

# 카본 나노 튜브의 동역학 거동 해석에 필요한 정전기력 연구

이종길\*(안동대 기계교육과)

## Investigation of Electrostatic Force in Carbon Nanotube for the Analysis of Nonlinear Dynamic Behavior

J. K. Lee(Dept. of Mechanical Engineering Education, Andong Nat'l Univ.)

### ABSTRACT

For an analysis of nonlinear dynamic behavior in carbon nanotube(CNT) an electrostatic force of CNT was investigated. The boundary condition in the CNT was assumed to clamped-clamped case at both ends. This type of CNT is widely used as micro and nano-sensors. For larger gaps in between sensor and electrode the van der Waals force can be ignored. The electrostatic force can be expressed as linear form using Taylor series. However, the first term of the series expansion was investigated here. The electrostatic force From this study we can conclude that for larger gaps the electrostatic force play an important role in determining the deflections as well as the pull-in voltage of simply supported switches.

**Key Words** : Carbon nanotube(탄소 나노 막대), Electrostatic force(정전기력), Nonlinear dynamics(비선형 동역학), Taylor's series(테일러 급수), Nanoelectromechanical switch(나노 전자기계 스위치)

### 1. 서론

카본 나노 튜브(carbon nano-tube)는 우수한 전기적 및 기계적인 성질뿐만 아니라 지난 몇 해 동안 탄소 나노 구조에 대한 눈부신 발전을 토대로 NEMS 분야의 센서 개발에 큰 기여를 해왔다.<sup>1-5, 13-15</sup> 특히 AFM(Atomic Force Microscope)에 부착된 외팔보 형태의 탄소 나노 막대는 샘플의 표면 거칠기(topography)상태를 기록하거나 분자의 기계적 성질과 탄성을 측정하는 센서로서 많이 활용되고 있다.<sup>1-4</sup> CNT 즉 탄소 나노 막대의 응용은 나노 스위치(nanoelectromechanical switch, NEM), RAM 설계, 고주파수 동작체, 고속 통신용 스위치 등에 사용된다.

나노 스위치로서의 센서 사용은 보통 폭과 길이가 일정한 사각형 평판 빔<sup>5-9</sup>과 직경과 길이가 일정한 원형 빔<sup>10</sup>의 두 가지가 대표적인 경우이다. 한 예로서 폭이  $b$ , 처짐곡선이  $w(x,t)$ , 두 전극의 간격이  $d$ , 직류전압  $V_p$ , 교류전압  $V_{AC}$ , 유전율이  $\epsilon_0$ 인 공진 마이크로 빔(resonant microbeam)에 발

생하는 정전기력은  $0.5\epsilon_0 b(V_p + V_{AC})^2 / (d-w)^2$ 으로 표시된다.<sup>6</sup> 이러한 마이크로 빔에 전압이 가진 상태로 전해졌을 때 공진체로서의 마이크로 빔의 응답특성을 연구한 결과<sup>6, 8, 9</sup>에 의하면  $V_p=8V$ 의 조건에서 교류전압이 0.07V일 때 마이크로 빔의 공진 주파수는 291kHz 정도이며 진폭은  $0.04\mu m$  정도로 계산되었고, 교류전압을 0.03V까지 증가 하였을 때 공진 주파수의 점핑현상이 발생하여 비선형적인 특성을 나타냄을 보였다. 나노 스위치의 CNT의 동적 거동은 비선형으로 표현되며 섭동이론을 이용하여 해석한 결과도 있다<sup>6</sup>. 특히 처짐곡선은  $w(x,t) = w_s(x) + u(x,t)$ 의 형태로 선형화 하여 해석한 사례도 있다.<sup>6, 9</sup>

또 다른 예로서 단면이 원형으로 길이가 일정한 빔을 고려할 수 있다<sup>10</sup>. 같은 빔이라도 사용되는 목적에 따라 외팔보형 CNT와 클램프 지지형 CNT로 나눌 수 있다. 이러한 탄소 나노 튜브의 스위치 센서로서의 응용을 해석하기 위해서는 비선형 동역학 방정식에 반 델 발스력(van der Waals)과 정전기력을 고려하게 된다.<sup>10, 12</sup> 반 델 발스력은 처짐 곡선

$w(x,t)$ 와 빔의 직경에 따라 비선형적으로 표현 된다<sup>10</sup>. 연구 결과<sup>10</sup>로는 외팔보 CNT의 길이가 50nm, 직경이 2nm, 간격이 4nm인 경우 반 델 발스력을 무시한 상태에서는 걸어주어야 하는 전압이 0.97V로 계산되었으나 반 델 발스력을 고려한 상태에서는 0.48V로 감소하여 간격이 좁은 경우 반 델 발스력이 중요한 항임을 보였다.

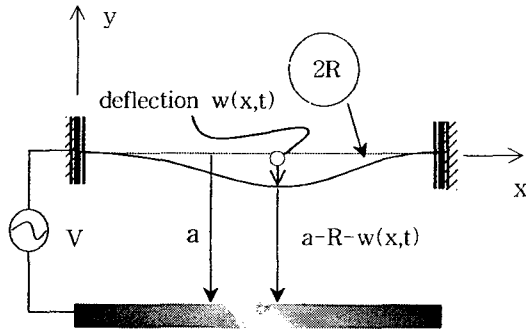


Fig. 1 Dynamic behavior of the carbon nano tube (CNT)

Fig. 1에는 본 연구에서 사용된 CNT의 형상을 보인 것으로 직경이  $2R$ 이고 길이가  $L$ 인 원형 빔의 형상이다. 본 연구에서는 빔 사이와 전극간의 간격  $a$ 가 반 델 발스력을 고려하지 않아도 되는 충분한 거리라고 가정하였고 따라서 비선형 편미분 방정식의 외부 가진력 항에는 정전기력만 고려하였다. CNT의 양단이 클램프 지지되고 직경이  $2R$ 인 원형 빔을 모델로 선정하였다. 빔과 그라운드 전극과의 간격은  $a$ 이며 여기에 전압을 걸어줄 때 발생하는 정전기력은 처짐 곡선  $w(x,t)$ 에 대하여 비선형적으로 이를 테일러 급수전개 하여 선형화 하고 선형화된 식의 첫 번째 계수를 분석하였다.

## 2. 편미분 운동 방정식 및 정전기력

그림 1에 보인 단면이 원형이고 직경이  $2R$ 인 봉의 끝단이 클램프 지지(clamped-clamped)된 탄소나노막대의 편미분 운동방정식은 다음과 같다.<sup>11</sup>

$$EIw_{,xxxx} + \rho Aw_{,tt} = \left( \frac{EA}{2L} \int_0^L |w_{,xx}|^2 dx \right) w_{,xx} + f_{es} \quad (1)$$

여기서,  $EI$ 는 CNT의 강성도,  $\rho$ 는 밀도,  $A$ 는 단면적,  $L$ 은 길이,  $w(x,t)$ 는 처짐 곡선,  $f_{es}$ 는 정전기력이다.

$w_{,xxxx}$ 는  $w(x,t)$ 의  $x$ 에 대한 4계 편미분,  $w_{,tt}$ 는  $w(x,t)$ 의  $t$ 에 대한 2계 편미분,  $w_{,xx}$  및  $w_{,xx}$ 는 각각  $w(x,t)$ 의  $x$ 에 대한 2계 및 1계 편미분을 뜻한다. 또한, 식 (1)의 정전기력은 다음과 같이 표현된다.<sup>10, 12</sup>

$$\frac{f_{es}}{\pi\epsilon_0 V^2} = \frac{1}{R \sqrt{\frac{(a-R-w)(a+R-w)}{R^2}} \times \log^2 \xi} \quad (2)$$

여기서,  $\epsilon_0$ 는 유전율(permittivity of vacuum),  $V$ 는 입력전압,  $R$ 은 CNT의 반경,  $a$ 는 CNT와 그라운드 전극과의 간격을 표시한다. 식 (2)에서  $\xi$ 는 다음의 식 (3)으로 표현된다.

$$\xi = 1 + \frac{a-R-w}{R} + \sqrt{\frac{(a-R-w)(a+R-w)}{R^2}} \quad (3)$$

식 (2)에서와 같이 양단이 클램프 지지된 CNT의 정전기력  $f_{es}$ 은 분모의  $\log^2 \xi$ 에서와 같이  $w(x,t)$ ,  $R$  및  $a$ 에 대하여 비선형적이다. 식 (1)의 편미분 운동방정식을 선형화 된 식으로 유도하기 위하여 식 (2) 및 (3)에 표현된 정전기력을 다음과 같이 테일러급수 전개를 이용하여 처짐 곡선  $w(x,t)$ 에 대한 선형화를 생각할 수 있다.

$$f_{es} \approx \zeta_0 + \zeta_1 w^1 + \zeta_2 w^2 + \zeta_3 w^3 + O(w^4) \quad (4)$$

여기서  $\zeta_0$ 에서  $\zeta_3$ 까지 계수는  $w$ 항의 각 차수의 계수를 의미한다.  $\zeta_0$ 에서  $\zeta_3$ 까지 계수를 구하기 위하여 다음 식 (5)를 생각하자.

$$\{a_1 \ a_2 \ a_3 \ a_4\}^T = \{\pi\epsilon_0 V^2 \ R \ a-R \ a+R\}^T \quad (5)$$

식 (4)와 식 (5)를 이용하여 식 (2)를 테일러 급수 전개하면 다음 식들과 같다.

$$\zeta_0 = \frac{a_1}{a_2 \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2} \log^2 \left( 1 + \frac{a_3}{a_2} + \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} \right)}} \quad (6)$$

식 (4)의  $w^1$ 항의 계수인  $\zeta_1$ 은 다음 식 (7)로 표현된다. 즉,

$$\zeta_1 = a_1 \left\{ 4a_3 a_4 + 2a_2 (a_3 + a_4) \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} + (a_3 + a_4) \times c_1' \right\} \times (2a_2^3 (a_3 a_4 / a_2^2)^{3/2} a_2 + a_3 + a_2 \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}})$$

$$\times \log^3 \left( 1 + \frac{a_3}{a_2} + \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} \right)^{-1} \quad (7)$$

여기서  $c_1'$ 은 다음 식 (9)로 표현된다.

$$c_1' = a_2 + a_3 + a_2 \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} \log \left( 1 + \frac{a_3}{a_2} + \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} \right) \quad (8)$$

식 (4)의  $u^2$ 항의 계수인  $\zeta_2$ 는 다음 식 (9)로 표현된다. 즉,

$$\zeta_2 = c_2' \times a_1 a_2 \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} \left( 8 a_3^3 a_4^3 \log^3 \left( 1 + \frac{a_3}{a_2} + \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} \right) \right)^{-1} \quad (9)$$

여기서  $c_2'$ 은 다음 식 (10)으로 표현된다.

$$\begin{aligned} c_2' = & [8 a_3 a_4 (a_3 + a_1) (a_2 + 2 a_3 + a_4) + 2 a_2 \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} \\ & \times \{ 3 a_3^2 (a_2 + a_1) + 2 a_3 (a_2 + 5 a_3) a_4 + (3 a_2 + 11 a_3) a_4^2 \}] \\ & \times (a_2 + a_3 + a_2 \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}})^{-2} \\ & + 6 a_3 a_4 \{ a_3^2 + 6 a_3 a_1 + a_1^2 + 4 a_2 \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} (a_3 + a_1) \} \\ & \times \left\{ (a_2 + a_3 + a_2 \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}})^2 \log \left( 1 + \frac{a_3}{a_2} + \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} \right) \right\}^{-1} \\ & + (3 a_3^2 + 2 a_3 a_1 + 3 a_1^2) \log \left( 1 + \frac{a_3}{a_2} + \sqrt{\frac{a_3 a_4}{a_2^2}} \right) \end{aligned} \quad (10)$$

같은 방법으로 계속하여  $\zeta_3$ 의 계수를 구할 수 있으나 여기서는 제시하지 않았다. 식 (6)에서  $a_1, a_2, a_3, a_4$ 에 따른  $\zeta_n$ 의 값을 두 전극의 간격에 따라 구할 수 있을 것이다.

### 3. 해석 결과

식 (6)-(8)에서와 같이  $f_{es}$ 는 처짐 곡선  $w(x,t)$ 에 대한 선형 방정식으로 표현되며  $V, R, a$  및 유전율

이 일정할 경우  $\zeta_n$ 에서  $\zeta_3$ 까지 계수는 일정한 값을 가지게 되며 이로서 식 (2)에서 제시된 정전기력은 처짐 곡선에 대하여 선형화 될 수 있다. 수치해석을 위하여 Table 1과 같은 값을 선택하여 식(6)에 대입하였다. 반 델 발스력의 크기를 무시할 정도로 만들기 위하여 두 전극의 간격  $a$ 를  $0.9 \mu m$ 로 선택하고 해석하였다.

Table 1 Numerical values of the parameters

Nomenclature	Value	Unit
R	0.665	nm
a	0.9	$\mu m$
L	1	$\mu m$
$\epsilon_0$	8.854	F/m

Fig. 2에는 두 전극간의 거리를 변화시켰을 때 식 (6)에 표시된  $\zeta_n$ 의 변화량을 보인 것이다.

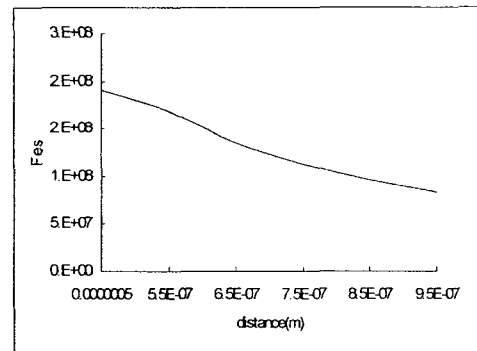


Fig. 2 The first term of eq. (6)  $\zeta_n$  versus distance a

$\zeta_n$  항의 크기는 그림에서와 같이 두 전극의 간격에 반비례하며 실제 정전기력  $f_{es}$ 의 값은 Fig. 2의 그기에 처짐량을 곱해 주어야 한다.  $\zeta_2$  및  $\zeta_3$ 의 계수는 이보다 훨씬 작은 값으로 표현될 것이며, 여기에 각각 처짐량  $u^2$  및  $u^3$ 을 곱해주면  $f_{es}$ 의 값은 무시할 정도의 양으로 계산된다.

다른 연구<sup>10</sup>에 의하면 두 전극의 간격이 4nm이고 직경이 2nm, 길이가 50nm인 원형 빔(CNT)을 양단이 클램프 지지된 상태에서 2 V의 전압을 걸어 주면 처짐량은 약 4nm 정도로 계산된다. 이러한 계산은 향후 식 (1)에서 제시된 비선형 편미분 방정식을 풀 때 정전기력을 어떻게 선형화 할지를 제시해 주는 한 방법으로 그 가치가 있다고 본다.

#### 4. 결론

본 연구에서는 나노 센서로 많이 이용되는 탄소 나노막대(CNT)의 비선형 동역학 해석에 필요한 정전기력에 대하여 해석 하였다. CNT의 양단이 클램프 지지되고 직경이 2R인 원형 빔을 모델로 선정하였다. 빔과 그라운드 전극과의 간격은  $a$ 이며 여기에 전압을 걸어줄 때 발생하는 정전기력은 처짐 곡선  $w(x,t)$ 에 대하여 비선형적으로서 이를 테일러 급수 전개 하여 선형화 하고 선형화된 식의 첫 번째 계수를 분석하였다. 해석 결과 CNT의 정전기력은 빔과 그라운드 전극과의 간격에 반비례함을 확인하였다. 향후 본 연구의 결과와 CNT의 형상이 폭이 일정한 평판일 때와의 정전기력을 비교하여 정전기력이 CNT의 형상과 어떠한 관계가 있는지를 연구할 필요가 있다고 사료된다.

#### 후기

이 연구는 2003년도 안동대학교 학술연구지원사업에 의하여 연구되었음

#### 참고문헌

1. Levy, R., Maaloum, M., "Measuring the Spring Constant of Atomic Force Microscope Cantilevers: Thermal Fluctuations and Other Methods," *Nanotechnology*, Vol. 13, pp. 33-37, 2002.
2. Lee, S., Howell, S., Raman, A., Reifengerger, R., Nguyen, C., Meyyappan, M., "Nonlinear Tapping Dynamics of Multi-Walled Carbon Nanotube Tipped Atomic Force Microcantilevers," *Nanotechnology*, Vol. 15, pp. 416-421, 2004.
3. Wang, G., Zhang, Y., Zhao, Y., Yang, G., "Pull-in instability study of carbon nanotube tweezers under the influence of van der Waals forces," *J. of Micromechanics and Microengineering*, Vol. 14, pp. 1119-1125, 2004.
4. Ono, T., Miyashita, H., Esashi, M., "Electric-field-enhanced growth of carbon nanotubes for scanning probe microscopy," *Nanotechnology*, Vol. 13, pp. 62-64, 2002.
5. Lin, W., Zhao, Y., "Dynamic Behavior of Nanoscale Electrostatic Actuators," *Chin. Phys. Lett.*, Vol. 20, pp. 2070-2073, 2003.
6. Younis, M., Nayfeh, A., "A Study of the Nonlinear Response of a Resonant Microbeam to an Electric Actuation," *Nonlinear Dynamics*, Vol. 31, pp. 91-117, 2003.
7. Osterberg, P., Senturia, S., "M-Test: A Test Chip for MEMS Material Property Measurement Using Electrostatically Actuated Test Structures," *J. of Microelectromechanical Systems*, Vol. 6, pp. 107-118, 1997.
8. Younis, M., Abdel-Rahman, E., Nayfeh, A., "A Reduced-Order Model for Electrically Actuated Microbeam-Based MEMS," *J. of Microelectromechanical Systems*, Vol. 12, pp. 672-680, 2003.
9. Abdel-Rahman, E., Younis, M., Nayfeh, A., "Characterization of the Mechanical Behavior of an Electrically Actuated Microbeam," *J. of Micromechanics and Microengineering*, Vol. 12, pp. 759-766, 2002.
10. Dequesnes, M., Rotkin, S., Aluru, N., "Calculation of Pull-in Voltages for Carbon-nanotube-based nanoelectromechanical switches," *Nanotechnology*, Vol. 13, pp. 120-131, 2002.
11. Bajaj, A., Johnson, J., "On the Amplitude Dynamics and Crisis in resonant Motion of Stretched Strings," Vol. 338, pp. 1-41, 1992.
12. Hayt, W., *Engineering Electromagnetics*, McGraw-Hill, New York, 1981.
13. Dharap, P., Li, Z., Nagarajaiah, S., Barrera, E., "Nanotube Film Based on Single-wall Carbon Nanotubes for Strain Sensing," *Nanotechnology*, Vol. 15, pp. 379-382, 2004.
14. Yakobson, B., Brabec, C., Bernholc, J., "Nanomechanics of Carbon Tubes: Instabilities beyond Linear Response," *Physical Review Letters*, Vol. 76, pp. 2511-2514, 1996.
15. Pirio, G., Legagneux, P., Pribat, D., Tada, K., Chhowalla, M., Amaratunga, G., Milne, W., "Fabrication and Electrical Characteristics of Carbon Nanotube Field Emission Microcathodes with an Integrated Gate Electrode," *Nanotechnology*, Vol. 13, pp. 1-4, 2002.