

기가헤르츠 오실레이터를 위한 BN 나노튜브 연구

이 준 하[†]

[†]상명대학교 컴퓨터시스템공학과

A study on a Boron-Nitride Nanotube as a Gigahertz Oscillator

Jun Ha Lee[†]

[†]Department of Computer System Engineering, Sangmyung University

ABSTRACT

The gigahertz oscillator behavior of double-walled boron-nitride nanotube (BNNT) was investigated by using classical molecular dynamics simulations. The BNNT oscillator characteristics were compared to carbon-nanotube (CNT) and hybrid-C@BNNT oscillators. The results show that the BNNT oscillators are higher than the van der Waals force of the CNT oscillator. Since the frictional effects of BNNT oscillators are higher than that of a CNT oscillator, the damping factors of BNNT and hybrid oscillators are higher than that of a CNT oscillator.

Key Words : Boron-nitride nanotube oscillator, Molecular dynamics

1. 서 론

나노미터 단위의 전기 기계장치를 제조하기 위한 다양한 연구들이 진행되어 오고 있다. Cumings 와 Zettl 은 최근 수십 나노미터의 직경을 가진 다중벽 CNT (Carbon Nanotube)를 이용하여 마찰력이 작고 마모도 적은 베어링을 발표하였다[1]. Cumings와 Zettl에 의해 증명된 나노 응용 기술 특성을 활용하여, Zheng과 Jiang은 수 기가헤르츠의 주파수를 가지는 분자 오실레이터를 제안하였다. 이와 같은 나노급 응용 장치의 제조에서는 분자 동역학을 기초로한 시뮬레이션 기술이 장치들의 특성을 예측하고 분석하기 위한 필수도구로 활용되고 있다[2, 3].

다중벽 CNTs를 기반으로한 CNT 오실레이터는 MD(Molecular Dynamics) 시뮬레이션을 통해 폭넓게 연구되었다. Zheng은 밀어내고 당기는 힘을 이용한 반데르발스 에너지를 연구하기 위해 세부적인 이론적 계산을 적용하였다[4]. CNT 오실레이터에서의 에너지 손실에 관해서는 Guo, Jiang, Tangney에 의해 연구가

주도되었다[5]. Legoas는 다양한 시스템을 위해 MD 시뮬레이션을 활용하고, 기가헤르츠 오실레이터와 같은 장치의 신뢰성을 위하여 다양한 나노튜브 유형을 고려하였다[6]. 그들은 이와 같은 나노 오실레이터가 내부와 외부 튜브 사이의 반경차이가 약 3.4Å일때 동력학적으로 안정되어 있다는 것을 증명하였다. Rivera는 불안정한 이중벽 CNTs의 감쪽되어지는 진동 동작을 연구하였으며, 또한 고전적인 MD이론을 통하여 다중벽 CNT 오실레이터의 기가헤르츠 진동에 대한 진보를 이루어 왔다. Coluci는 결합된 CNT 오실레이터의 움직임에서 무질서함을 예시하였으며, Liu는 5가지 다른 반데르발스 포텐셜에 따른 이중벽 CNT 오실레이터의 불안정한 진동 동작으로 연결되는 메커니즘을 연구했다. 삼중벽 오실레이터 또한 종래의 MD 시뮬레이션을 사용함으로써 연구되었다[7].

본 논문에서는 이중벽 BNNT(Boron-Nitride Nanotube)를 기반으로한 오실레이터의 특성을 분석하여 BNNT 오실레이터를 CNT 오실레이터와 비교하고자 한다. 연구 결과는 종래의 MD 시뮬레이션의 방법을 통해 BNNT 오실레이터의 주파수가 CNT의 오실레이터의 주파수 보다 더 높은 것으로 나타났다.

[†]E-mail : junha@smu.ac.kr

2. 시뮬레이션 방법

이 연구에서 3 nm 길이의 CNT와 (5,5)-(10,10) 이중벽 BNNT를 고려해 보았다. 이중벽 BNNTs는 연구되어져왔고, C@BN 나노튜브의 혼합 나노튜브 케이블 또한 연구되어져왔으며, 공동 축을 가진 나노케이블은 다양한 방법에 의해 합성되어졌다. C@BN 나노케이블은 BNNTs에서 캡슐로 보호되어있는 C60 분자를 합성함으로써 합성할 수 있었다. Bandow, Luzzi, Smith는 단일벽 CNTs 내부에 C60 분자의 합병 연쇄반응에 의해 이중벽 CNTs를 만들었다[8, 9]. 열과 전기적 광명하에 직경이 약 7Å인 짧은 CNTs는 C60의 중합반응에 의해 우선적으로 형성되었다. 그러한 짧은 CNTs는 모두 합성되어졌고 길이가 길어지게 되었다. 이러한 합성 과정 동안에 튜브 안쪽의 직경 변화는 반데르발스 거리를 만족시키기 위한 안쪽과 바깥쪽 사이에 충격을 조절하기 위하여 발생되었다. 그 결과 직경이 약 7Å인 CNTs의 수는 열을 가한 시간에 따라 감소되었고, 보다 큰 직경을 가진 CNTs의 수는 증가하였다.

혼합 C@BN 나노튜브는 단일벽 BNNTs 내부에 C60 분자의 합병 연쇄반응에 의해 합성되어질 수 있다. CNT를 기반으로 한 오실레이터를 합성하는 이러한 기술은 이전 연구에서 제안되었었다. Enyashin은 혼합 C@BN 나노튜브 케이블을 연구했다. 이러한 나노튜브 기반의 오실레이터는 그림 1에서 도식적으로 보여준다. Fig. 1은 6개의 C60 풀러린이 캡슐에 싸여져 있는 BNNT를 보여주고 있고, 열과 전기적 광명하에 풀러린 합성에 의해 형성된 CNT를 캡슐로 싸고 있는 BNNT를 보여주고 있다. Fig. 1에서 보여주는 것과 같은 원자구조는 이 연구에서 MD 시뮬레이션을 이용하여 쓰여진 구조이다. 이 연구에서는 4가지 혼합 나노튜브의 유형을 비교하였다.

(5,5)BNNT@(10,10)BNNT, (5,5)CNT@(10,10)

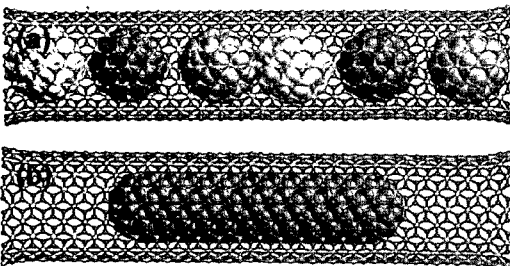


Fig. 1. (a) (10,10) BNNT encapsulating six C60 fullerenes and (b) (10,10) BNNT encapsulating a (5,5) CNT formed by C60s merge under heating or electron irradiation.

BNNT, (5,5)BNNT@(10,10)CNT, (5,5)CNT@(10,10)CNT. 이런 4가지 유형은 각각 BN@BN, C@BN, BN@C, C@C로 표시한다.

탄소-탄소 반응에 대해서, 본 연구에서는 탄소 시스템에 널리 적용되어져 왔던 Tersoff-Brenner 전위식을 사용했다. 탄소의 원거리 반응은 Ulbricht에 의해 탄소 시스템의 실험적인 결과를 얻은 파라미터를 가진 Lennard-Jones 12-6 전위식을 사용하여 묘사하였다. 붕소-질소 반응에 대해서, 본 연구는 Albe와 Moller에 의해 꼭 맞게 만들어진 파라미터를 사용한 Tersoff 전위식을 사용했다. 비록 Tersoff 유형의 전위식이 붕소와 질소 사이에 이온의 반응에 대해 설명할 수는 없을지라도 이 전위식은 질화붕소 나노튜브에 효과적으로 적용되어졌다. 붕소와 질소의 원거리 반응 또한 DERIDING/A의 힘 부분 파라미터를 가진 LJ12-6 전위식에 특성이 기술되어있다.

Table 1. Parameters for LJ12-6 Potential.

Parameter	Value
ϵ carbon	0.002635eV
δ carbon	3.369Å
ϵ boron	0.004116eV
δ boron	3.453Å
ϵ nitrogen	0.006281eV
δ nitrogen	3.365Å

탄소-붕소와 탄소-질소 파라미터는 Lorentz-Berthelot 믹싱 법칙인 $\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_A \epsilon_B}$ 와 $\sigma_{AB} = (\sigma_A + \sigma_B)/2$ 을 사용해서 얻어졌다. 이 논문에서 모든 유형에 대한 컷 오프 거리는 15Å이다. 구조의 변화없는 최적화는 최강 경사방법으로 획득하게 되었다. 또한 이전의 연구에서 사용돼오던 MD 시뮬레이션을 사용하여 MD 시뮬레이션을 수행했다. MD 코드는 속도 Verlet 알고리즘을 사용하였고 컴퓨팅 성능을 개선하기 위해 인접원자 목록을 사용하였다. MD 시간단위는 5×10^{-4} ps이다. MD 시뮬레이션은 1K에서 수행되어졌다. 바깥 나노튜브의 중심은 MD 시뮬레이션 동안에 일정하게 했다.

3. 결과 및 토의

NT 오실레이터의 반데르발스 힘은 Fig. 2에서 보여주는 것과 같이 SD(Steepest descent) 시뮬레이션으로부터 얻어졌다. Fig. 2 (a)는 NT 오실레이터 코어 중심 위치(din)의 상관관계에 따른 NT 오실레이터에서의 반

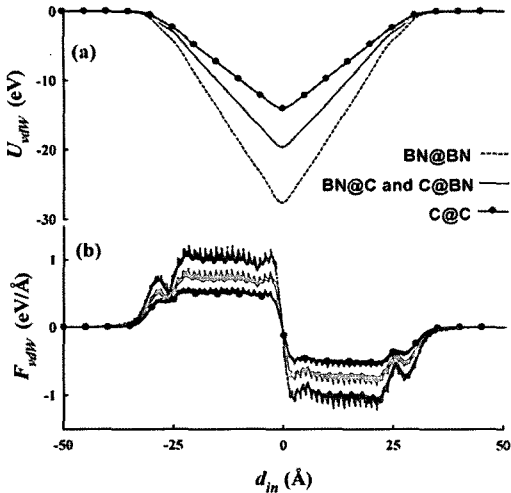


Fig. 2. (a) U_{dW} energy (U_{dW}) and (b) vdW force (F_{dW}) on NT oscillators as functions of the central position (d_{in}) of the core NT oscillator.

데르발스 힘을 (b)는 반데르발스 에너지를 각각 나타내고 있다.

BNNT의 반데르발스 결합 에너지는 Fig. 2에서 보여지는 것처럼 CNT의 에너지 보다 더 높다. 이 결과는 최초의 계산결과와 매우 일치한다. SD 시뮬레이션으로부터 얻은 F_{vdw} 의 최대값과 평균값은 BN@BN 오실레이터 1.232와 0.989 eV/Å, BN@C와 C@BN 오실레이터 0.867과 0.759 eV/Å, C@C 오실레이터 0.585와 0.556 eV/Å이다. C@C 오실레이터의 F_{vdw} 가 BN@BN 오실레이터의 F_{vdw} 보다 더 작기 때문에 BN@BN 오실레이터의 주파수는 C@C 오실레이터의 주파수보다 더 높을 것이다.

Fig. 3과 Fig. 4는 각각 당초 적용되었던 힘과 처음 변위에 대한 MD 시뮬레이션을 보여준다. Fig. 3에서는 0.05ps 동안에 원자 마다 0.1eV/Å의 외부에서 작용하는 힘이 NT 안쪽으로 적용되어졌고, Fig. 4에서 처음 변위는 15Å이었다. Fig.3과 4는 각각 BN@BN, BN@C, C@BN, C@C 오실레이터에 대한 결과를 보여준다. 각 경우에 대한 NT 안쪽의 변위는 Fig. 3과 4에서 보여주고 있다. 진동하는 동작으로 반데르발스 전위 에너지는 감폭작용을 하는 동력 에너지로 변화되었다. 그래서 d_{in} 의 peak-to-peak 값은 감소되어졌다. Fig. 3과 Fig. 4에서 BNNT 오실레이터의 주파수인 140 GHz는 CNT 오실레이터의 주파수인 60GHz보다 훨씬 더 높았다. 혼합 오실레이터의 주파수는 약 100GHz였다.

d_{in} 의 변화는 이전 연구에서 다중벽 CNT 오실레이터에 대한 발견처럼 진동이 감소하는 것을 보여줬다.

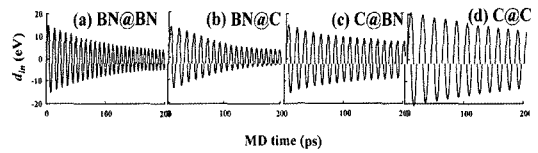


Fig. 3. MD simulation results for an external force per atom of 0.1 eV/Å Applied to the inner NT for 0.05 ps. The displacement of the inner NT (d_{in}) of the (a) BN@BN, (b) BN@C, (c) C@BN, and (d) C@C oscillators.

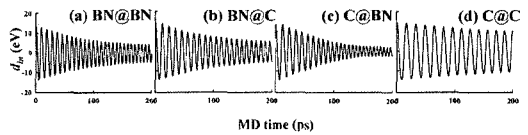


Fig. 4. MD simulation results for an initial displacement of the inner NT of 15Å. The displacement of the inner NT (d_{in}) of the (a) BN@BN, (b) BN@C, (c) C@BN, and (d) C@C oscillators.

바깥 CNT의 끝에서 CNT 오실레이터의 흔들리는 움직임은 가장 중요한 에너지 손실 메커니즘이었다. CNT 오실레이터의 동력 에너지는 CNT 오실레이터의 변하는 움직임 동안에 CNT 오실레이터의 흔들리는 움직임에 의해 유발되는 마찰 힘에 의해 손실되어진다. 온도가 증가됨에 따라 끝에서 CNT 오실레이터의 흔들리는 움직임에 영향을 미치고 변하는 움직임 동안에 CNT의 흔들림 또한 증가 되어진다. 두가지 에너지 손실 메커니즘의 관점에서 BNNT 오실레이터의 에너지 손실은 CNT 오실레이터의 에너지 손실과 매우 유사했다. 제외된 BNNT의 구부러진 외부, 붕소와 질소의 다양한 크기, 다양한 반데르발스 에너지는 하단에 토론될 것이다.

Fig. 2에서 토론했던 것처럼 BN@BN 오실레이터는 가장 큰 F_{vdw} 를 가졌기 때문에 4가지 유형중에 가장 높은 주파수를 가졌다. 비록 Fig. 2에서 BN@C 오실레이터의 F_{vdw} 가 C@BN 오실레이터의 F_{vdw} 와 같을지라도 BN@C 오실레이터의 주파수가 C@BN 오실레이터의 주파수보다 더 높다. MD 시뮬레이션에서 붕소, 탄소, 질소의 원자크기는 각각 10.811, 12.0, 14.006이기 때문에 BNNT의 전체 크기는 CNT의 크기보다 더 크다. 그러므로 같은 외부에서 작용하는 힘에 대한 CNT의 축진은 BNNT의 축진보다 약간 더 높다. 매우 짧은 시간 동안에 외부적으로 작용되어지는 힘은 지나친 반데르발스 힘보다 훨씬 크기 때문에 CNT 오실레이터의 동적인 에너지와 변위는 BNNT 오실레이터와

매우 비슷하다. 그러나 그당시에 BNNT와 혼합 오실레이터를 복구하기 위한 초과 반데르발스 힘과 전위 에너지는 CNT 오실레이터의 초과 반데르발스 힘과 전위 에너지 보다 더 크다. 그래서 C@C 오실레이터의 변위는 다른 것들 보다 더 크다. 결론적으로 더 큰 변위와 더 작은 반데르발스 힘은 C@C 오실레이터의 작은 주파수에 이유가 있었다. 더 큰 진폭을 가진 CNT 오실레이터는 더 작은 진폭을 가진 BNNT 오실레이터 보다 더 작은 주파수를 가진다. 즉, Rivera에 의해 증명되어진 명백한 법칙에 의해 예측되어진 것 처럼 더 작은 크기의 진폭을 가진 BNNT 오실레이터는 더 큰 주파수와 일치된다. Fig. 4에서 보여주는 것처럼 초기같은 변위를 가진 NT-기반의 오실레이터에 대하여 진동 주파수는 초과 반데르발스 힘과 에너지 손실 비율과 밀접하게 연관되어있었다. 위에서 언급했던 것처럼 보다 높은 에너지 손실율을 가진 NT-기반의 오실레이터는 보다 높은 주파수를 가졌다. BNNT를 포함한 NT-기반의 오실레이터의 에너지 손실은 오직 CNTs 만으로 구성된 C@C 오실레이터보다 더 크다. BNNTs는 구부러진 표면을 가졌고 봉소의 반데르발스 에너지와 질소의 반데르발스 에너지간 차이가 있기 때문에 BNNTs의 마찰은 CNTs의 마찰보다 더 크다. 바깥쪽에 BNNT를 가진 NT-기반의 오실레이터의 에너지 손실은 바깥쪽에 CNTs를 가진 NT 오실레이터의 손실보다 더 크다. 일반적으로 BN@BN 오실레이터의 에너지 손실과 진동 감폭은 제일 크다. 만약 오실레이터의 감폭이 오실레이터의 속도와 일직선으로 비례한다고 가정하면 감폭되어지는 오실레이터의 감폭 인자 r 은 Fig. 3과 Fig. 4에서 d_{in} 의 함수로부터 얻을 수 있다. BNNT와 CNT 오실레이터의 감폭 인자는 각각 0.007과 0.0019이다. 그러나 혼합 오실레이터의 감폭 인자는 크기, 변위, 주파수, 에너지 손실의 차이 때문에 0.0035부터 0.0069까지의 범위에 있다. 결국 시뮬레이션은 BNNT-기반의 오실레이터는 CNT-기반의 오실레이터보다 더 높은 주파수 장치에 적용되어질 수 있다는 것을 보여준다.

4. 결 론

MD 시뮬레이션으로부터 BNNT와 혼합 오실레이터를 해석하였다. BNNT와 BNNT-혼합 오실레이터는 BNNT와 BNNT-혼합 오실레이터의 반데르발스 힘이 CNT 오실레이터의 반데르발스 힘보다 더 크기 때문에 CNT 오실레이터보다 더 높은 주파수가 발생하는 것으로 분석되었다. BNNT-혼합 오실레이터의 감폭 결과는

BNNTs의 마찰영향이 CNTs보다 크기 때문에 CNT 오실레이터보다 더 큰 결과를 나타내었다. BNNT-기반의 오실레이터는 CNT-기반의 오실레이터보다 더 높은 주파수 장치에 적용되어질 수 있다는 것으로 해석되었다.

감사의글

“이 논문은 2005년도 정부(교육인적자원부)의 재원으로 학술진흥재단의 지원을 받아 수행된 연구임 (KRF-2005-041-D00312)”

참고문헌

1. J. Cumings and A. Zettl, “Low-Friction Nanoscale Linear Bearing Realized from Multiwall Carbon Nanotubes,” *Science*, Vol. 289, pp. 602-604, 2000.
2. Q. Zheng and Q. Jiang, “Multiwalled Carbon Nanotubes as Gigahertz Oscillators,” *Phys. Rev. Lett.* Vol. 88, pp. 045503-045506, 2002.
3. 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, pp. 245409-245415, 2002.
4. 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, pp. 125501-125505, 2003.
5. C-C. Ma, Y. Zhao, C-Y. Yam, G. H. Chen and Q. Jiang, “A tribological study of double-walled and triple-walled carbon nanotube oscillators,” *Nanotechnology*, Vol. 16, pp. 1253-1264, 2005.
6. S. B. Legoas, V. R. Coluci, S. F. Braga, P. Z. Coura, S. O. Dantas and D. S. Galvao, “Molecular-Dynamics Simulations of Carbon Nanotubes as Gigahertz Oscillators,” *Phys. Rev. Lett.* Vol. 90, pp. 055504-055508, 2003.
7. P. Liu, Y. W. Zhang and C. Lu, “Oscillatory behavior of gigahertz oscillators based on multiwalled carbon nanotubes,” *J. Appl. Phys.* Vol. 98, pp. 014301-014307, 2005.
8. S. Bandow, T. Hiraoka, T. Yumura, K. Hirahara, M. Yudasaka and S. Iijima, “Single-wall carbon nanotubes,” *Chem. Phys. Lett.* Vol. 337, pp. 48-54, 2001.
9. D.E. Luzzi and B.W. Smith, “Carbon cage structures in single wall carbon nanotubes: a new class of materials,” *Carbon*, Vol. 38, pp. 1751-1756, 2000.