진동자로부터, 기어, 임피던스 측정, 엔진, 스위치, 연료 분사 장치, 총알 등에 이를 수 있다고 예상된다.

참고문헌

- [1] P. R. Ashton, R. Ballardini, V. Balzani, M. Belohradsky, M. T. Gandolfi, D. Philp, L. Prodi, F. M. Raymo, M. V. Reddington, N. Spencer, J. F. Stoddart, M. Venturi, and D. J. Williams, "Self-Assembly, Spectroscopic, and Electrochemical Properties of [n]Rotaxanes", *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 118, No. 21, p. 4931, 1996.
- [2] J. Cumings and A. Zettl, "Low-Friction Nanoscale Linear Bearing Realized from Multiwall Carbon Nanotubes", *Science*, Vol. 289, p. 602, 2000.
- [3] L. Forro, "NANOTECHNOLOGY: Beyond Gedanken Experiments", *Science*, Vol. 289, p. 560, 2000.
- [4] W. Guo, Y. Guo, H. Gao, Q. Zheng, and W. Zheng, "Direct Measurement of Poloidal Long-Wavelength E×B Flows in the HT-7 Tokamak", *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 91, p. 125001, 2003.
- [5] M. S. Dresselhaus and G. Dresselhaus, "Intercalation compounds of graphite", *Adv. Phys.*, Vol. 51, p. 1, 2002.
- [6] Y. S. Li and D. Tomanek, "How free are encapsulated atoms in C60?", *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 221, p. 453, 1994.
- [7] Y. K. Kwon, D. Tomanek, and S. Iijima, "'Bucky Shuttle' Memory Device: Synthetic Approach and

Molecular Dynamics Simulations", Phys. Rev. Lett., Vol. 82, p. 1470, 1999.

- [8] S. Bandow, T Hiraoka, T Yumura, K Hirahara, H Shinohara and S Iijima, "Raman scattering study on fullerene derived intermediates formed within single-wall carbon nanotube: from peapod to double-wall carbon nanotube", Chem. Phys. Lett., Vol. 384, p. 320, 2004.
- [9] B. I. Dunlap, J. L. Ballester, and P. P. Schmidt, "Interactions between fullerene (C60) and endohedral alkali atoms", J. Phys. Chem., Vol. 96, p. 9781, 1992.