

# 임베디드 시스템을 위한 탄소나노튜브 오실레이터의 특성 해석

이준하<sup>1\*</sup>

## Characteristics of Carbon Nanotube Oscillator for Embedded System

Jun-Ha Lee<sup>1\*</sup>

**요약** 본 논문은 탄소 나노 튜브 (CNT)로 형성된 다중벽 탄소 나노튜브의 진동 특성을 분자 역학적 시뮬레이션 방법에 의해 해석하였다. 이로부터 이중벽 탄소 나노튜브에 비하여 다중벽 탄소 나노튜브의 경우 진동 주파수 분할이 발생됨을 분석하였다. 또한 세개의 주파수 발생자로써의 4차 벽, 5차 벽, 6차 함수 벽으로 된 오실레이터와 직경으로부터 독립적인 적합성 제안을 위해 지속적인 세 개의 정점이 나타나는 것으로 분석되었다.

**Abstract** The coupled oscillation of multi-walled carbon-nanotube (MWCNT) oscillators consisting of  $(5n,5n)$  CNTs was investigated by molecular dynamics simulations. The results show that the inter-wall coupling leads to frequency splits. And there are consistently three primary frequency peaks for the quadric-walled, penta-walled and hexa-walled CNT oscillators. It is independent of the wall parameters, suggesting applications as triple-frequency generators. Furthermore, at least one of the primary frequencies of a MWCNT oscillator is lower than that of its double-walled counterpart.

**Key Words** : Nanotube Oscillators, Gigahertz Oscillators, Molecular Dynamics.

### 1. 서론

탄소 나노튜브(CNTs)에 기반을 둔 나노 전자 화학적 장치는 정밀 공학, 전자 장치, 의학 등 과 같은 다양한 응용을 위해 검토되어왔다. 다중벽 탄소 나노튜브 (MWCNTs)는 관념적인 낮은 마찰과 낮은 사용태도[1]로써 연구되어 왔지만 CNT 기반의 기가 헤르츠 오실레이터는 집중적으로 연구 되어왔다. CNT 오실레이터의 진동동작은 정밀한 기계적 컨트롤러나, 혹은 전자기적 영역, 레이저, 그리고 전자기적인 힘과 멀리 떨어져서 컨트롤 되어질 수 있다. 또한, CNT를 기반으로 한 기가 헤르츠오실레이터는 나노스케일 센서나 작동장치, 공진기, 급수기, 자동차 엔진, 필터, 메모리, 그리고 스위칭 장치에 적용할 수 있다.

이중벽 CNT (DWCNT) 오실레이터는 분자역학(MD) 시뮬레이션을 이용해서 집중적으로 연구 되어왔다 [2-9].

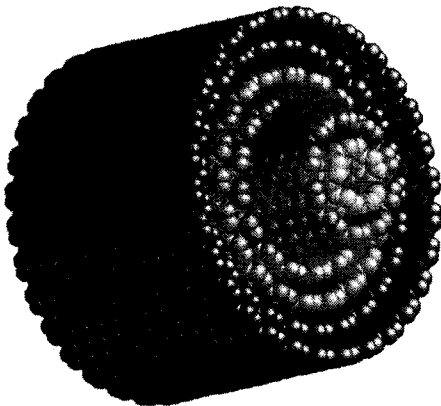
MWCNT 오실레이터에 대한 벽 사이의 결합이 CNT를 기반으로 한 오실레이터의 진동동작에 영향을 준다는 것은 확실하다. 핵심 CNT가 MWCNT로부터 밀려날 때 제 2의 가장 깊숙한 CNT는 일반적으로 초과 반데르발스 힘에 의해 바깥쪽으로 밀려난다. 즉, 제 2의 가장 안쪽의 CNT가 밀려날 때, 제 3의 가장 안쪽의 CNT는 과잉 반데르발스 힘에 의해 바깥쪽으로 잡아 당겨지는 것이다. 이와 같은 연속적 과정으로 인해 모든 MWCNT의 벽들은 진동한다. DWCNT 진동주파수는 주파수분할로 부터 인한 벽간의 영향 때문에 계산하고 있는 MWCNT의 진동 주파수가 다른 진술을 유도한 것에 비해서 간단한 방정식에 의해 계산되어졌다. MWCNT 오실레이터의 진동주파수에 영향을 주는 벽간 결합의 역학적 방법의 세부적인 해석을 위해서 2에서부터 6까지  $n$  정렬된  $(5n,5n)$  CNTs로 구성된 MWCNT 오실레이터의 결합된 진동에 대한 연구를 MD 시뮬레이션을 이용하여 분석하였다.

<sup>1</sup>상명대학교 컴퓨터시스템공학과  
접수일 08년 07월 16일      수정일 08년 09월 30일

\*교신저자 : 이준하 (junha@smu.ac.kr)  
제재확정일 08년 10월 16일

## 2. 본론

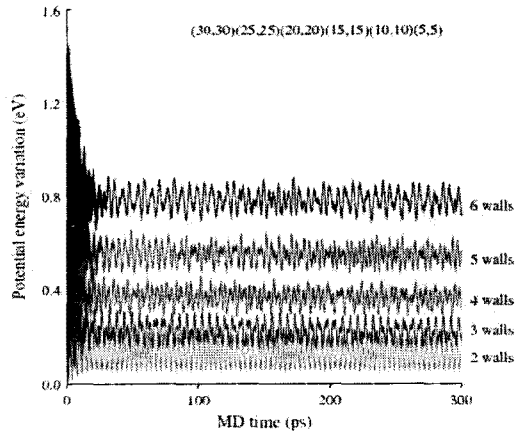
탄소와 탄소사이의 상호작용을 위해 본 연구에서는 탄소조직 안에 넓게 적용되어져 온 Tersoff-Brenner 전위함수를 사용했다 [10,11]. 탄소의 세로 범위 상호작용은 Mac 등으로부터 얻어진 매개변수인 Lennard-Jones 12-6 (LJ 12-6)를 가지고 특성을 기술했다. 이 연구에서 LJ 12-6 전위에 대한 매개변수는 각각  $\epsilon_{\text{carbon}}=0.0042 \text{ eV}$  이고  $\sigma_{\text{carbon}} = 3.37 \text{ \AA}$ 이다. LJ 12-6 전위의 잘라낸 거리는  $10 \text{ \AA}$ 이다. 사용했던 MD 시간 단계( $\Delta t$ )는  $5 \times 10^{-4} \text{ ps}$ 였다. 모든 MD 시뮬레이션을 수행하는 동안 MD 시뮬레이션의 온도는 1K로 고정되었고 모든 에너지는 일정했다. 결합효과로 인한 주파수 분할을 연구하기 위해서, 원자의 배열은 에너지 소실을 피하기 위한 유일한 이행적 방침인 z축으로 구했다. 이 연구는 열에 의한 에너지 분산과 MWCNTs의 벽간 반데르발스 힘으로 인해 영향을 받는 주파수를 분석하기 위한 벽간 에너지 교환은 포함하지 않는다.



[그림 1] 3nm 길이의 (5n,5n) CNTs 로 구성된 MWCNT 모형도.

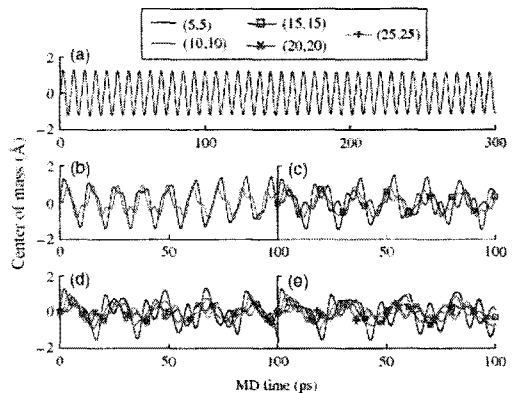
시뮬레이션에서 사용된 구조는 그림 1과 같은 3nm 길이의 (5n,5n) CNTs 로 구성된 MWCNT를 사용하였으며, 벽들의 갯수는 2개에서부터 6개 까지였다.

CNT 오실레이터가 구현되었을 때 외부의 CNT는 고정되거나 진동 동작을 얻기 위해 다른 물질들과 연결 되어야 한다. 그러므로 모든 MD 시뮬레이션의 외부 CNT에 대한 질량 중심은 모든 MD 단계로부터 위치 조정 체계를 사용해서 일정하게 유지되었다. 핵심 CNT는 초기 이행적 속도( $v_0$ ), 100m/s 로부터 시작 되었고 진동 주파수(f)는 빠른 푸리에 변환 (FFT)에 의해 해석되었다.

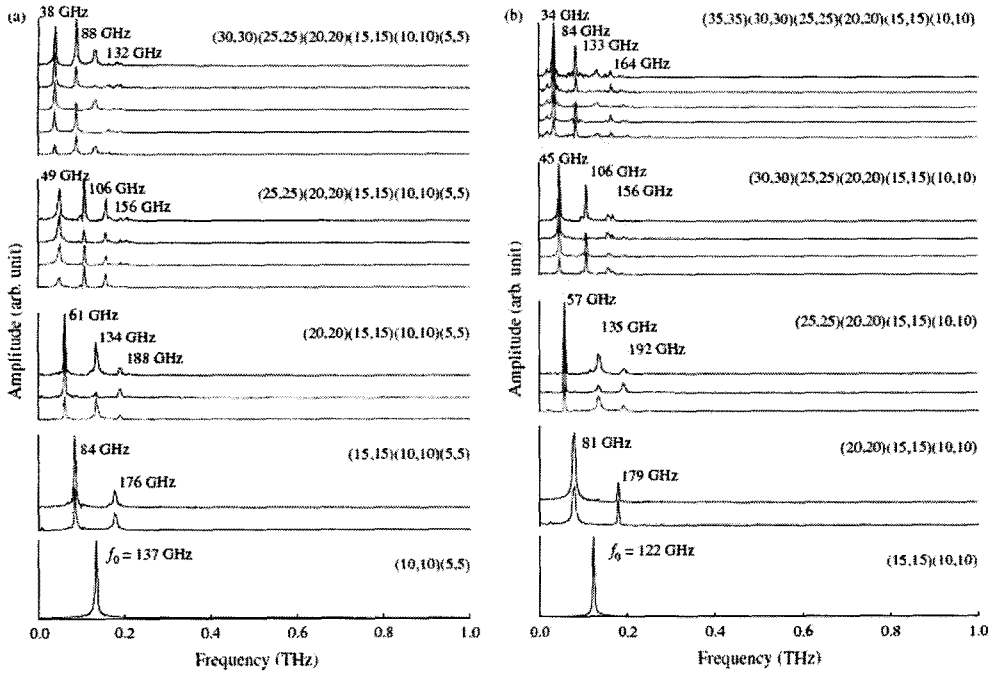


[그림 2] 다양한 벽 갯수에 대한 MD 시간의 함수로서의 MWCNT 오실레이터의 반데르발스 힘의 변화. 핵심(5,5) CNT는 해석적 속도인 100m/s에서 시작되었다.

MWCNT 오실레이터의 반데르발스 에너지 변화는 그림 2에 나타난 것처럼 핵심(5,5) CNT에 대한 MD 시간의 함수로써 표시 되었다. MWCNT 오실레이터는 30ps 이후에 안정된다고 알려진다. DWCNT 오실레이터는 그림 1에서와 같이 2개의 벽에 의해 표시 되어진 반데르발스 에너지 변화로부터 약간 진동이 발견 되었다. DWCNT 오실레이터에 대한 반데르발스 에너지의 편차는 그림 3에서와 같이 3개의 벽에 대한 한 쌍의 조화 진동으로 표시된 것으로 판단된다. 벽 갯수의 증가에 따라, 반데르발스 에너지 변화는 벽간의 힘으로 인한 결합 작용으로 인해 더 복잡해질 수 있다.



[그림 3] MD 시간의 함수로서의 핵심(5,5) CNT에 대한 벽의 질량 중심 곡선. 이중(a), 삼중(b), 4중(c), 5중(d), 6중(e) 벽 CNT 오실레이터에 대한 MD 시간의 함수로서의 각각 벽의 질량 중심곡선을 나타낸다.



[그림 4] 2에서부터 6까지의  $n$  경계에 대한 다중벽 ( $5n,5n$ ) 오실레이터와 (a)에서의 (5,5) 핵심에 대한, (b)에서의 (10,10)에 대한 주파수 분석 결과. 각 오실레이터에 대한 외부 벽 질량 중심은 MD 시뮬레이션 동안에 고정되었다. 각 라인은 벽과 일치 일치한다. 가장 위의 선은 핵심 벽과 두번째, 세번째에 대한 것이고 네번째와 다섯번째 라인들은 가장 위로부터 더 큰 직경을 가진 중간 벽들에 대한 것이다.

몇몇의 연구[3,4,8]에서는 벽의 갯수의 증가에 대한 MWCNT 오실레이터의 운용 주파수의 증가는 더 많은 벽들에 의한 것이고, 더 큰 복귀 반데르발스 힘은 핵심 벽에서 활동한다는 것을 보여 주었다. 이 시뮬레이션에서 핵심 벽을 제외한 모든 벽들은 고정되었다고 가정했고, 자연적 벽간 결합에 대한 연구는 이전에 가정된 상태 하에서 허용되지 않은 성취하기 위한 물리적 환경에서의 또 하나의 과제이다.

그림 4(a-c)는 이중벽, 3중 벽, 4중 벽, 5중 벽, 그리고 6중벽 CNT 오실레이터에 대한 각각의 MD 시간 함수로서의 질량 중심을 보여준다. 핵심(5,5) CNT가 MWCNT로부터 밀려났을 때, 반데르발스 힘으로부터 바깥으로 밀려난 (10,10) CNT는 (10,10) CNT에 영향을 준다. 즉, (10,10) CNT가 MWCNT로부터 밀려날때 반데르발스 힘으로부터 바깥으로 이동되어진 (15,15) CNT는 (15,15) CNT에 영향을 준다. 이런 연속적인 절차로써 외부벽을 대한것을 제외한 모든 MWCNT 벽들은 그림 2(b-e)에서와 같이 표현된다. 만약 그 반동의 일정함이 상수에 의한 것이라고 가정한다면 뉴턴의 법칙에 의한  $l$  벽에 관한 MWCNT 오실레이터의  $n$ 개의 벽에 대한 운동의 방정식

은 식(1)에 의해 표현되어 진다.

$$M_n \ddot{x}_n = \sum_{i=1}^l -k_{n,i}(x_n - x_i), \quad n \geq 1 \quad (1)$$

$M_n$ 은  $n$ 개 CNT의 벽의 질량을 의미하고,  $x_n$ 은  $n$ 개 CNT의 위치를 나타낸다.  $k_{n,m}$ 은  $n$ 개와  $m$ 개벽 사이의 실제적 반동상수로써,  $k_{n,m}$ 은  $-k_{m,n}$ 과 같고  $k_{n,n}$ 은 0 과 같다. 따라서, MWCNT 오실레이터의 운용 주파수는 벽들과 질량들의 갯수에 의해 결정지어질 수 있다. 핵심 CNT 직경의 증가에 따라, 벽간의 전체 차이 비율은 감소한다. 동일한 중심을 가진 MWCNTs에 대한 벽간 간격은 대략 0.34 nm이다. 벽간 전체 차이비율은 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$m_1 : m_2 : m_3 \dots = r_1 : r_1 + 0.34 : r_1 + 0.68 \dots$$

$m_i$ 와  $r_i$ 는 각각 각 벽의 질량과 직경을 뜻한다. 핵심 CNT의 직경의 증가에 따라 질량 차이 결과는 감소한다.

따라서, 큰 직경 핵심 CNT를 가진 MWCNT에 대해서, 결합된 오실레이터의 특징은 같은 질량을 가진 조화적으로 결합된 오실레이터와 유사할 수 있다. 본 연구에서는 각각 (5,5)에 대한 그림 3(a)과 (10,10)에 대한 그림 3(b)의 MWCNT 오실레이터에 대한 FFT 주파수 분석 결과를 나타내었고 각 라인은 그림 제목에 적어 놓은것과 같이 오실레이션안의 각각의 벽이 상응 하다는 것을 보여주었다. 기대 했던 대로 이중 벽은 단일주파수를 가졌고 벽의 갯수의 증가에 따라서 주파수 분할이 일어났다. 삼중벽 오실레이터는 두개의 기본적인 주파수를 가졌고 흥미롭게도 그 (5n,5n) 오실레이터는 다른 오실레이션들이 그림 3(a와b)에서 나타난 것과 같이 무시할만한 작은 크기를 가지는 것 처럼 4에서 6까지 일관적인 n 범위에 대한 3개의 기본적인 주파수를 가진다. 더욱이 적어도 MWCNT 오실레이터의 기본적 주파수중 한개는 이중 벽 한쪽의 주파수 보다 낮다.

식 (1)이 뜻하는 바로써, MWCNT오실레이터의 주파수 분할은 전형적인 결합된 오실레이션의 주파수 특징과 비슷하다. 비록 그림 3(b)의 핵심 CNT가 그림 3(a)의 핵심 CNT 보다 더 작을지라도 증가하는 벽의 갯수에 대한 주파수 정점은 사실상 비슷하게 나타난다.

이것은 MWCNT 오실레이터의 두 그룹 사이의 비슷한 벽간 결합 에너지 때문이다. 4중, 5중벽 오실레이터에 관한 가장 높은 주파수 구성요소는 모든 세계의 기본적 주파수 구성요소가 부합하는 DWCNT 오실레이터보다 낮은 주파수를 가지는 동안 DWCNT 오실레이터 가장 높은 주파수 구성요소는 그들의 DWCNT 양쪽보다 더 높은 주파수를 가진다. 3중, 4중벽 CNT 오실레이터에 대해서는 기본적인 정점이 항상 그들의 가장 낮은 주파수 구성요소이다. 5중, 6중 벽 CNT 오실레이터에 대해서는 각각의 벽의 기본적인 정점이 서로서로 다르다. 일반적으로 (10,10) CNT에 대한 MWCNT 오실레이터의 기본적인 정점에 비해 핵심(5,5) CNT에 대한 MWCNT 오실레이터의 기본적인 정점은 서로 다르다. 그 원인은 MWCNT 오실레이터의 주파수가 벽들간의 벽간 질량 차이 비율에 좌우되기 때문이다. 핵심 CNT 직경의 증가에 따른 기본적인 정점은 MWCNT 오실레이터와 기본적인 넓이 사이의 차이와 2차적인 정점의 가장 낮은 주파수 구성요소로써 증가한다.

### 3. 결론

본 연구에서는 병진적 오실레이션에 오직 하나의 기본적인 형태를 가지고 있는 DWCNT 오실레이터에 대해서

MWCNT 오실레이터의 벽간 결합은 오실레이션의 주파수 분할을 일으킨다는 사실을 발견했다. 주파수 분할의 가장 큰 특징은 핵심 CNT의 독립으로 부터 나타난다. 4차적, 5차적, 6차적 CNT와 벽 직경의 독립성, 3개의 주파수 발생자로써의 제안된 응용을 위해서는 연속적인 세계의 기본적인 정점이 존재하고 있다. 이와 같은 초소형의 나노급 오실레이터는 각종 센서류에 내장되어 사용되어 질 수 있으며, 공진기, 급수기, 자동차 엔진, 필터, 메모리 소자 및 스위칭 장치에 적용할 수 있다.

### 참고문헌

- [1] J. Cumings and A. Zettl, *phys. Rew. Lett*, 93, 086801 (2004)
- [2] D, Qian, G. J. Wagner, W. K. Liu, M. F Yu, and R. S. Ruoff, *Appl. Mech. Rev.* 55, 495(2002).
- [3] Q. Zheng and Q. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* 88, 045503 (2002)
- [4] S. B. Legoas, V. R. Coluci, S. F. Braga, P. Z. Coura, S. O. Dantas, and D. S. Galvao, *Nanotechnology* 15, S184 (2004)
- [5] J. L. Rivera, C. McCabe, and P.T.Cummings, *Nanotechnology* 16, 186 (2005)
- [6] J. W. Kang and H. J. Hwang, *J. Comput. Theor, Nanosci.*, 2, 348(2005)
- [7] Y. E. Lozovik, A. V. Minogin, and A. M. Popov, *phys. Lett.* A313, 112 (2003)
- [8] P. Liu, Y. W. Zhang, and C. Lu *Carbon* 44, 27 (2006)
- [9] P. Tangney, S. G. Louie, and M. L. Cohen. *Phys. Rev. Lett.* 93, 065503 (2004)
- [10] J. Tersoff. *Phys. Rev B* 38, 9902 (1988).
- [11] D. W. Brenner. *Phys. Rev. B* 42, 9458 (1990)

이 준 하(Jun-Ha Lee)

[정회원]



- 1990년 2월 : 중앙대학교 전자공학과 (공학사)
- 1992년 2월 : 중앙대학교 전자공학과 (공학석사)
- 1996년 8월 : 중앙대학교 전자공학과(공학박사)
- 2003년 3월 ~ 현재 : 상명대학교 컴퓨터시스템공학과 조교수

<관심분야>  
나노시스템, 임베디드시스템, 제어시스템등