

화학센서 응용을 위한 SW-CNT의 elastic curve의 Simulation

이경수¹, 나대석², 김재경³, 이윤희¹, 주병권⁴

¹고려대학교 물리학과, ²고려대학교 전자공학과, ³KIST 광전자재료센터, ⁴고려대학교 전기공학과

Simulation of elastic curve of SW-CNT for chemical sensor application

K. S. Lee¹, D. S. Na², J. K. Kim³, Y. H. Lee¹ and Byeong-Kwon Ju⁴

¹Department of Physics, Korea Univ.

²Department of Electronics Engineering, Korea Univ.

³Opto Electronic Materials Research Center, KIST.

⁴Department of Electrical Engineering, Korea Univ.

Abstract : 탄소나노튜브는 캔틸레버처럼 주어진 압력에 의해 elastic curve를 형성하게 되는데, 이러한 성질은 탄소나노튜브가 가지고 있는 young's modulus와 구조적인 형태에서 기인한다. 따라서 탄소나노튜브의 변위와 인가된 analyte의 농도에 따른 압력 사이의 관계를 이용해 가스센서로의 적용이 가능하다. 이번 연구에서는 시뮬레이션을 통해 길이가 30nm 이고 반경이 1.5nm로 모델링 된 단일 벽 탄소나노튜브가 3000ppm와 1000ppm ethanol의 농도에 의해 형성된 elastic curve의 최대변위를 구하고, 농도와 단일 벽 탄소나노튜브의 elastic curve의 최대변위가 비례함을 보였다.

Key Words : CNT, Chemical sensor, Cantilever, Simulation

1. 서 론

단일 벽 탄소나노튜브(Single-Walled Carbon Natubes, SWNT)는 평균적으로 1.25TPa의 young's modulus를 가지고 있으며, 1.0~1.5nm의 지름을 가진 긴 hollow cylinder 형태의 구조를 가지고 있다. 이러한 특성은 탄소나노튜브가 주어진 압력에 의해 elastic curve를 형성 할 수 있다는 것을 알려준다. 이처럼, 수평으로 성장 시킨 단일 벽 탄소나노튜브는 캔틸레버와 유사한 형태를 가지고 있기 때문에, mass-sensitivity cantilever sensor로 이용이 가능하다는 것을 예시한다.

한 편, 캔틸레버의 움직임과 인가된 힘의 관계를 적용한 센서가 널리 이용되고 있는데, 대표적인 예가 원자현미경(Atomic Force Microscopy, AFM)이다. 만약, 캔틸레버에 인가된 힘이 analyte의 질량에 의한 것일 경우 mass-sensitivity sensor가 되는데, 이는 가스센서의 한 종류이다.

캔틸레버의 elastic curve를 통해 주어진 최대 변위는 mass-sensitivity Sensor에 있어서 가장 중요한 측정값이다. 캔틸레버의 변형은 캔틸레버 처짐 공식을 통해 예상할 수 있다. 캔틸레버 변형에서 중요한 변수들은 E(탄성계수), I(단면적 관성 모멘트), L(캔틸레버의 길이) 그리고 인가된 힘이다.

이 번 연구에서는 단일 벽 탄소나노튜브를 이용해 mass-sensitivity cantilever sensor를 모델링하고 3000ppm와 1000ppm의 ethanol 농도에 의해 형성된 elastic curve의 최

대변위를 시뮬레이션을 통해 구하고, 그 값을 캔틸레버 처짐 공식에 의한 값을 비교하였다.

2. 실험

실험은 수평 성장으로 한 쪽 끝이 고정 된 단일 벽 탄소나노튜브를 모델링하고, 모델링 한 단일 벽 탄소나노튜브의 물성치를 입력한 후, 유한요소법(FEM)을 통해 분석하는 시뮬레이션 과정이다. 모델링 한 단일 벽 탄소나노튜브의 물성치는 표 1과 같다.

표1. 모델링한 단일 벽 탄소나노튜브의 물성치.

parameter	value	parameter	value
length	30nm	young's modulus	1.25TPa
inner diameter	1.5nm	poisson's ratio	0.287
outer diameter	1.16nm	thickness of graphite	0.34nm

경계조건으로는 단일 벽 탄소나노튜브가 수평 성장으로 인해 한쪽 끝이 축매에 연결되어있다는 가정을 주었다. 주어진 힘은 3000ppm의 ethanol과 1000ppm의 ethanol을 인가했을 경우에 생기는 분력으로, 농도와 elastic curve의 최

대변위와의 관계를 조사하기 위한 변수이다.

또, 수평 성장으로 한쪽 끝이 고정된 단일 벽 탄소나노튜브는 한쪽 끝이 고정된 캔틸레버 형태이므로 아래와 같은 캔틸레버 처짐 공식을 이용해 최대 변위를 구할 수도 있다.

$$\delta = \frac{w_0 L^4}{8EI}$$

유한요소법과 달리 캔틸레버 처짐 공식에서는 EI 를 필요로 하는데, 여기서 E 는 탄성계수로 영률과 같다. I 는 단면적 관성 모멘트로 캔틸레버의 단면에 의해 결정되는 값이다. w_0 는 캔틸레버 상단에 걸쳐 분산된 힘을 말한다.

3. 결과 및 고찰

캔틸레버 처짐 공식에 의하면, 단일 벽 탄소나노튜브의 elastic curve에 의한 최대 변위는 Ethanol의 농도가 3000ppm이었을 때, 6.358×10^{-9} nm 이었고, 1000ppm에서는 3.119×10^{-9} nm 이었다.

그림 1은 시뮬레이션을 통해 분석한 단일 벽 탄소나노튜브의 elastic curve를 보여준다.

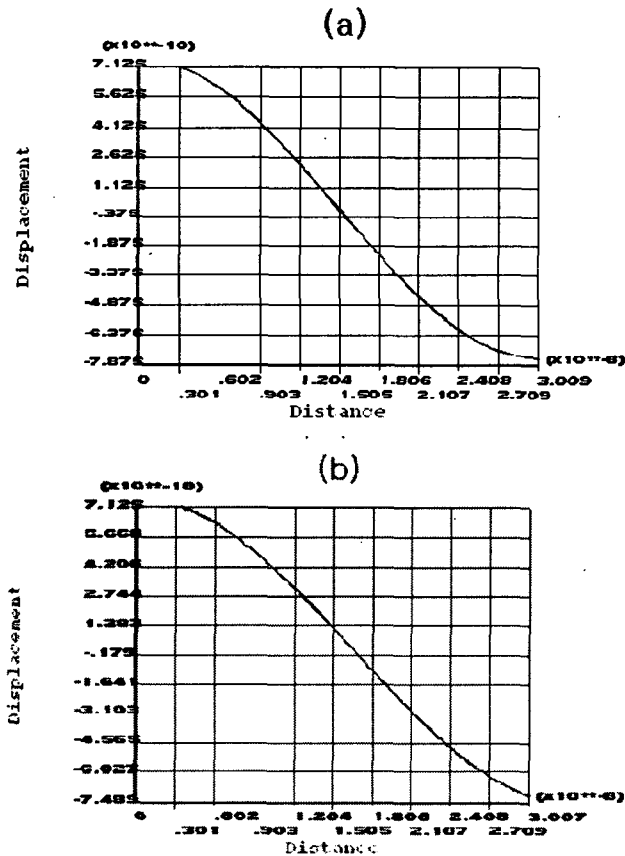


그림 1. ethanol 농도에 따른 elastic curve. (a) ethanol 3000ppm (b) ethanol 1000ppm

3000ppm이었을 경우 단일 벽 탄소나노튜브의 최대변위는 축애와 연결되지 않은 끝 부분에서 0.74077×10^{-9} nm 이고, 1000ppm에서는 0.71329×10^{-9} nm 라는 것이 확인 되었다. 이 결과는 캔틸레버 처짐 공식과는 어느 정도 차이를 보이고 있지만, 농도가 증가함에 따라 처짐도 늘어난다는 것은 변함없이 보여주고 있다.

결론

이 번 연구에서는 mass-sensitivity chemical sensor에 응용할 수 있는 단일 벽 탄소나노튜브의 elastic curve를 두 가지 농도에서 유한요소법으로 시뮬레이션하고, 그 결과를 비교한 후, 농도와 처진 변위와의 관계를 조사해 보았다. 또 각각의 결과를 캔틸레버 처짐 공식에 의해 구한 변위와도 비교해 보았다.

시뮬레이션 분석 결과에 의하면 3000ppm에서는 처짐이 0.74077×10^{-9} nm 이었고, 1000ppm에서는 0.71329×10^{-9} nm 이었다. 캔틸레버 처짐 공식에서처럼 농도가 커짐에 따라서 처짐도 커지는 것을 확인할 수 있었다.

하지만, 캔틸레버 처짐 공식에 의한 결과보다도 그 처짐이 더 컸는데, 이 결과를 통해서 단일 벽 탄소나노튜브가 농도에 민감하게 반응한다는 것을 확인할 수 있었다.

즉, 단일 벽 탄소나노튜브는 mass-sensitivity chemical sensor에 적합하다는 것을 보여주고 있다.

감사의 글

본 연구는 한국과학기술부의 21세기 프론티어 연구개발 사업을 수행하기 위한 지능형 마이크로시스템 개발 사업 단으로부터 후원 받았습니다.

참고 문헌

- [1] A. Krishna, E. Dujardin, T.W Ebbesen and P.N.Y yianilos and M.M.J. Treacy, Physical Riview B, Vol. 58, No. 20, 1998.
- [2] J.R. Stetter, G.J. Maclay, Advanced Micro and Nanosystems, Vol.1, No.10, 2004.
- [3] C.Hagleitner, A.Hierlemann, D.Lange, A.Kummer, N.Kerness, O.Brand and H.Baltes, Nature, Vol 414, p.293, 2001.
- [4] V.N. Popov, V.E. Van Doren, M.Balkanski, Physical Review B, Vol.64, No.4, 2000.