

# 탄소나노튜브 디바이스의 전기역학적 비선형 거동 해석

## Nonlinear Analysis of Electromechanical Behavior in Carbon Nanotube Devices

김일광\* · 이수일† · 강상욱\*\*

Il Kwang Kim, Soo Il Lee and Sang Wook Kang

**Key Words :** Carbon Nanotube(탄소나노튜브), Nonlinear Analysis(비선형 해석)

### ABSTRACT

In this study a cantilevered carbon nanotube(CNT) switch was investigated with the linear and the nonlinear structural models incorporating the electrostatic force and van der Waals interactions between the CNT and ground surface. Due to the applied voltage and van der Waals interactions the CNT deforms statically and dynamically and finally pull into the surface. When the nonlinear model is considered in case of the relatively large gap between the CNT and the surface, the static pull-in voltage was increased due to the nonlinear hardening effect. Also the dynamic response was investigated with the different external dc and ac voltages. The CNT shows various dynamic behaviors and instabilities including dynamic pull-in. Based on this study, further research on the dynamic and nonlinear stability of CNT nanodevices should be requested to develop the new type of nano switches or nano-memory.

### 1. 서 론

탄소나노튜브(carbon nanotube: CNT)는 작은 크기로 높은 강성과 유연성을 지니고 있으며 전기적 성질 또한 우수하다. 탄소나노튜브를 이루는 겹에 따라 단일벽 탄소나노튜브(single-walled carbon nanotube: SWCNT), 다중벽 탄소나노튜브(mutli-walled carbon nanotube: MWCNT)나뉘게 되며, 그 기계적 성질에 대한 연구가 실험과 이론을 바탕으로 진행되었다[1-2]. 최근 탄소나노튜브의 이러한 기계적, 전기적 특성의 장점을 이용한 나노 스케일의 메모리, 스위치, 필터, 센서 등의 다양한 나노소자의 응용 사례가 있다[3-11].

특히 나노튜브를 기반으로 하는 저장장치인 나노 메모리(NRAM)는 기존 메모리(SRAM, DRAM, Flash memory)에 비해 더 작은 크기로 더 빠른 읽기 및 쓰기 속도로 더 낮은 전압에서 구동할 수 있는 월등한 성능[7]을 지니고 있어 이에 대한 다양한 연구가 필요한 상태이다. 따라서 외팔보(cantilever beam)와 양 단지지보(suspened beam) 형태의 메모리 또는 스위치는 nanoelectromechanical systems(NEMS) 분야에서 다양하고 자세하게 논의되었다[3-6].

본 연구에서는 단일벽 탄소나노튜브를 기반으로

하는 외팔보 형태의 나노 메모리를 설계하는데 필요한 기본적인 탄소나노튜브와 기관의 사양[3]으로 탄소나노튜브 탄성력과 외부에서 인접한 표면에 작용하는 분자간 상호력인 van der Waals 힘, 기관에 전압을 가하면서 발생하는 정전기력(electrostatic force)을 고려하여, 나노튜브가 표면에 부착되는 전압(pull-in voltage)를 구하기 위한 모델을 수립하였다. 그리고 탄소나노튜브의 대변형 경우 수반되는 비선형(nonlinear) 효과를 선형(linear)일 때와 비교하였다. 또한 교류전압의 작용에 의한 동적 거동 현상의 특징도 파악하였다.

### 2. 외팔보형 나노소자 모델링

Fig. 1은 탄소나노튜브를 이용한 외팔보 형태의 나노 메모리를 간략화한 것이다. 전극에 전압을 가하면 정전기력에 의해 나노튜브는 그래파이트(graphite) 기저면(ground plane)을 향해 변형하며, 표면에 인접할수록 van der Waals 힘과 나노튜브의 탄성력과의 균형에 의해 기저부에 달라붙는 pull-in 현상이 일어난다. 이러한 나노소자에 대한 기하학적, 전기적 사양은 Table. 1에 정리하였다[3].

† 교신저자; 서울시립대학교 기계정보공학과

E-mail : leesooil@uos.ac.kr

Tel : (02) 2210-5667, Fax : (02) 2210-5575

\* 서울시립대학교 대학원 기계정보공학과

\*\* 한성대학교 기계시스템공학부

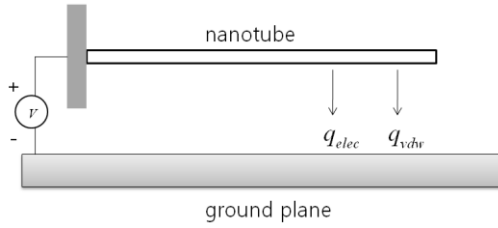


Fig. 1 Nanotube-based electromechanical memory

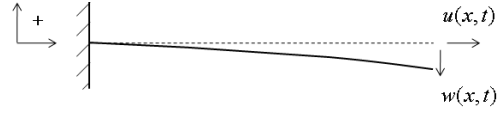


Fig. 2 Nanocantilever beam model

Table 1 Parameters in this paper

Symbol	Physical meaning	Value
$L$	Length of CNT	50nm
$R$	Radius of CNT	1nm
$E$	Young's modulus of CNT	1.2TPa
$g_0$	Initial gap between CNT and ground plane	4nm 20nm
$I$	Moment of the inertia of cross-section	$\frac{\pi}{4}R^4$
$\rho$	Density of the CNT material	1350kg/m <sup>3</sup>
$V$	Voltage applied	$V = V_0 + V_1 \cos \Omega t$
$\epsilon_0$	Vacuum permittivity	8.854×10 <sup>-12</sup> C <sup>2</sup> /Jm
$C_6$	Constant of carbon-carbon interaction	15.2eV Å
$\sigma$	Graphite surface density	38n/m <sup>2</sup>

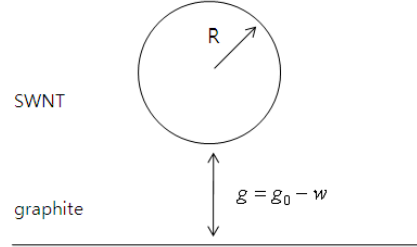


Fig. 3 Geometry of SWNT and graphite ground plane

$$f_{elec} = -\frac{\pi\epsilon_0 V^2}{R \sqrt{\frac{g(g+2R)}{R^2}} \log^2 \left[ 1 + \frac{g}{R} + \sqrt{\frac{g(g+2R)}{R^2}} \right]} \quad (2)$$

### 3. 운동방정식 유도

#### 3.1 비선형 외팔보 방정식

Fig. 2 는 단일벽 나노튜브를 외팔보로 가정하여 축방향 인장과 처짐을 보의 축방향 길이  $x$  와 시간  $t$  로 나타내었다. Pohit 등[12]을 따르면 축방향으로만 표현한 외팔보의 동적 비선형 방정식(dynamic nonlinear equation)은 다음과 같다. 여기서  $f$  는 외팔보에 작용하는 외력을 나타낸다.

$$\rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + EI \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) \right] + \rho A \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial w}{\partial x} \int_L^x \int_0^x \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \right) \frac{\partial w}{\partial x} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial w}{\partial t} \right) \right)^2 \right\} dx dx \right] = f \quad (1)$$

#### 3.2 정전기력

반지름이  $R$  인 나노튜브를 완전한 원통형 도체(perfect cylindrical conductor)로 가정하여 graphite 과 작용하는 단위 길이당 정전기력(electrostatic force)을 구하면 식(2)와 같다[3]. Fig. 3 에서  $g$  는 단일벽 나노튜브와 graphite 표면과의 간격을 의미한다.

#### 3.3 van der Waals 힘

단일벽 나노튜브를 단층 셸(shell)로 가정하여 그 표면과 단층의 graphite 표면 간에 작용하는 단위 길이당 van der Waals 힘은 식(3)과 같다. 여기서 van der Waals 힘의 척력(repulsive force)은 무시하여 인력(attractive force)만 고려한다.

$$f_{elec} = -C_6 \pi^2 R \sqrt{g(g+2R)} \times \frac{(8g^4 + 32g^3R + 72g^2R^2 + 80gR^3 + 35R^4)}{2g^5(g+2R)^5} \quad (3)$$

#### 3.4 비선형 운동방정식

외팔보 나노튜브의 탄성력과 graphite 간에 작용하는 정전기력, van der Waals 힘을 하나의 식으로 정리한 후 각 변수를 다음과 같이  $w^* = w/g_0$ ,  $x^* = x/L$ ,  $t^* = t/L^2 \sqrt{EI/\rho A}$ ,  $\Omega^* = \Omega L^2 \sqrt{\rho A/EI}$ ,  $R^* = R/g_0$ ,  $g^* = (g_0 - w)/g_0$  로 무차원화 시키면 식(4)을 얻을 수 있다. 식(4)에서는 편의상 윗첨자를 생략하였으며, 무차원화 결과  $\gamma_1 = (g_0/L)^2$ ,  $\gamma_2 = -\pi\epsilon_0 V^2 L^4 / (g_0^2 EI)$ ,  $\gamma_3 = -C_6 \sigma^2 \pi^2 L^4 / (2g_0^5 EI)$  같은 계수를 얻을 수 있다.

$$\ddot{w} + w'''' + \gamma_1 [w'(w'w'')] + \gamma_1 \left[ w' \int_1^x \int_0^x \{ \ddot{w}'w' + (\dot{w}')^2 \} dx dx \right]' = \gamma_2 f_{elec} + \gamma_3 f_{vdw} \quad (4)$$

여기서,

$$f_{elec} = \left[ R \sqrt{\frac{(1-w)(1-w+2R)}{R^2}} \right]^{-1} \times \left[ \log^2 \left\{ 1 + \frac{(1-w)}{R} + \sqrt{\frac{(1-w)(1-w+2R)}{R^2}} \right\} \right]^{-1}$$

$$f_{vdw} = R \sqrt{(1-w)(1-w+2R)} \times [8(1-w)^4 + 32(1-w)^3 R + 72(1-w)^2 R^2 + 80(1-w)R^3 + 35R^4] \times \left\{ (1-w)^5 (1-w+2R)^5 \right\}^{-1}$$

#### 4. 갤러킨 근사화

3 절에서 구한 운동방정식(4)은 연속계이므로 갤러킨 방법(Galerkin method)을 이용하여 이산계로 근사화시킨다. 계산의 간략화를 위해 무차원화된 구간 0 부터 1 까지 Rational interpolation 으로 근사화시킨 변형된 정전기력과 van der Waals 힘은 각각  $\hat{f}_{elec}$ ,  $\hat{f}_{vdw}$  로 표현하였다. 변형된 외팔보의 처짐은 식(5)로 1 차 자유도(degree of freedom)만 고려하여 식(6)과 같이 갤러킨 방법을 이용하여 해석을 진행한다. 식(6)의  $f_{beam}$  은 (4)의 좌항인 비선형 외팔보 방정식을 의미한다.

$$w(x,t) = \phi(x)q(t) \quad (5)$$

$$\int_0^1 \phi(x) \left\{ f_{beam}(w) - \gamma_2 \hat{f}_{elec}(w) - \gamma_3 \hat{f}_{vdw}(w) \right\} dx = 0 \quad (6)$$

#### 5. 해석 결과

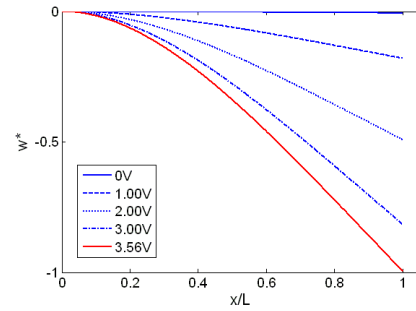
이번 장에서는 앞서 구한 운동방정식을 바탕으로 선형과 비선형 나노 외팔보 시스템에서 전압의 변화에 따른 나노튜브의 처짐(deflection)과 graphite 기저면에 달라붙는 pull-in 전압을 Table 1 의 파라미터를 적용하여 정적/동적 해석을 하였다.

##### 5.1 Static Analysis

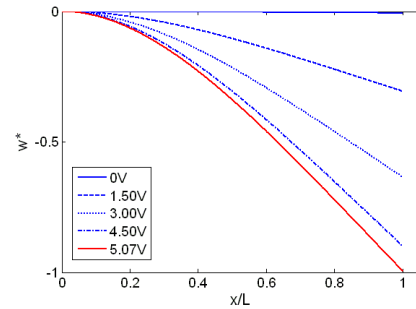
운동방정식에서 시간항을 제거한 선형 방정식으로부터 나노튜브와 graphite 기저면이 이루는 초기 간격에 변화를 주어, 나노튜브의 변형을 예측하였다. Fig. 4 는 초기 간격이 각각 4nm 일 때, 선형과 비선

형 모델에서의 전압에 따른 외팔보 나노튜브의 처짐 변화를 보여주며, 각각 3.56V 와 5.07V 에서 기저면에 달라붙는 pull-in 전압을 확인 할 수 있다. 또한 간격이 20nm 일 때 선형 모델 17.8V 에서 비선형 모델 25.4V 로 약 42%이상 pull-in 전압이 상승한 것을 알 수 있다(Fig. 5).

나노 외팔보의 기하학적 비선형을 고려할 경우 같은 전압을 인가했을 때 선형 모델보다 나노튜브의 변형이 작음을 확인할 수 있다. 즉, 비선형 경화 현상(hardening effect)에 의하여 pull-in 전압이 증가하며, 이러한 결과는 이전의 연구[4]와 같은 경향이다.

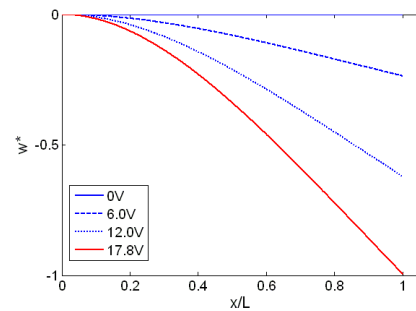


(a) Linear model

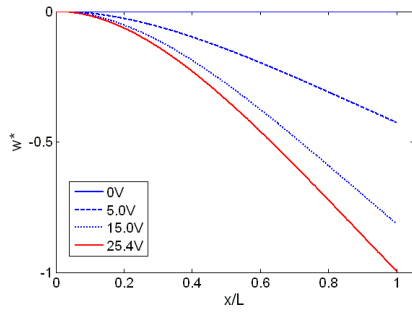


(b) Nonlinear model

Fig. 4 Non-dimensional nanocantilever beam deflection  $w^*$  with (a) linear and (b) nonlinear model with 4nm gap



(a) Linear model



(b) Nonlinear model

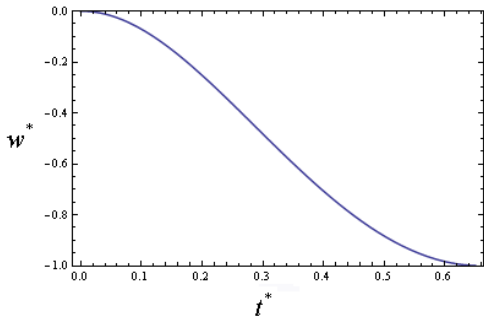
**Fig. 5** Non-dimensional nanocantilever beam deflection  $w^*$  with (a) linear and (b) nonlinear model with 20nm gap

### 5.2 Dynamic Analysis

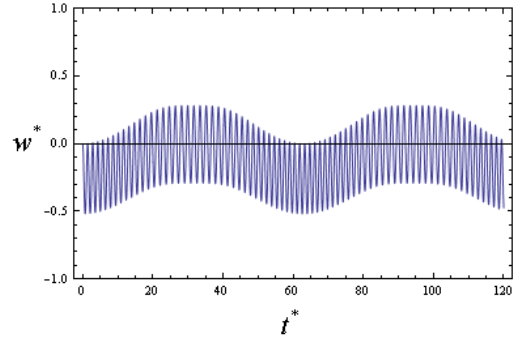
이번 절에서는 초기 간격이 4nm 인 나노소자에 DC/AC 전압을 인가하여 그 진동 특성과 dynamic pull-in 전압을 분석하였다. 외팔보의 1 차 모드에 해당하는 고유 진동수 근방(near resonance)과 상대적으로 저주파, 고주파에 해당하는 진동수의 경우로 나누어 해석을 진행하였다. Fig. 6 은 식(6)에서 구한 운동방정식을 Mathematica 에서 NDSolve 를 이용하여 0 초기 조건일 때 나노 외팔보의 시간 응답을 구한 것이다. 1 차 모드에 해당하는 외팔보 나노튜브의 고유 진동수는 약 3.3GHz 이다.

Fig. 6 에서 (a)의 경우 DC 전압만으로 3.25V 일 때 pull-in 현상이 일어난다. (a)의 Pull-in 전압보다 낮은 DC 전압과 추가의 AC 전압을 인가했을 경우(Fig. 6(b)) 고유 진동수 보다 저주파인 경우는 pull-in 이 발생하지 않는다. 하지만 외팔보의 1 차 고유 진동수 근방에 해당하는 주파수를 갖는 AC 전압을 인가했을 경우는 맥놀이(beat) 혹은 pull-in 현상이 일어날 수도 있다(Fig. 6(c)~6(e)). Fig. 6(f)의 경우 외팔보의 공진 주파수보다 더 높게 가진 함에도 불구하고 pull-in 현상이 발생하지 않았다.

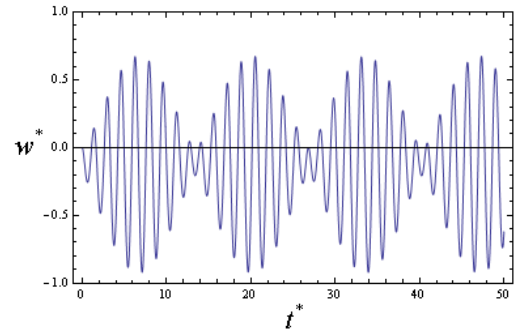
실제 나노 외팔보를 유용한 소자로 활용하기 위해서는 이러한 맥놀이나 동적 pull-in 현상을 사전에 예측하여 설계에 반영하는 것이 꼭 필요하다.



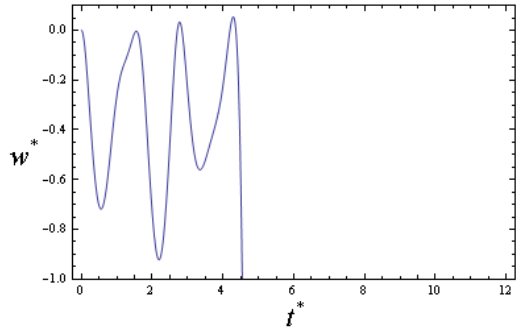
(a)  $V_0=3.25V, V_1=0, \Omega^*=0$



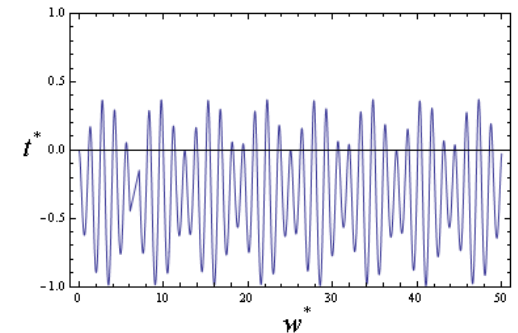
(b)  $V_0=1V, V_1=1V, \Omega^*=0.1$



(c)  $V_0=1V, V_1=0.5V, \Omega^*=3.516$

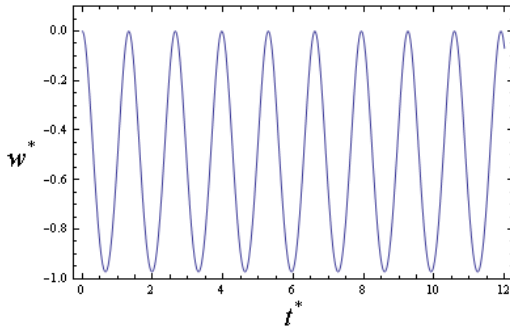


(d)  $V_0=0, V_1=3.4V, \Omega^*=3.516$



(e)  $V_0=2V, V_1=0.5V, \Omega^*=3.516$

## 참고 문헌



(f)  $V_0=0$ ,  $V_1=4.5V$ ,  $\Omega^*=100$

**Fig. 6** The motion of nanocantilever beam as applied voltage and frequency

## 6. 결 론

본 연구에서는 나노소자를 설계하는데 있어 외팔보 나노튜브 비선형 효과가 정적 혹은 동적 거동에 미치는 영향을 예측하였다. 그 결과 다음과 같은 결론을 도출할 수 있다.

- (1) 나노 외팔보 소자에서 처짐이 큰 경우 기하학적 비선형성을 무시할 수 없으며, 이 경우 비선형 특성이 증가하면 pull-in 전압도 증가하였다.
- (2) 나노 외팔보 소자에 인가되는 외부 전압의 DC/AC 값의 크기와 주파수에 따라 다양한 동적 거동을 나타낸다. 특히, 맥놀이나 동적 pull-in 또는 동적 불안정성 등은 나노소자의 성능에 영향을 미칠 수 있다.

(1) Peng, B., Locascio, M., Zapol, P., Li, S., Mielke, S. L., Schatz, G. C., and Espinosa, H. D., 2008, "Measurements of Near-Ultimate Strength for Multiwalled Carbon Nanotubes and Irradiation-Induced Crosslinking Improvements," *Nature Nanotechnology*, Vol. 3, pp 626-631.

(2) Byrne, E. M., McCarthy, M. A., Xia, Z., and Curtin, W. A., 2009, "Multiwall Nanotubes Can Be Stronger than Single Wall Nanotubes and Implications for Nanocomposite Design," *Physical Review Letters*, Vol. 103, pp 728-733.

(3) Dequesnes, M., Rotkin, S. V., and Aluru, N. R., 2002, "Calculation of Pull-In Voltages for Carbon-Nanotube-Based Nanoelectromechanical Switches," *Nanotechnology*, Vol. 13, pp. 120-131.

(4) Dequesnes, M., Tang, Z., and Aluru, N. R., 2004, "Static and Dynamic Analysis of Carbon Nanotube-Based Switches," *Journal of Engineering Materials and Technology*, Vol. 126, pp 230-237.

(5) Ke, C.-H., Pugno, N., Peng, B., and Espinosa, H. D., 2005, "Experiments and Modeling of Carbon Nanotube-Based NEMS Devices," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 53, pp 1314-1333.

(6) Ke, C.-H., 2009, "Resonant Pull-In of a Double-Sided Driven Nanotube-Based Electromechanical Resonator," *Journal of Applied Physics*, Vol. 105, pp 024301-024301-8.

(7) Bichoutskaia, E., Popov, A. M., and Lozovik, Y. E., 2008, "Nanotube-Based Data Storage Devices," *Materials Today*, Vol. 11, pp 38-43.

(8) Lee, S. W., Lee, D. S., Morjan, R. E., Jhang, S. H., Sveningsson, M., Nerushev, O. A., Park, Y. W., and Campbell, Eleanor E. B., 2004, "A Three-Terminal Carbon Nanorelay," *Nano Letters*, Vol. 4, No. 10, pp 2027-2030.

(9) Pokalyakin, V., Tereshin, S., Varfolomeev, A., Zaretsky, D., Baranov, A., Banerjee, A., Wang, Y., Ramanathan, S., and Bandyopadhyay, S., 2005, "Proposed Model for Bistability in Nanowire Nonvolatile Memory," *Journal of Applied Physics*, Vol. 97, pp 124306-124306-8.

(10) Kaul, A. B., Wong, E. W., Epp, L., and Hunt, B. D., 2006, "Electromechanical Carbon Nanotube Switches for High-Frequency Applications," *Nano Letters*, Vol. 6, No. 5, pp 942-947.

(11) Postma, H. W. Ch., Kozinsky, I., Husain, A., and Roukes, M. L., 2005, "Dynamic Range of Nanotube- and Nanowire-Based Electromechanical Systems," *Applied Physics Letters*, Vol. 86, pp 223105-223105-3.

(12) Chatterjee, S., and Pohit, G., 2009, "A Large Deflection Model for the Pull-In Analysis of Electrostatically Actuated Microcantilever Beams," *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 322, pp 969-986.