

탄소나노튜브 작동기의 이론적 해석

박철휴*(포항공대), 박현철(포항공대), 소현기(포항공대원), 정봉부(포항공대원)

Theoretical Analysis of Carbon Nanotube Actuators

C. H. Park, H. C. Park, H. K. So, B. B. Jung

ABSTRACT

Carbon nanotube actuator, working under physical conditions (in aqueous solution) and converting electrical energy into mechanical energy directly, can be a good substitute for artificial muscle. The carbon nanotube actuator simulated in this paper is an isotropic cantilever type with an adhesive tape which is sandwiched between two single-walled carbon nanotubes. For predicting the static and dynamic characteristic parameters, the analytical model for a 3 layer bimorph carbon nanotube actuator is developed by using Euler-Bernoulli beam theory. The governing equation and boundary conditions are derived from energy principles. The induced displacements of the theoretical model are presented in order to investigate the performance of the carbon nanotube actuator with different control voltages. The developed model presents invaluable means for designing and predicting the performance of carbon nanotube actuator that can be used in artificial muscle applications.

Key Words : Carbon nanotube (탄소나노튜브), Artificial muscle (인공근육), Euler-Bernoulli equation (오일러-베르누이 방정식), SWNT (단일벽 나노튜브), Bimorph actuator (바이모프 작동기)

1. 서론

탄소나노튜브(carbon nanotube, CNT) 가 1991 년 Iijima 에 의해서 발견된 이후 뛰어난 기계적 화학적 성질로 인해 많은 연구가 행하여 졌고^[1], 그 중 1999 년 Baughman 등에 의하여 단일벽 탄소나노튜브(SWNT)가 전해질 속에서 전기적 에너지를 기계적 에너지로 변환할 수 있는 Bucky paper 로 불리워지는 작동기로서의 가능성을 실험을 통해 보고하였다^[2]. 탄소나노튜브의 특징으로는 높은 가로세로비(aspect ratio)의 구조적 특성, 탄소계 물질의 특성인 화학적 안정성, 탄소원자 사이의 강한 결합력으로 인해 우수한 기계적 특성 및 일차원적인 전기적 전도성을 갖는다. 특히 단일벽 탄소나노튜브 작동기(0.75 MPa)는 자연 근육(0.3 MPa)보다 높은 응력을 생성할 수 있으며, 자연근육과 같이 수십억개의 개별 나노튜브 작동기가 조합된 형태로서 작동기의 수명을 단축시키는 이온교환이 불필요한 작동기구를 가지므로 긴 수명을 유지할 수 있는 생리학적 조건(in salt water)에서도 작동 가능한 생체 친화적인

인공근육으로 관심이 집중되고 있다^{[3][4][5]}.

본 논문에서는 탄소나노튜브 작동기의 작동원리를 간단히 살펴보고 3 층 구조물에 대하여 오일러-베르누이 보 이론을 적용하여 정역학적 해석뿐만 아니라 동역학적 해석을 수행하여, 탄소나노튜브 작동기에 전압을 가했을 때 발생하는 자유변위와 작동기의 정역학적 굽힘 모멘트에 대하여 살펴보고, 각 주파수 모드에 따라 시간에 증속되는 형적 변위에 대하여 토의하고자 한다.

2. 탄소 나노튜브 작동기의 작동 원리

Fig.1 은 소금물 속에서 작동하는 2 장의 SWNTs 작동기인 Bucky paper 가 접착 테이프 양면에 고정되어 3 층의 복합 구조물을 구성하는 바이모프 형태의 캔틸레버 구조물로서 전기가 공급되어 작동했을 때와 작동하지 않았을 때를 나타낸다. 전기화학적으로 한 층에서는 양극 나트륨 이온들이 존재하며 음전하로 대전되었고, 그 반대층에서는 음극 염화물을 보유하며 양전하로 대전되어 있다.

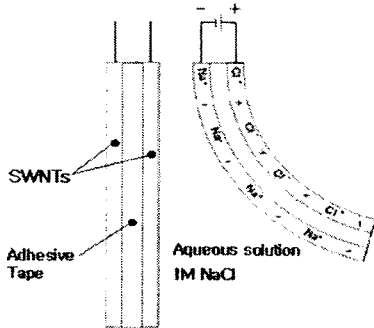


Fig. 1 Schematic drawing of a bimorph SWNT^[6]

그러므로 전체적으로는 중성이지만 전압의 변화로 유도되는 전기적 전하 투입(electronic charge injection)에 의해 공유결합 방향(covalently bonded direction)으로의 치수 변화하게 발생하는데 이는 양자 기계학적 효과(quantum mechanical effects)와 겹층에 의한 정적 효과(double layer electrostatics effects)에 기인된 것이다. 여기서 양자 기계학적 효과란 궤도점령(orbital occupation)과 밴드구조(band structure)의 변화를 말한다. 본 탄소나노튜브 작동기는 두 층이 동시에 인장되지만 유극으로 대전된 층이 양극으로 대전된 층보다 더 많이 인장됨으로써 굽힘이 발생한다. 이 현상은 반대 극의 전압을 가할 때는 반대 방향의 굽힘이 발생하여 작동기로서의 성능을 발휘한다.

3. 탄소 나노튜브에 대한 이론적 모델링

3.1 전기적-기계적 변형률 모델링

탄소 나노튜브 바이모프 작동기의 전기적 변형률은 작동기에 공급된 전압에 비례하며 SWNT 층들과 접착테이프는 완전한 접합으로 가정한다. 탄소 나노튜브 작동기의 변형률은 기계적 부분과 전기적 부분으로 나누어 다음의 방정식으로 나타낼 수 있다.

$$\varepsilon_s = C_s \sigma_s + N_s V_s \quad (1)$$

여기서 σ_s 은 작동기에서의 응력, C_s 은 constant electric field 때의 탄성 컴플라이언스(compliance)이다. N_s 는 변형률 변화와 전압의 변화 비로 정의되는 변형률-전압 계수이고, V_s 는 나노튜브 작동기를 구동하는 전압이다. 본 논문의 이론적 해석을 위해서 작동기에 공급된 전압과 그로 인해 유도된 변형률 사이의 변형률-전압 계수는 Baughman[2]등의 논문에서 행하여진 실험 데이터를 이용하였다.

3.2 모멘트 평형식

이론적 모델링을 위해 고전 보의 오일러-베르누이 모델을 기초로 하였다. 오일러-베르누이 모델은 3 층 구조물로 이루어진 작동기의 변형률을 Fig. 2와 같이 연속적으로 나타내면서 복합구조물의 곡률을 예견할 수 있다.

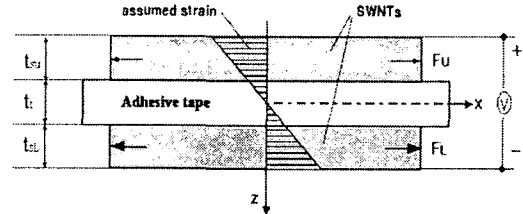


Fig. 2 Euler-Bernoulli model of a SWNT actuator.

전압을 가했을 때 각 층에서 발생하는 응력은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} \sigma_{su} &= E_{su} (\varepsilon_{su} - \varepsilon_{nu}) = -E_{su} (zk + \varepsilon_{nu}), \\ \sigma_{sl} &= E_{sl} (\varepsilon_{sl} - \varepsilon_{nl}) = -E_{sl} (zk + \varepsilon_{nl}), \\ \sigma_T &= E_T \varepsilon_T = -E_T zk. \end{aligned} \quad (2)$$

이때 아래첨자 su, sl 은 각각 위, 아래의 SWNT 층을 나타내고, T 는 접착 테이프층을 가리킨다. 식에서 k 는 보의 곡률이다. 각 층에 대한 굽힘 모멘트는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} M_{su} &= -\frac{1}{12} E_{su} b t_{sw} (3t_i^2 + 6t_i t_{sw} + 4t_{sw}^2) \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} E_{su} b t_{sw} (t_i + t_{sw}) N_{su} V_{su}, \\ M_T &= -\frac{1}{12} E_T b t_i^3 \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right), \\ M_{sl} &= -\frac{1}{12} E_{sl} b t_{sl} (3t_i^2 + 6t_i t_{sl} + 4t_{sl}^2) \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} E_{sl} b t_{sl} (t_i + t_{sl}) N_{sl} V_{sl}. \end{aligned} \quad (3)$$

여기서 t_{sw}, t_{sl}, t_i 는 각각 위, 아래의 SWNT 층 그리고 접착 테이프층의 두께를 가리킨다. 여기서 $E_{su} = E_{sl} = E_s, t_{sw} = t_{sl} = t_s$ 라고 가정하고, 구조물에 작용하는 모멘트 균형을 적용하면 내부 모멘트(internal moment)와 전압에 의한 외부 모멘트(external moment)가 평형을 이루는 모멘트 평형식을 얻을 수 있다.

$$M = -\frac{1}{2}E_s b t_s (t_s + t_s) N_s V_s$$

$$= \left[-\frac{1}{6}E_s b t_s (3t_s^2 + 6t_s t_s + 4t_s^2) - \frac{1}{12}E_T b t_s^3 \right] \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right) \quad (4)$$

위 식을 간단히 다시 표기하면 다음과 같다.

$$M = -[(EI)_s + (EI)_T] k \quad (5)$$

여기서 M 은 전압이 주어졌을 때 탄소 나노튜브 작동기에서 발생하는 모멘트이다.

3.3 작동기의 에너지 방정식

에너지 방정식을 이용하면 3 층 구조물로 이루어진 탄소 나노튜브의 지배 방정식뿐만 아니라 구조물의 경계조건도 동시에 구할 수 있다. 바이모프 작동기의 길이는 L , 폭은 b , SWNT 층과 접착층의 영률은 E_s, E_T , 질량밀도는 ρ_s, ρ_T 이다. 탄소 나노튜브 작동기의 운동에너지는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\delta T = \frac{1}{2} \delta \int_0^L \rho_T A_T \left(\frac{\partial w}{\partial t} \right)^2 dx + \delta \int_0^L \rho_S A_S \left(\frac{\partial w}{\partial t} \right)^2 dx \quad (6)$$

작동기의 포텐셜 에너지는 응력과 변형률의 곱을 적분함으로써 구할 수 있다.

$$\delta U = \delta \int_{Volume} \frac{1}{2} \sigma \varepsilon dV = \int_{Volume} E \varepsilon \delta \varepsilon dV = 0 \quad (7)$$

앞에서 구해진 응력과 변형률을 식 (7)에 대입하면

$$\delta U = \int_0^L \int_{-(t_s+t_s)/2}^{(t_s+t_s)/2} \int_{-b/2}^{b/2} dw (E \varepsilon \delta \varepsilon) dz dx$$

$$= b \int_0^L \int_{(t_s/2)}^{(t_s+t_s)/2} \left[E_s \left(-z \frac{d^2 w}{dx^2} - \varepsilon_{NV} \right) \delta \left(-z \frac{d^2 w}{dx^2} - \varepsilon_{NV} \right) \right] dz dx$$

$$+ b \int_0^L \int_{(t_s/2)}^{(t_s/2)} \left[E_T \left(-z \frac{d^2 w}{dx^2} \right) \delta \left(-z \frac{d^2 w}{dx^2} \right) \right] dz dx$$

$$+ b \int_0^L \int_{-(t_s+t_s)/2}^{-(t_s/2)} \left[E_s \left(-z \frac{d^2 w}{dx^2} - \varepsilon_{NL} \right) \delta \left(-z \frac{d^2 w}{dx^2} - \varepsilon_{NL} \right) \right] dz dx \quad (8)$$

식 (8)에 대해 두께에 대한 적분을 수행하면

$$\delta U = b \int_0^L \left[(2E_s I_s + E_T I_T) \frac{d^2 w}{dx^2} - E_s t_s (t_s + t_s) N_s V_s \right]$$

$$\delta \left(\frac{dw}{dx} \right) \Big|_{x=0}^L - b \frac{d}{dx} \left[(2E_s I_s + E_T I_T) \frac{d^2 w}{dx^2} \right] \delta w \Big|_{x=0}^L \quad (9)$$

$$+ b \int_0^L \left[\frac{d^2}{dx^2} (2E_s I_s + E_T I_T) \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right) \delta w \right] dx = 0$$

여기서 I_s 와 I_T 는 SWNT 층과 접착층의 각 중립축에 대한 관성 모멘트이다.

가상 일은 두 개의 항으로 구성되는데 외부 전압에 의한 전기적 일과 그리고 작동기 구조물 자체의 감쇠에 의한 일이다.

$$\delta W = -\frac{1}{2} b E_s t_s (t_s + t_s) N_s V_s \delta \int_0^L \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) dx$$

$$- \int_0^L c_b \frac{\partial w}{\partial t} \delta w dx \quad (10)$$

4. 정역학적과 동역학적 해석

4.1 정역학적 해석식

식(9)에서 탄소나노튜브 작동기의 정역학적 방정식은 다음과 같고,

$$\frac{d^2}{dx^2} (2E_s I_s + E_T I_T) \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right) = 0 \quad (11)$$

경계조건을 다음과 같이 구할 수가 있다.

$x=0$ 고정단에서

$$w = 0, \quad \frac{dw}{dx} = 0$$

$x=L$ 자유단에서

$$(2E_s I_s + E_T I_T) \frac{d^2 w}{dx^2} - E_s t_s (t_s + t_s) N_s V_s = 0$$

$$\frac{d}{dx} (2E_s I_s + E_T I_T) \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right) = 0 \quad (12)$$

정역학적 방정식과 경계조건으로부터 외부의 힘이 작용하지 않는다고 가정할 때 다음의 변위 방정식을 구할 수 있다.

$$w(x) = \frac{E_s t_s (t_s + t_s) N_s V_s}{2(E_T I_T + 2E_s I_s)} x^2 \quad (13)$$

4.2 동역학적 해석식

해밀턴 원리를 적용함으로써 3 층 구조물로 이루어진 탄소 나노튜브 작동기 구조물의 지배 방정식을 얻을 수 있다.

$$\delta H = \delta \int_{t_1}^{t_2} (T - U + W) dt = 0 \quad (14)$$

여기서 t_1 과 t_2 는 시간영역에서 시작과 끝이고 δ variational 파라미터이다.

$$\begin{aligned}
& (\rho_t A_t + 2\rho_s A_s) + c_b \left(\frac{\partial w}{\partial t} \right) + (E_t I_t + 2E_s I_s) \left(\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \right) \\
& = -\frac{1}{2} b E_s t_s (t_s + t_t) N_s t_s V_s \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} [H(x-L) - H(x-0)] \right)
\end{aligned} \quad (15)$$

탄소 나노튜브 작동기 구조물의 중 방향의 운동은 다음과 같이 근사화 할 수 있다.

$$w(x,t) = \sum_{i=1}^n \psi_i(x) W_i(t) = [\psi]^T [W] \quad (16)$$

이때 $\psi_i(x) = \cos \beta_i x - \cos \beta_i x - \sigma_i (\sinh \beta_i x - \sin \beta_i x)$. 여기서 상수 σ_i 는 모드 형상 계수이다^[7]. 모드 형상 함수를 운동 방정식(15)에 적용하면 작동기 시스템의 이산화 된 미분방정식을 얻을 수 있다.

$$M\ddot{W}(t) + C_b \dot{W}(t) + KW(t) = F_{nomo} \quad (17)$$

5. 결과 및 고찰

5.1 자유변위와 모멘트의 정적해석

탄소 나노튜브 작동에 오일러-베르누이 보 이론을 적용한 정역학적 모델링을 이용하여 전압이 작동기에 가해졌을 때의 변위와 변형을 일으킨 모멘트에 대하여 살펴본다. 본 시물레이션에 사용된 탄소나노튜브의 탄성계수는 $1.2E9Pa$ 이고, 시편의 크기는 $20E-3m \times 4E-3m \times 50E-6m$ 이다. 탄소 나노튜브에 의해 샌드위치된 스카치 이중 접착 테이프는 탄성계수 $1.1E9Pa$ 와 시편의 크기 $20E-3m \times 4E-3m \times 60E-6m$ 이 사용되었다. 그리고 변형률-전압 계수 N_s 는 $-0.8V$ 에서 $0V$ 까지 실험 변형률 데이터^[3]를 curve fit 함으로써 다음과 같은 2 차 다항식을 얻어 적용하였다.

$$N_s = 0.0792V^2 - 0.0016V - 0.018 \quad (18)$$

Curve-fit 의 정확성을 나타내는 지수 0.9568 을 얻었는데 완전한 curve-fit 인 경우는 1 이다.

전압에 따른 변위와 탄소 나노튜브의 작동 모멘트에 대하여 Fig. 3 과 Fig. 4 에 나타내었다. 각 결과 값은 $-0.2V, -0.5V, -0.65V, -0.8V$ 의 전압을 가함으로써 얻어졌다. Fig. 3 에서 끝단 최대 변위는 $-0.8V$ 에서 $5E-3m$ 를 얻을 수 있었고, $-0.2V$ 에서는 반대쪽으로 변위가 발생함을 보여 주는데 이는 나노튜브 작동기의 변형률 그래프에서 $-0.35V$ 부터 네가티브 변형률이 발생한다는 사실로 그 결과를 유추할 수 있다.

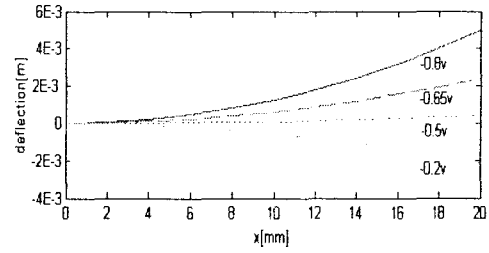


Fig. 3 Static deflection-length for various voltages.

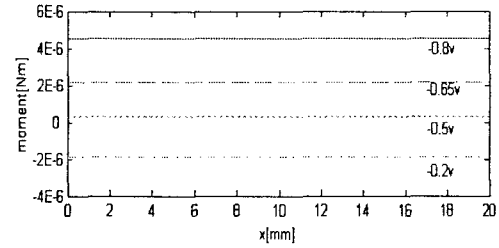


Fig. 4 Induced moment-length for various voltages.

이러한 네가티브 변형률이 발생하는 이유는 탄소 나노 튜브의 작동원리에 있어서 위 아래 두 탄소 나노 층이 한 층이 인장되고 또 다른 한 층이 수축 함으로써 굽힘이 발생하는 것이 아니라, 두 층 모두 동시에 인장되면서 음극으로 대전된 층이 양극으로 대전된 층보다 더 많이 인장됨으로써 굽힘이 발생하기 때문인 것으로 생각되어 진다. Fig. 4 에서는 전압의 변화에 대한 탄소 나노 튜브의 모멘트의 변화를 나타낸다. $-0.8V$ 를 가했을 때 $4.3E-6Nm$ 이 발생함을 알 수 있고 $-0.2V$ 일때 $-1.9E-6Nm$ 이 발생함을 알 수 있다. 이는 전압에 따른 탄소 나노튜브의 변위의 결과와 서로 상응함을 알 수 있으며, 그 원인도 위에서 설명한 사실에 기인한다고 추측할 수 있다.

5.2 시간 응답에 따른 횡적변위의 동적해석

Fig. 5-7 은 탄소나노튜브 작동기의 첫 3 개의 모달 모드에 대한 시간응답을 나타낸다. 본 동역학적 시물레이션에 사용된 탄소나노튜브의 질량밀도 $1330kg/m^3$ 와 접착 테이프 질량밀도 $1100kg/m^3$ 가 사용되었으며, 변형률-전압 계수 N_s 와 작동기의 고유 감쇠비는 각각 $0.06\%/v$ 와 0.005 가 적용되었다. 그리고 시편의 크기는 정역학적 해석에 사용된 시편과 같다. 입력된 전압은 각각 $-0.8v, -0.5v, -0.2v$ 이고, 구해진 주파수는 첫번째 모드 $20.9Hz$, 두번째 모드 $131.5Hz$, 세번째 모드는 $368.3Hz$ 이다.

세 개의 모드에 대한 시간응답함수의 진폭을 고려해 볼 때 첫 번째 모드가 탄소나노튜브 작동기 시스템의 전체 응답을 대변함을 알 수가 있고, 가

해진 전압이 작아짐에 따라 시간응답 함수의 진폭도 감소됨이 세 모드에 대하여 공통적으로 나타남을 알 수가 있다.

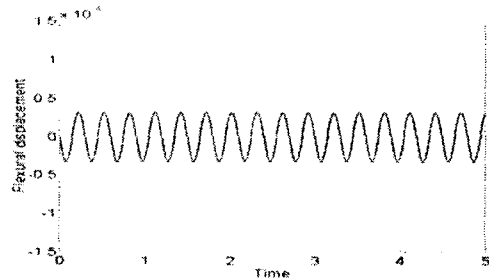


Fig. 5 Time response of flexural displacement for 1st mode (dash:-0.8v, dot:-0.5v, solid:-0.2v).

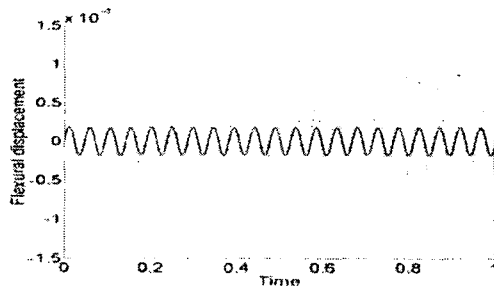


Fig. 6 Time response of flexural displacement for 2nd mode (dash:-0.8v, dot:-0.5v, solid:-0.2v).

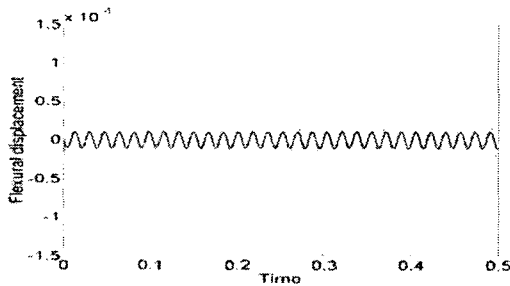


Fig. 7 Time response of flexural displacement for 3rd mode (dash:-0.8v, dot:-0.5v, solid:-0.2v).

6. 결론

사람의 근육 매커니즘과 유사하며 높은 응력을 생성할 수 있으며 생리학적 조건(in salt water)에서도 작동 가능한 탄소나노튜브 작동기에 대한 작동원리를 고찰하였으며, 3층 구조물에 오일러-베르누이 보 이론을 적용, 정역학적 방정식을 유도하여 인가된 전압에 따른 자유변위와 그때 발생된 모멘트를 유도하였다. 또한 해밀턴 원리를 적용하여 탄소나노튜브 작동기 시스템의 동적해석을 위한 운동 방정식을 유도하였다. 각 모드의 시간응답 함수의 횡적

변위 진폭이 인가된 전압에 따라 변화됨을 목격할 수 있었다.

참고문헌

1. Iijima, S., "Helical Microtubules of Graphitic Carbon," *Nature*, vol. 354, pp. 56-58, Nov. 1991.
2. Baughman, R., Cui, C., Zakhidov, A., Iqbal, Z., Barisci, J., and Spinks, G. "Carbon Nanotube Actuators," *Science*, vol. 284, pp. 1340-1344, May, 1999.
3. Fraysse, J., Minett, A., Jaschinski, O., Duesburg, G., and Roth, S., "Carbon Nanotubes Acting like Actuators," *Carbon*, vol. 40, pp. 1735-1739, Jan. 2002.
4. Vohrer, U., Kolaric, I., Haque, M. and Roth, S., "Carbon Nanotube Sheets for the Use as Artificial Muscles," *Carbon*, vol. 42, pp. 1159-1164, Feb. 2004.
5. Roth, S. and Baughman, R., "Actuators of Individual Carbon Nanotubes," *Current Applied Physics*, vol. 2, pp. 311-314, May 2002.
6. Monner, H., Mühle, S. and Wierach, P., "Carbon Nanotubes as Actuators in Smart Structures," *Proc. of SPIE, Active Materials: Behavior and Mechanics*, vol. 5053, pp. 138-146, 2003.
7. Rao, S., *Mechanical vibrations*, 3rd edition, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1995.