

삽입 가스의 부피 팽창을 이용한 탄소나노튜브 진동기

Carbon Nanotube Oscillator Operated by Thermal Expansion of Encapsulated Gases

권오근^{1,a}
(Oh Keun Kwon^{1,a})

Abstract

We investigated a carbon nanotube (CNT) oscillator controlled by the thermal gas expansion using classical molecular dynamics simulations. When the temperature rapidly increased, the force on the CNT oscillator induced by the thermal gas expansion rapidly increased and pushed out the CNT oscillator. As the CNT oscillator extruded from the outer nanotube, the suction force on the CNT oscillator increased by the excess van der Waals (*vdW*) energy. When the CNT oscillator reached at the maximum extrusion point, the CNT oscillator was encapsulated into the outer nanotube by the suction force. Therefore, the CNT oscillator could be oscillated by both the gas expansion and the excess *vdW* interaction. As the temperature increased, the amplitude of the CNT oscillator increased. At the high temperatures, the CNT oscillator escaped from the outer nanotube, because the force on the CNT oscillator due to the thermal gas expansion was higher than the suction force due to the excess *vdW* energy. By the appropriate temperature controls, such as the maximum temperature, the heating rate, and the cooling rate, the CNT oscillator could be operated.

Key Words : CNT oscillator, Nanoscale thermal expansion, Molecular dynamics, Atomistic simulation

1. 서론

나노미터 영역에서 동작하는 나노기계 설계 및 제작에 관한 기대가 최근의 나노기술의 현저한 발전으로 급격하게 커지고 있다[1,2]. 나노기계 동작에 관한 어려운 점은 제작의 어려움뿐만 아니라 통제 가능한 방법으로 움직임을 조절하는데 있다. 컴퓨터를 이용한 연구들은 이러한 어려움을 극복할 수 있도록 하는 새로운 기술 개발에 중요한 역할을 하여 왔다. 특별히, 분자동역학 (Molecular Dynamics) 방법은 이 분야에서 가장 중요한 역할을 하여왔다[3]. 분자동역학 방법을 이용하여, 나노

베어링에서부터 나노기어, 나노드릴, 나노모터, 나노오실레이터 등 다양한 나노기계의 설계 및 동작에 관한 연구가 진행되어 왔다[4-10].

최근 Comings와 Zettl[11]은 다중벽 탄소나노튜브에서 내부의 작은 반경 나노 튜브를 매우 낮은 마찰력을 가진 상태로 빼내는 것을 실험하였다. 내부 작은 반경 나노튜브를 빼내는 동안 탄소-탄소 사이의 반데르발스(*van der Waals; vdW*) 결합력에 의한 일정한 힘이 작용하였는데, 이는 작은 반경 나노튜브를 내부로 흡입하려는 방향이었다. 이러한 실험적 연구로부터, Zheng 와 Jiang[4]은 기가헤르쯔 영역에서 동작하는 그림 1과 같은 탄소나노튜브 진동기를 소개하였고, 분자동역학 방법을 사용하여 연구하였다. 이후 여러 연구 그룹에서 탄소나노튜브 진동기의 동작 및 특성에 관하여 분자동역학 방법을 통하여 연구하여왔다[5-10]. Legoas 등의 연구는[8,9] 탄소나노튜브 벽 사이의 거리가

1. 세명대학교 인터넷정보학부
(충북 제천시 신월동 21-1)
a. Corresponding Author : kok1027@semyung.ac.kr
접수일자 : 2005. 9. 29
1차 심사 : 2005. 10. 11
심사완료 : 2005. 10. 12

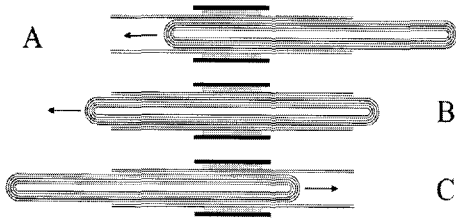


그림 1. 탄소나노튜브 진동기 기본 설계(참고문헌 4로부터).

Fig. 1. Basic schematics of carbon nanotube oscillator(From Ref. 4).

3.4 Å 영역일 때 가장 안정적으로 탄소나노튜브 진동기가 동작하는 것을 확인하였다.

그러나, 탄소나노튜브 진동기를 통제 가능한 방법으로 동작시키는 것에 관하여서는 거의 연구되어 있지 않은 실정이다. Legoas 등은[8,9] 외부의 전자기장에 의하여 동작 시킬 수 있다고 간략하게 기술하고 있을 뿐이며, Kang과 Hwang[10]의 연구에서는 탄소나노튜브 진동기 내부에 삽입된 이온에 외부 전계를 인가하여 동작 시킬 수 있다는 가정 하에 분자동력학 연구를 수행하였다. 탄소나노튜브 진동기는 정교한 기계적 조작을 통하여 동작될 수 있을 뿐만 아니라[11], 전자기장에 의하여 동작될 수 있을 것이다[8-10]. 실질적으로 탄소나노튜브 진동기를 활용하기 위해서는 접촉을 통한 정교한 기계적인 조작보다는 비접촉 동작 방식이 더욱 실용적이 될 것이다. 본 논문의 진동기 기본 구조는 접촉 형태를 하고 있지만 탄소나노튜브 진동기를 동작시키는 방식이 AFM 팁 등으로 직접 접촉을 통한 진동기 동작이 아닌 외부의 레이저나 광을 이용한 비접촉식 동작 방식을 제안한다.

따라서 본 논문에서는, 탄소나노튜브 진동기를 비접촉 방식으로 통제가 가능하도록 하는 방법을 제안하고, 이를 분자동력학 방법을 이용하여 탄소나노튜브 진동기의 동작 특성을 연구하였다. 탄소나노튜브 내부에 삽입된 가스나 액체의 부피 팽창을 이용하는 방법으로 이전에 제안된 적이 없는 방법이다.

2. 기체 팽창력을 이용한 나노튜브 진동기 동작의 기본 원리

그림 2는 본 논문에서 제안하는 탄소나노튜브

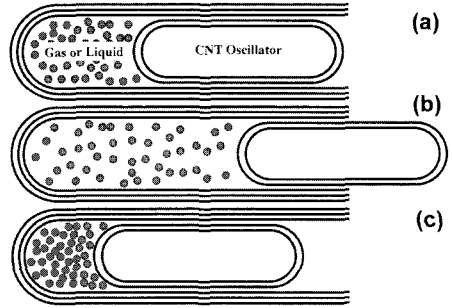


그림 2. 삽입 가스 부피 팽창으로 동작하는 탄소나노튜브 진동기의 개략적 개념도. (a) 초기 상태 (b) 외부에서 열에너지가 전달되었을 때, 내부의 기체가 팽창한 상태 (c) 탄소나노튜브 진동기가 반데르발스 힘에 의하여 다시 흡입되었을 때의 상태.

Fig. 2. Simple schematics for the CNT oscillator encapsulating gas or liquid. (a) Initially stable configuration, (b) CNT oscillator is outwardly moved by the thermal expansion of the gases, (c) CNT oscillator inwardly moves and then, the CNT oscillator compresses the encapsulated gases.

진동기 동작의 기본 원리이다. 그림 1(a)는 탄소나노튜브 내부에 가스가 삽입된 초기 상태를 보여준다. 이때 외부에서 에너지를 공급할 경우, 내부의 삽입된 가스의 급격한 부피 팽창은 탄소나노튜브 진동기를 밖으로 밀어내는 방향으로 힘(F_{gas})이 작용하게 되어 그림 1(b)와 같이 된다. 탄소나노튜브 진동기가 외부 나노튜브를 빠져나가려고 할 때, 반데르발스 흡입력($F_{suction}$)에 의하여 나노튜브 진동기는 다시 흡입되게 되어 그림 1(c)와 같이 된다. 흡입된 나노튜브 진동기는 다시 내부의 가스에 압력을 가하게 되고, 따라서 다시 탄소나노튜브 진동기는 밖으로 향하는 힘을 받게 된다. 따라서 나노튜브 진동기는 그림 1(b)와 그림 1(c)의 상태를 반복하게 된다.

3. 연구 방법

2절에서 설명한 탄소나노튜브 진동기의 기본 동작 원리를 확인하기 위하여, (10,10)-(5,5) 이중벽(double-wall) 탄소나노튜브를 가지고 분자동력학

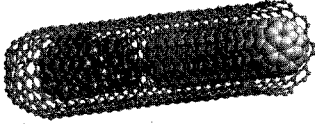


그림 3. 본 논문의 전산모사를 위한 99개 칼륨 원자를 포함하고 있는 (10,10)-(5,5) 이중벽 탄소나노튜브.

Fig. 3. (10,10)-(5,5) double-walled CNT encapsulating potassium cluster.

전산모사를 수행하였다. 외곽의 (10,10) 나노튜브의 오른쪽 끝은 열려있으며, 내부의 (5,5) 나노튜브의 양쪽 끝은 모두 닫혀있다. 칼륨이 삽입된 탄소나노튜브에 관한 연구는 활발히 연구되어왔으므로 [12,13], 본 논문에서는 내부에 삽입된 가스를 칼륨으로 고려하였다. 외곽의 65 Å 길이 (10,10) 나노튜브는 1050개 탄소원자로 구성되었으며, 내부의 23 Å 길이 (5,5) 나노튜브는 270개 탄소원자로 구성되었다. 내부에 삽입된 칼륨 원자는 99개 이다. 그림 3은 본 논문에서 전산모사된 원자구조이다.

탄소와 탄소 사이의 σ 결합력을 계산하기 위해서는 Tersoff-Brenner 전위 함수[14-16]를 사용하였으며, 탄소와 탄소 사이의 반데르발스 힘을 계산하기 위해서는 Lennard-Jones 12-6 전위 함수[17]를 사용하였으며, 이때 $\sigma_{cc} = 3.37$ Å과 $\epsilon_{cc} = 4.2038 \times 10^{-3}$ eV이다. 칼륨과 칼륨, 칼륨과 탄소 사이 상호작용력은 Goddard 등에 의해 개발되어 탄소 풀러렌에 삽입된 칼륨 연구에 이용되어 온 force field 방법을 적용하였다[18-20].

안정된 원자위치 및 운동을 계산하기 위해서 분자역학 (Molecular Mechanics) 와 분자동력학 (Molecular Dynamics) 방법들이 이용되었다. 분자역학계산을 위해서는 최경사법(Steepest Descent Method)가 적용되었으며, 분자동력학 계산을 위해서는 속도 Verlet 알고리즘과 온도 조절을 위해서는 Gunsteren-Berendsen 방법이 사용되었다. 속도 향상을 위해서는 이웃원자목록(Neighbor list) 방법이 적용되었으며, 분자동력학 timestep은 5×10^{-4} ps 이었다.

4. 결과 및 고찰

먼저 탄소나노튜브에 작용하는 반데르발스 힘의 크기를 계산하였다. 내부에 삽입된 칼륨이 없이 탄

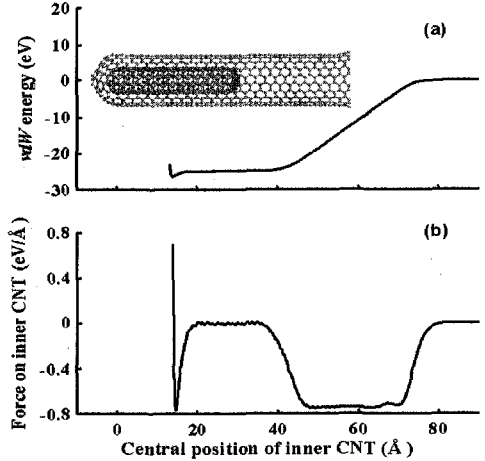


그림 4. 탄소나노튜브 진동기의 중심 위치(P_{CNT})의 함수로써 (a) 반데르발스 에너지와 (b) 반데르발스 힘의 변화.

Fig. 4. The vdW energy (a) and the force (b) on CNT oscillator as a function of the central position of the inner CNT (P_{CNT}) obtained from the SD simulations.

소나노튜브 진동기의 위치 변화에 따른 반데르발스 에너지와 힘을 계산하였다. 그림 4는 분자역학 방법으로 계산된 탄소나노튜브 진동기의 위치 (P_{CNT})에 따른 반데르발스 에너지와 힘($F_{suction}$)을 보여준다. 탄소나노튜브 진동기는 외부나노튜브의 캡에서 가장 안정하였으며, 계산된 반데르발스 힘은 $F_{suction} = 0.767392$ eV/Å 으로 이전 다른 연구자들의 연구에서 얻어진 값과 잘 일치하였다 [21-23]. $F_{suction}$ 는 탄소나노튜브 진동기의 배출로부터 기인된 증가하는 반데르발스 에너지로부터 유도된 것으로, 탄소나노튜브 진동기를 흡입하는 방향으로 작용된다.

그림 3의 구조를 먼저 분자역학방법으로 구조이완시킨 다음, 10 K 에서 50 ps 동안의 분자동력학 전산모사로 안정화 시켰다. 이후 100 K 이상의 온도에서 분자동력학 전산모사를 수행하였다. 온도는 원자 속도 재계산(velocity scaling) 방법으로 급격하게 증가시켰다. 급격한 온도 증가는 삽입된 칼륨의 부피 팽창을 만들었다. 그림 5는 시간과 온도에 따른 P_{CNT} 변화를 보여준다. 10 K 에서의 분자동력학 전산모사에서는 탄소나노튜브의 진동을 관찰할 수 없었으나, 100 K 이상의 분자동력학 전

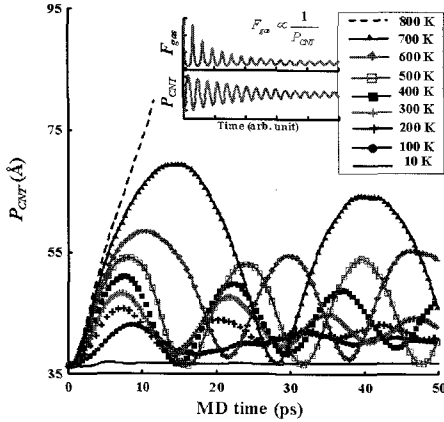


그림 5. 온도와 시간에 따른 P_{CNT} 변화들. 내부 그림은 식 (4)의 F_{gas} 와 P_{CNT} 사이의 관계.
 Fig. 5. P_{CNT} plots as functions of the MD time and temperature. The inner graphs show the plots for Eq. (4).

산모사에서는 탄소나노튜브 진동기의 주기적인 파형을 관찰 할 수 있었다. 온도가 증가할수록 P_{CNT} 의 진폭은 증가하였으며, 800 K에서의 분자동력학 전산모사에서는 F_{gas} 가 $F_{suction}$ 보다 더 커서 탄소나노튜브 진동기가 외부 나노튜브를 완전히 빠져 나왔다.

일정한 온도 분자동력학 전산모사 조건에서, 나노튜브를 고려할 때 가스압(P_{gas})은 가스부피(V_{gas})의 역수에 거의 선형으로 비례하므로,

$$P_{gas} \propto \frac{1}{V_{gas}} \quad (1)$$

이때 P_{gas} 는 다음과 같이 근사화 될 수 있다.

$$P_{gas} \approx \frac{F_{gas}}{S_{CNT}}, \quad (2)$$

여기서 F_{gas} 는 가스 부피팽창으로 유도된 탄소나노튜브 진동기에 미치는 힘이며 S_{CNT} 는 탄소나노튜브 진동기의 단면적이다. l 이 각 온도에서 평형 상태에서의 가스가 차지하는 부피의 길이라고 하면, V_{gas} 는 근사적으로 $V_{gas} \approx S_{CNT} \cdot l$ 이다. 그러므로 식 (1)과 식 (2)로부터, F_{gas} 와 l 사이의 관계는 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$F_{gas} \propto \frac{1}{l} \quad (3)$$

식(3)은 본 논문의 데이터와 관련하여 탄소나노튜브 진동기의 중심점(P_{CNT})을 사용하여 다음과 같이 다시 표현될 수 있다.

$$F_{gas} \propto \frac{1}{P_{CNT}} \quad (4)$$

그림 5의 내부 그림은 식 (4)를 개략적으로 보여준다.

그림 6(a)-(d)는 500 K 분자동력학 전산모사에서 시간에 따른 P_{CNT} , vdW 에너지, 탄소나노튜브 진동기의 운동에너지 ($E_{k,CNT}$) 및 F_{gas} 의 변화를 보여준다. F_{gas} 는 칼럼과 탄소나노튜브 진동기 사이의 상호작용으로부터 유도된 힘을 가리킨다. 그림 6을 위한 초기 구조는 10 K에서 50 ps 동안의 분자동력학 전산모사로부터 얻어졌다. 원자속도는 온도가 500 K가 되도록 속도 재계산 방법으로 급격하게 상승시켰다. P_{CNT} 와 F_{gas} 변화는 식 (4)와 잘 일치하였다. 그림 6(a)는 탄소나노튜브 진동기의 운동이 점차적으로 감소하는 것을 보여주며, 150 ps 이후 안정화된 것을 알 수 있다. 온도가 10 K에서 500 K로 급격하게 증가할 때, F_{gas} 또한 급격하게 증가하며, 이때 $E_{k,CNT}$ 도 증가하였다. 따라서, 가스의 부피 팽창은 탄소나노튜브 진동기를 밀어냈고, 이때 반데르발스 에너지와 P_{CNT} 는 함께 증가하였다. 그림 4에서 관찰한 바와 같이 P_{CNT} 가 36 Å보다 커지게 되면, 반데르발스 흡입력 $F_{suction}$ 이 탄소나노튜브 진동기에 유도되어 탄소나노튜브 진동기에 작용하는 총 힘(F_{CNT})은 $F_{gas} + F_{suction}$ 가 된다. F_{gas} 가 가스 부피팽창 이후 급격하게 감소하는 반면에 $F_{suction}$ 는 그림 4에서 관찰한 바와 같이 거의 일정하게 유지된다. P_{CNT} 가 최고점에 도달한 이후, 탄소나노튜브 진동기는 다시 외부 나노튜브 안쪽으로 흡입된다. 그러므로, 탄소나노튜브 진동기 시스템의 온도를 700 K 이하에서 일정하게 유지할 때, 탄소나노튜브 진동기의 진동하는 현상을 관찰 할 수 있었다.

이전의 분자동력학 전산모사 연구에서[7], 짧은 외부 탄소나노튜브를 가지는 탄소나노튜브 진동기의 경우, 외부 나노튜브 가장자리에서의 탄소나노튜브 진동기의 흔들림 현상이 가장 중요한 에너지 손실 메커니즘이다. 상대적으로 긴 외부 탄소나노튜브를 가지는 탄소나노튜브 진동기의 경우, 운동

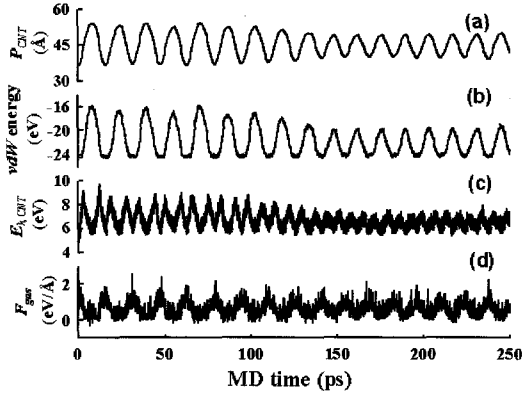


그림 6. 500 K에서 시간에 따른 (a) P_{CNT} , (b) vdW 에너지, (c) 탄소나노튜브 진동기의 운동에너지 ($E_{k,CNT}$) 및 (d) F_{gas} 의 변화.
 Fig. 6. (a)-(d) show P_{CNT} , the vdW energy, the kinetic energy of the CNT oscillator ($E_{k,CNT}$), and F_{gas} of the CNT oscillator system as a function of MD time at 500 K, respectively.

에너지는 대부분 탄소나노튜브 진동기의 병진운동 동안에 외부 탄소나노튜브의 진동모드에 따른 마찰에 의하여 손실된다. 본 연구에서는 짧은 외부 탄소나노튜브를 사용하였기 때문에, 시스템 전체에 700 K 이상의 온도를 일정하게 유지할 경우, 탄소나노튜브 진동기는 시스템을 빠져나갔다. 만약, 긴 외부 탄소나노튜브를 사용한다면, 탄소나노튜브 진동기가 병진 운동하는 동안 대부분의 운동 에너지를 손실하기 때문에, 탄소나노튜브 진동기는 본 연구에서 얻어진 온도보다 더 높은 온도에서도 시스템을 빠져나가지 못할 것이다.

이어서 본 논문에서는 부피 팽창에 따른 탄소나노튜브 진동기의 임펄스 응답 (Impulse response)을 전산모사 하였다. 시스템의 초기 구조는 10 K에서 50 ps 동안의 분자동력학 전산모사로 얻어졌다. 임펄스 모양의 열에너지는 레이저 또는 광의 매우 짧은 시간의 노출을 통하여 전달할 수 있다. 열에너지는 0.5 ps 동안 원하는 온도까지 증가하고, 이어서 1 ps 나 2.5 ps 동안 일정하게 유지된 다음에, 열에너지는 점차적으로 감소하도록 하였다. 상온에서의 좀 더 실제적인 분자동력학 전산모사를 위해서는, 위에서 논의 된 것처럼 긴 외부 탄소나노튜브를 가지는 탄소나노튜브 진동기를 사용하면 가능할 것이다. 칼륨의 운동에너지($E_{k,gas}$)가 증가할 때, 외부 탄소나노튜브의 운동에너지도 증

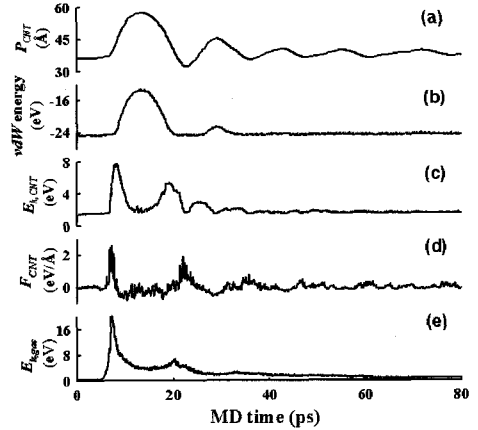


그림 7. 1 ps 동안의 1500 K 임펄스에 대한 탄소나노튜브 진동기의 응답 특성. 시간에 따른 탄소나노튜브 진동기의 (a) P_{CNT} , (b) vdW 에너지, (c) $E_{k,CNT}$, (d) F_{CNT} 및 (e) $E_{k,gas}$ 의 변화.

Fig. 7. Impulse response for 1500 K during 1 ps, (a)-(e) show P_{CNT} , vdW energy, $E_{k,CNT}$, F_{CNT} , and $E_{k,gas}$ of the CNT oscillator system as function of the MD time, respectively.

가한다. 그러나 외부 탄소나노튜브의 열에너지는 그것을 붙잡고 있는 연결 보조대(guide)나 접촉점(contact)을 통하여 전달될 것이다. 본 연구에서는 짧은 외부 나노튜브를 사용하였기 때문에, 가스의 부피 팽창에 의한 탄소나노튜브 진동기의 안정적인 동작은 매우 낮은 온도에서 관찰된다. 그러므로 외부 탄소나노튜브와 연결된 접촉점은 10 K로 유지되고 있다고 가정하였다. 그러므로, 외부 탄소나노튜브의 열에너지는 Gunsteren-Berendsen 방법을 사용하여 10 K에 도달할 때까지 계속적으로 감소되었다. 이러한 방법으로 얻어진 열전달율(heat transfer rate, H)은 10^5 W에서 10^7 W 영역이며, 이때 평균 열전도상수(thermal conductivity, k)는 530 W/m K이다. 탄소나노튜브의 열전달율(H)이 3000 W/m K[24]인 것을 고려할 때, 탄소나노튜브를 통하여 20 eV의 열에너지가 전달되는데 걸리는 시간은 본 연구의 탄소나노튜브 구조에서 대략 10 ps 정도이다. 그러므로, 본 연구의 전산모사에서 열에너지 임펄스 사이의 간격은 10 ps 이상이 되도록 하였다.

그림 7은 온도가 1500 K에서 1 ps 동안 유지되었을 때의 임펄스 응답을 보여준다. 그림 7(a)-(e)

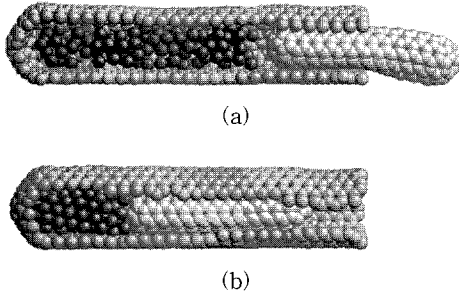


그림 8. (a) 그림 7(a)에서 P_{CNT} 가 최고점에 도달한 시점인 13.5 ps 에서의 원자구조. (b) P_{CNT} 가 최소점에 도달한 시점인 22.5 ps 에서의 원자구조.

Fig. 8. (a) and (b) show the atomic structures at 13.5 ps for the first peak of the P_{CNT} and 22.5 ps for the lowest value of the P_{CNT} respectively, in Fig. 7(a).

는 시간에 따른 P_{CNT} , vdW 에너지, $E_{k,CNT}$, F_{CNT} 및 $E_{k,gas}$ 의 변화를 보여준다. $E_{k,gas}$ 가 증가할수록, F_{CNT} 는 증가하고, 이때 $E_{k,CNT}$ 또한 증가한다. 그리고 최종적으로 탄소나노튜브 진동기는 칼럼 부피 팽창에 의하여 초기화 된다. 따라서 그림 7(a)의 P_{CNT} 변화에서 탄소나노튜브 진동기의 진동을 확인 할 수 있다. 탄소나노튜브 진동기의 진동은 그림 7(b)의 반데르발스 에너지 변화에서도 관찰할 수 있다. 그림 8(a)는 그림 7(a)에서 P_{CNT} 가 최고점에 도달한 시점인 13.5 ps 에서의 원자구조를 보여주며, 그림 8(b)는 P_{CNT} 가 최소점에 도달한 시점인 22.5 ps 에서의 원자구조를 보여준다. 그림 8로부터, 삽입된 칼럼의 팽창 및 압축을 관찰할 수 있다. 그림 8(a)는 탄소나노튜브 진동기가 외부 탄소나노튜브는 빠져나온 후 흔들거리는 운동을 하는 것을 분명히 보여주고 있다. 그림 9는 열에너지 임펄스의 온도와 시간에 따른 P_{CNT} 변화들을 보여준다. 임펄스는 1 ps 동안 지속되었다. 온도가 2000 K 이하일 경우, 탄소나노튜브 진동기는 초기화 될 수 있었다. 그러나 온도가 2000 K를 넘어섰을 때, 칼럼의 부피 팽창으로 유도된 힘은 탄소나노튜브 진동기를 외부 탄소나노튜브로부터 완전히 배출시켰다.

그림 8(a)에서 보여진 것과 같이, 탄소나노튜브 진동기가 외부 탄소나노튜브의 가장자리에서 흔들거리는 움직임으로 인해 에너지가 손실되기 때문에, 탄소나노튜브 진동기의 진동폭은 시간이 지남에 따라서 점차 감소하게 된다. 이러한 P_{CNT} 의

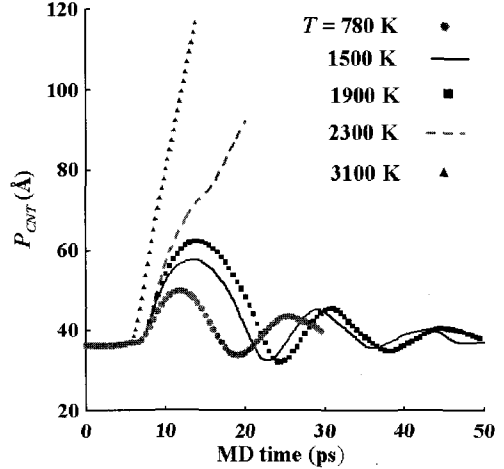


그림 9. 시간과 임펄스 온도에 따른 P_{CNT} 변화들. Fig. 9. P_{CNT} plots as functions of the MD time and the impulse temperatures.

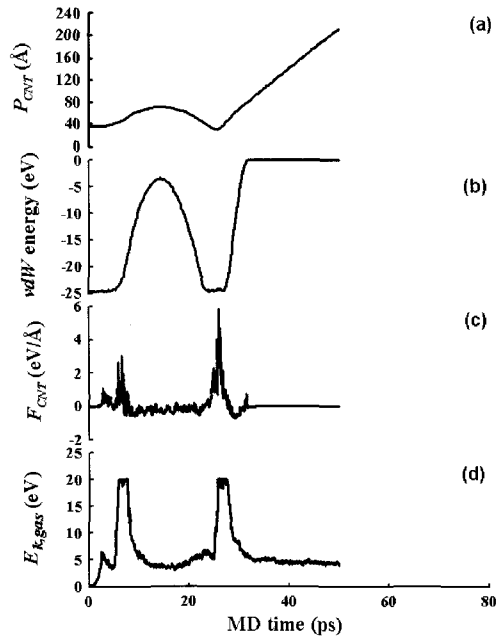


그림 10. 2.5 ps 동안의 1500 K 임펄스가 20 ps 간격으로 작용하였을 때의 (a) P_{CNT} , (b) vdW 에너지, (c) F_{CNT} 및 (d) $E_{k,gas}$ 의 변화.

Fig. 10. (a)-(d) show P_{CNT} , the vdW energy, F_{CNT} , and $E_{k,gas}$ of the CNT oscillator system as function of the MD time, respectively.

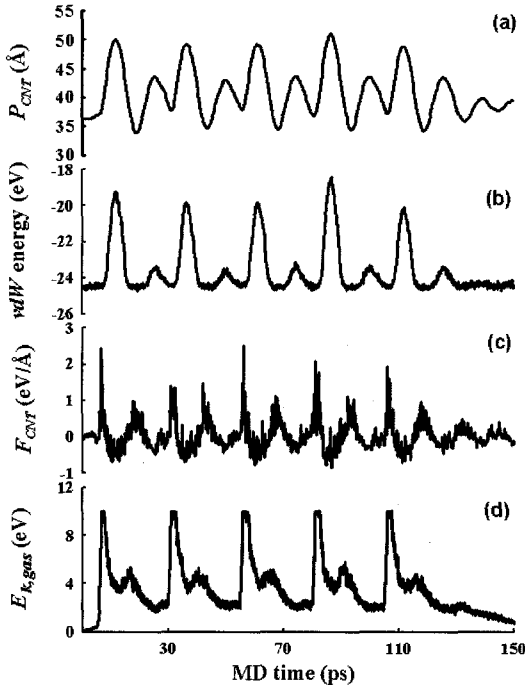


그림 11. 2.5 ps 지속되는 780 K 임펄스가 25 ps 간격으로 작용하였을 때 (a) P_{CNT} , (b) vdW 에너지, (c) F_{CNT} 및 (d) $E_{k, gas}$ 의 변화.

Fig. 11. (a)-(d) show P_{CNT} , the vdW energy, F_{CNT} , and $E_{k, gas}$ of the CNT oscillator system as a function of the MD time, respectively, when the impulses of 2.5 ps with 780 K were applied to the encapsulated potassium with the interval of 25 ps.

진폭의 감소는 그림 7과 그림 9에서 찾아볼 수 있다. 위에서 논의된 것처럼, 탄소나노튜브의 흔들림에 의한 에너지 손실은 이전 논문들에서 연구되었다[7,10].

또한 본 논문에서는 연속적인 임펄스에 의한 탄소나노튜브 진동기의 동작을 분자동력학 전산모사로 연구하였다. 2.5 ps 동안 1500 K 를 유지하는 임펄스들이 20 ps 간격으로 작용하였다. 이런 조건에서 탄소나노튜브 진동기는 두 번째 임펄스 때에 시스템으로부터 벗어났다. 그림 10(a)-(d)는 시간에 따른 P_{CNT} , vdW 에너지, F_{CNT} 및 $E_{k, gas}$ 의 변화를 보여준다. 첫 번째 임펄스에 의하여 탄소나노튜브 진동기는 거의 20 ps 정도의 주기를 가지는

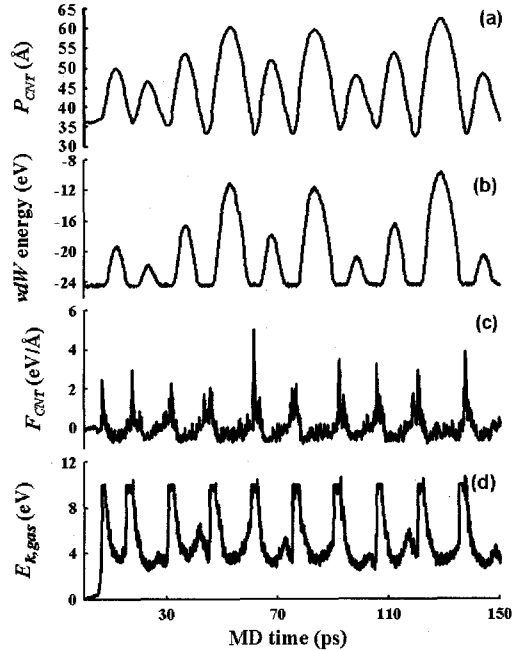


그림 12. 2.5 ps 지속되는 780 K 임펄스가 15 ps 간격으로 작용하였을 때 (a) P_{CNT} , (b) vdW 에너지, (c) F_{CNT} 및 (d) $E_{k, gas}$ 의 변화.

Fig. 12. (a)-(d) show P_{CNT} , the vdW energy, F_{CNT} , and $E_{k, gas}$ of the CNT oscillator system as a function of the MD time, respectively, when the impulses of 2.5 ps with 780 K were applied to the encapsulated potassium with the interval of 15 ps.

진동으로 초기화되었으며, 두 번째 임펄스가 인가되기 바로 직전에 칼륨은 압축된 상태로서 탄소나노튜브 진동기를 밖으로 향하는 힘이 가하고 있는 상태이었다. 그때 두 번째 임펄스가 인가되자 그림 10(c)와 같이 탄소나노튜브는 첫 임펄스 때보다 더 큰 힘을 받게 되어, 시스템을 벗어나게 되었다. 따라서, 탄소나노튜브 진동기를 안정적으로 진동시키기 위해서는 임펄스의 온도 및 주파수가 주의 깊게 고려되어야 하는 것을 알 수 있다.

따라서, 그림 10의 경우에서보다 더 낮은 온도인 780 K를 가지는 임펄스의 경우에 대하여 전산모사를 수행하였다. 첫 임펄스는 탄소나노튜브 진동기를 초기화하기 위하여 1 ps 동안 작용하였다.

그림 11(a)-(d)는 2.5 ps 지속되는 780 K 임펄스가 25 ps 간격으로 인가될 때의 시간에 따른 P_{CNT} , udW 에너지, F_{CNT} 및 $E_{k,gas}$ 의 변화를 보여준다. 그림 12(a)-(d)는 2.5 ps 지속되는 780 K 임펄스가 15 ps 간격으로 인가되었을 때 시간에 따른 P_{CNT} , udW 에너지, F_{CNT} 및 $E_{k,gas}$ 의 변화를 보여준다. 그림 11과 12는 비록 진동이 일정하지는 않지만, 탄소나노튜브 진동기의 계속적인 진동을 보여준다. 일정한 주파수에서 탄소나노튜브 진동기를 동작시키기 위해서는 정확하게 조절된 임펄스 온도, 지속 시간, 주파수가 선택되어야 될 것이다.

5. 요약 및 결론

향후 나노 기계의 핵심 부품이 될 것으로 예상되는 탄소나노튜브 진동기를 비접촉 방식으로 동작시키기 위한 방법으로, 본 논문에서는 탄소 나노튜브 내부에 삽입된 칼럼의 부피 팽창을 이용한 탄소나노튜브 진동기의 동작 특성을 분자동력학 전산모사를 통하여 연구하였다. 온도의 급격한 증가로 인한 가스의 부피 팽창은 탄소나노튜브 진동기에 힘을 전달하여 탄소나노튜브 진동기를 바깥쪽으로 밀어낸다. 이때 탄소나노튜브 진동기가 외부 탄소나노튜브를 점점 더 벗어남에 따라서 반테르발스 힘에 의하여 다시 흡입되는 방향으로 힘이 작용하게 된다. 이러한 팽창력과 흡입력의 조화 속에서 탄소나노튜브 진동기는 진동하게 된다. 시스템의 온도를 통제할 수 있으면, 탄소나노튜브 진동기의 동작을 조절할 수 있으며, 온도가 증가할수록 탄소나노튜브 진동기의 진동폭이 증가하는 반면에, 온도가 너무 높은 경우에 탄소나노튜브 진동기는 시스템을 벗어나게 된다. 그러므로, 삽입된 물질, 삽입된 물질의 부피, 온도 조절 등은 본 논문에서 연구된 탄소나노튜브 진동기의 동작을 위하여 매우 중요한 변수가 된다. 임펄스 형태의 열에너지 전달은 짧은 시간의 레이저 또는 광에 노출시킴으로써 실현될 수 있어 실험적 증명이 이루어 질 수 있을 것으로 기대되며, 향후 나노 기계 동작에 응용될 수 있을 것으로 기대된다.

참고 문헌

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

- [2] R. P. Feynman, "There is plenty of room at the bottom", Eng. Sci., Vol. 23, p. 22, 1960; R. P. Feynman, "There is plenty of room at the bottom", J. Microelectromech. Syst., Vol. 1, No. 1, p. 60, 1992.
- [3] B. C. Crandall and J. Lewis, "Nanotechnology: Research and Perspectives", MIT, Cambridge, p. 13, 1992.
- [4] Q. Zheng and Q. Jiang, "Multiwalled carbon nanotubes as gigahertz oscillators", Phys. Rev. Lett., Vol. 88, No. 4, p. 045503, 2002.
- [5] Q. Zheng, J. S. Liu, and Q. Jiang, "Excess van der Waals interaction energy of a multiwalled carbon nanotube with an extruded core and the induced core oscillation", Phys. Rev. B, Vol. 65, No. 24, p. 245409, 2002.
- [6] W. Guo, Y. Guo, H. Gao, Q. Zheng, and W. Zheng, "Energy dissipation in gigahertz oscillators from multiwalled carbon nanotubes", Phys. Rev. Lett., Vol. 91, No. 12, p. 125501, 2003.
- [7] Y. Zhao, C. C. Ma, G. Chen, and Q. Jiang, "Energy dissipation mechanisms in carbon nanotube oscillators", Phys. Rev. Lett., Vol. 91, No. 17, p. 175504, 2003.
- [8] S. B. Legoas, V. R. Coluci, S. F. Braga, P. Z. Coura, S. O. Dantas, and D. S. Galvão, "Molecular-dynamics simulations of carbon nanotubes as gigahertz oscillators", Phys. Rev. Lett., Vol. 90, No. 5, p. 055504, 2003.
- [9] S. B. Legoas, V. R. Coluci, S. F. Braga, P. Z. Coura, S. O. Dantas, and D. S. Galvão, "Gigahertz nanomechanical oscillators based on carbon nanotubes", Nanotechnology, Vol. 15, No. 4, p. S184, 2004.
- [10] J. W. Kang and H. J. Hwang, "Gigahertz actuator of multiwall carbon nanotube encapsulating metallic ions: molecular dynamics simulations", J. Appl. Phys., Vol. 96, No. 7, p. 3900, 2004.
- [11] J. Cumings and A. Zettl, "Low-friction nanoscale linear bearing realized from multiwall carbon nanotubes", Science, Vol. 289, No. 5479, p. 602, 2000.
- [12] R. S. Lee, H. J. Kim, J. E. Fischer, A. Thess, and R. E. Smalley, "Conductivity

- enhancement in single-walled carbon nanotube bundles doped with K and Br", *Nature*, Vol. 388, No. 6639, p. 255, 1997.
- [13] S. Suzuki, F. Maeda, Y. Watanabe, and T. Ogino, "Electronic structure of single-walled carbon nanotubes encapsulating potassium", *Phys. Rev. B*, Vol. 67 No. 11, p. 115418, 2003.
- [14] J. Tersoff, "Empirical interatomic potential silicon with improved elastic properties", *Phys. Rev. B*, Vol. 38, No. 14, p. 9902, 1988.
- [15] J. Tersoff, "Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems", *Phys. Rev. B*, Vol. 39, No. 8, p. 5566, 1989.
- [16] D. W. Brenner, "Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films", *Phys. Rev. B*, Vol. 42, No. 15, p. 9458, 1990.
- [17] Z. Mao, A. Garg, and S. B. Sinnott, "Molecular dynamics simulations of the filling and decorating of carbon nanotubes", *Nanotechnology*, Vol. 10, No. 3, p. 273, 1999.
- [18] Y. Guo, N. Karsawa, and W. A. Goddard III, "Prediction of fullerene packing in C₆₀ and C₇₀ crystals", *Nature*, Vol. 351, No. 6326, p. 464, 1991.
- [19] G. Chen, Y. Guo, N. Karasawa, and W. A. Goddard III, "Electron-phonon interactions and superconductivity in K₃C₆₀", *Phys. Rev. B*, Vol. 48, No. 18, p. 13959, 1993.
- [20] G. Gao, T. Cagin, and W. A. Goddard III, "Position of K atoms in doped single-walled carbon nanotube crystals", *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 80, No. 25, p. 5556, 1998.
- [21] S. Akita and Y. Nakayama, "Interlayer sliding force of individual multiwall carbon nanotubes", *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 42, No. 7B, p. 4830, 2003.
- [22] Z. Xia and W. A. Curtin, "Pullout forces and friction in multiwall carbon nanotubes", *Phys. Rev. B*, Vol. 69, No. 23, p. 233408, 2004.
- [23] W. Guo, W. Zhong, Y. Dai, and S. Li, "Coupled defect-size effects on interlayer friction in multiwalled carbon nanotubes", *Phys. Rev. B*, Vol. 72, No. 7, p. 075409, 2005.
- [24] P. Kim, L. Shi, A. Majumdar, and P. L. McEuen, "Thermal transport measurements of individual multiwalled nanotubes", *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 87, No. 21, p. 215502, 2001.