

## 탄소나노튜브 기반의 나노-가속도계에 관한 연구

송영진<sup>1</sup>, 이준하<sup>2\*</sup>

### A Study on Nano-Accelerometer based on Carbon Nanotube

Young-Jin Song<sup>1</sup> and Jun-Ha Lee<sup>2\*</sup>

**요약** 나노튜브를 기반으로 한 용량성 나노 가속도계에 대한 특성을 고전적인 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 연구하였다. 외부에서 공급된 힘을 이용하여 나노튜브의 위치를 제어할 수 있었고, 해당하는 위치에 의한 커패시턴스의 변화를 통하여 피드백 센싱을 할 수 있었다. 에너지 소모 측면을 고려하면, 나노 가속도계의 진동 특성은 초기 변위와는 무관하였으며, 이러한 측정 시스템은 진동하는 커패시턴스를 추적하여 가속도를 결정하고, 이것은 또한 공급된 힘과 용량성 힘, 반데르발스 힘, 결합력, 반발력과 같은 힘들이 균형을 이루는 위치를 결정할 수 있다.

**Abstract** We investigated the characteristics of a capacitive nano-accelerometer based on carbon nanotube by means of classical molecular dynamics simulations. The position of the telescoping nanotube was controlled by the externally applied force and the feedback sensing was achieved from the capacitance change. Considering energy dissipation, the oscillation features of the nano-accelerometers were similar, regardless of their initial displacements. The capacitance variations, which were almost linearly proportional to the applied acceleration, were monitored within an error tolerance.

**Key Words** : Nano-Accelerometer, Carbon Nanotube, Molecular Dynamics.

### 1. 서론

인공적인 나노 기계에 대한 가능성은 Drexler에 의해 처음으로 대두되었다 [1]. 현재 나노 기술의 혁명적인 발전으로 인하여, 나노 크기 수준의 공학적인 기계를 만들 수 있는 가능성이 현실화 되고 있다 [2]. 특히, 탄소 나노튜브(CNT)는 나노 크기 수준의 기계와 센서를 구현하는데 유망한 나노 물질로 고려되고 있다 [3] 가속도계는 각종 다양한 소자에서 센서로써 사용될 수 있다. 일정한 감도를 가지는 용량성 가속도계가 개발되어왔고 [4,5], 나노튜브를 기반으로 만들어진 센서들과 액츄에이터(actuator)도 개발되어왔다 [6]. 최근에는 수직으로 배열된 CNT를 사용하여, 나노 크기 수준의 가속도계에 대한 연구도 진행되고 있다 [7].

또한 CNT 기반의 전계 방출 압력 센서가 가속도계 및 촉각 센서에 사용될 수 있음이 밝혀졌다 [8]. CNT 발진기를 이용한 나노 가속도계인 경우, 감지 시간과 범위, 민감도와 신뢰성은 CNT 발진기의 크기, 즉 지름, 길이,

CNT 발진기의 개수, 전극들 사이의 간격 등과 같은 요소와 연관이 매우 깊다. 본 논문에서는 나노튜브를 기반으로 한 용량성 CNT 가속도계에 대한 특성을 조사하였다. 나노튜브의 위치는 외부에서 공급되는 힘에 의해 조절되고, 피드백 감지는 커패시턴스의 변화로부터 얻어진다. 고전적인 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 이중벽 나노튜브에 기반을 둔 이러한 소자가 나노 크기 수준의 용량성 가속도계에 사용될 수 있음을 검증하였다.

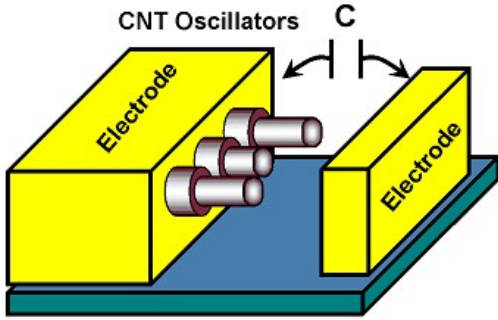
### 2. 나노튜브 가속도계 설계

그림 1은 나노튜브에 기반을 둔 가속도계의 개념적인 구조를 표시하고 있다. CNT와 연결되어 있는 1차 전극과 2차 전극 사이에는 공기로 채워져 있으며, 양쪽 전극 사이에서 전기적인 커패시턴스의 변화를 감지하는데 쓰인다. 이러한 용량성 시스템은 운동 감지기, 가속도계, 음향 센서나 서로 다른 종류의 변환기를 위한 시스템들에 사용될 수 있다.

<sup>1</sup>건양대학교 전자정보공학과 (부교수)

\*교신저자: 이준하 (junha@smu.ac.kr)

<sup>2</sup>상명대학교 컴퓨터시스템공학과 (조교수)



[그림 1] 나노-가속도계의 기본 개념도

CNT 가속도계의 핵심 부분은 다중벽 CNT 안에서 직진성으로 왕복 운동하는, 매우 낮은 벽간 마찰력을 가지는 CNT 발진기인데 이것에 관한 연구는 기초적인 연구는 이루어져 있다 [9,10]. 이러한 CNT 발진기는 그림 1에서 보는 바와 같이 금속 전극에 다중벽 CNT가 포함되어 있는 구조이다. 이러한 시스템을 제작하기 위해서는 전극과 CNT가 식각 공정에 의해서 수 나노 미터의 간격으로 균일하게 제작되어야 한다. 나노튜브를 이용한 용량성 가속도계는 5 가지 힘에 의해 균형을 이루면서 동작한다.

첫 번째는 CNT와 전극 사이의 전위차가 발생시키는 용량성 힘( $F_C$ )이다. CNT 캐패시턴스와 전극 사이에서의 용량성 힘은 하전된 평면과 구 사이의 정전기력[11]을 모델링하여 쉽게 얻을 수 있다. 알려진 바와 같이 하전된 평면과 구 사이의 커패시턴스( $C$ )와 정전기력( $F_C$ )은 다음과 같은 근사식으로부터 해석적으로 계산할 수 있다.

$$C(z) = 2\pi\epsilon_0 R \int_0^\pi \frac{\sin^2 \theta}{\theta \left[ \frac{z}{R} + 1 - \cos \theta \right]} d\theta \quad (1)$$

$$F_c(z) = \pi\epsilon_0 \left[ \frac{R^2}{z(z+R)} \right] V^2 \quad (2)$$

여기서  $z$ 는 평면과 구 사이의 간격이고,  $R$ 은 구의 반지름,  $V$ 는 전압,  $\epsilon_0$ 은 진공일 때 유전율,  $\theta$ 는 구좌표계 시스템에서의 극좌표이다.

두 번째 힘은, 반데르발스(van der Waals) 힘( $F_{vdW}$ )으로 움직이는 중심 CNT는 용량성 힘에 의해서 다중벽 CNT에서 빠져나올 수 있고 바깥쪽으로 움직일 수 있다. 움직이는 CNT가 일부분이 밀려나올 때, 초과 반데르발스(van der Waals) 에너지에 의해 생기는 흡인력이 움직이는 CNT에 영향을 미치고, 이 크기는 다중벽 CNT 셔틀(shuttle)의 복원력과 같다. 세 번째 힘은 CNT가 게이트

전극에 접근할 때 발생하는 CNT-전극 결합력( $F_B$ )은 인력이다. 또한  $F_R$ 은 상호 벽간의 반발력을 의미한다. 마지막 힘으로는, 실제 가속을 위한 힘( $F_{ext}$ )이다. 따라서 외부에서 CNT 셔틀에 가해질 때, 전체 힘( $F_T$ )은 다음 식(3)과 같이 모델화 할 수 있다.

$$F_T = F_{ext} + F_C + F_{vdW} + F_B + F_R \quad (3)$$

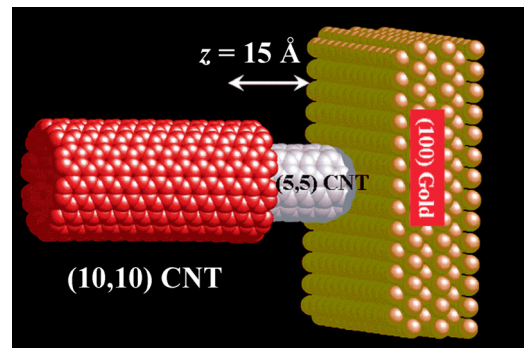
그러므로 평형 상태에서, CNT 셔틀의 가속( $a_{CNT}$ )은 외부에서 공급된 힘에 의해 유도되고, 이는 다음 식(4)로부터 얻어진다.

$$a_{CNT}(z) = \frac{F_{ext}(z)}{m_{CNT}} \quad (4)$$

여기서  $m_{CNT}$ 는 CNT 셔틀의 질량이다.

### 3. 분자동역학 시뮬레이션 방법

CNT 가속도계는 내부 셸(shell)의 개수와는 상관없이 다중벽 CNT를 고려한 개념이지만, 기본적으로 CNT 가속도계는 이중벽 CNT를 기본으로 하는데, 그림 2에서 보이듯이 (10,10) CNT 안에 (5,5) CNT가 들어있는 형태이며, (10,10)과 (5,5) CNT의 길이는 각각 20 Å과 32 Å이다.



[그림 2] 끝이 열린 (10,10) CNT와 캡이 씌워진 (5,5) CNT로 구성된 이중벽 CNT를 기반으로 한 CNT 가속도계

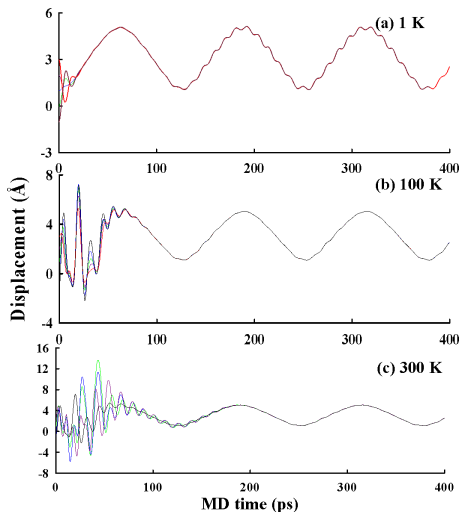
CNT 가속도계가 만들어질 때, 안쪽 CNT가 진동 동작을 하기 위해서 바깥쪽 CNT는 고정되어 있거나, 다른 물질 안에 포함되어 있어야 한다. 그러므로 바깥쪽 CNT의 질량 중심은 일정하게 유지되어야 하는데, 이를 위해 각각의 MD(Molecular Dynamics) 단계마다 위치 재조정 방

법을 사용하였다. 게이트(Gate) 전극으로는 (100) Au가 10개 층으로 구성되어있다고 가정하였다. 최적화된 (5,5) CNT의 맨 끝 가장자리와 게이트 표면 사이의 거리는 15 Å이다.

본 연구에서 분자동역학 시뮬레이션을 하기 위해 두 가지의 서로 다른 전위식이 사용되었다. 탄소-탄소 사이 반응에는 Tersoff-Brenner 전위식[12]이 사용되었는데, 이것은 탄소 시스템에 널리 사용되는 전위식이다. 또한 탄소의 긴 범위에서의 반응은 Ulbricht 등[13]이 구한 Lennard-Jones 12-6 (LJ12-6) 전위식을 사용하였다.

#### 4. 해석 결과 및 검토

MD 시뮬레이션을 수행하는 동안 3 가지의 온도에서 5 개의 서로 다른 초기 위치를 가정하고 4 V의 게이트 전압으로 CNT 가속도계의 진동 동작을 연구하였다. 외부 전극과 바깥쪽 CNT의 끝과의 초기 간격은 15 Å으로 정하여, 게이트에 4 V가 가해져 진동이 일어날 때 안쪽 CNT 발진기가 외부 전극과 충돌하지 않게 하였다. 정현파 형태를 가지고 변화하는 외부 힘이 CNT 가속도계에 가해지면, 8 GHz의 주파수를 가지는  $0.2\sin(2\pi ft) + 0.2e \text{ V}/\text{\AA}$  형태의 힘이 그림 3과 같이 해석되었다.

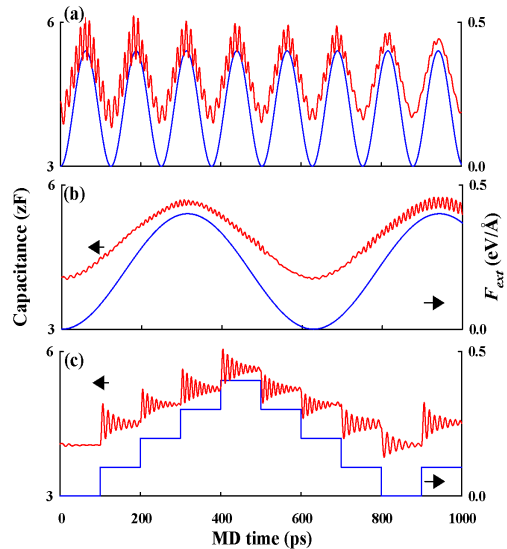


[그림 3] 3가지 온도 변화와 5가지 초기 변위에 대한 MD 시뮬레이션 결과

비록 CNT 가속도계의 초기 변위는 서로 다르지만, 모든 MD 시뮬레이션 결과는 공급된 정현파 형태의 힘에

비례하여 점진적으로 CNT 가속도계의 위치가 변함을 알 수 있었다. 모든 경우에, 안쪽 CNT가 외부 힘에 의해 여기된다 하더라도, 초기 변위에 비해 안정한 상태의 발진이 이루어져 공급된 힘과 동기화가 된다. 일반적으로 CNT 가속도계의 운동 에너지는 대부분 바깥쪽 CNT의 끝에서 CNT 가속도계의 병진운동 또는 흔들리는 운동을 하는 동안 발생하는 마찰에 의해 소비되고, 에너지가 소비되고 난 후 CNT 가속도계의 진동 모양은 최종적으로 초기 변위가 없는 형태로 변한다. CNT 가속도계의 운동 에너지는 급격하게 처음 100 ps 동안 소모되고, CNT 가속도계의 진동 모양은 모두 유사한 모양을 가진다. 온도가 증가할수록, 안정한 상태로 진동이 유지되는데 필요한 시간이 증가한다.

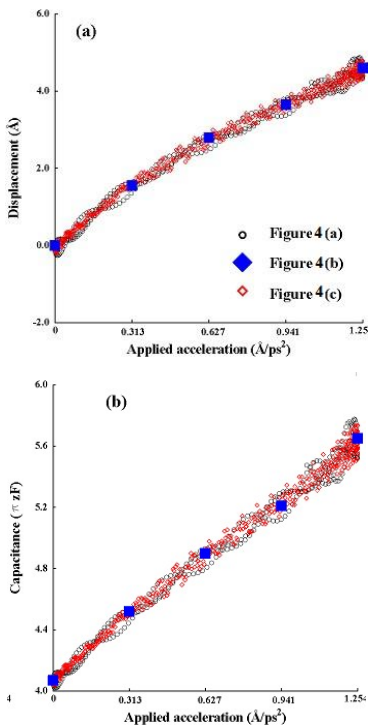
그림 4(c)는 100 ps 마다 공급되는 힘이  $0.1 \text{ eV}/\text{\AA}$  만큼 계단식으로 증가하거나 감소하는 경우에, MD 시간에 따른 커패시턴스 변동을 보여준다.



[그림 4] 300K에서 시간에 따른 커패시턴스 변화 해석 결과 (a) 8 GHz (b) 1.6 GHz (c) 100 ps 마다 계단 모양으로 변하는 함수에서 공급된 힘이  $0.1 \text{ eV}/\text{\AA}$  만큼 증가하거나 감소할 때, MD 시간에 따른 커패시턴스 변동

공급된 힘이 변화할 때 마다, 커패시턴스가 발진하다가 점차 감소하고, 결국 CNT 발진기는 평형 점으로 안착한다. 발진 진폭의 점차적인 감소는 CNT 발진기의 에너지 소비를 나타낸다. 커패시턴스 변동은 공급된 힘의 지속적인 변화 뿐만 아니라 공급된 힘의 급격한 변화와 관찰되는 자료로부터 얻어지는 가속도로부터도 구해질 수

있다. 변위 대 가속도와 커패시턴스 대 가속도에 대한 자료는 그림 4의 자료를 이용하여 그림 5(a)-(b)에서 각각 보여주고 있다. 그림 5(a)-(b)에서 작은 기호와 큰 기호는 각각 그림 4(a)-(b)와 그림 4(c)를 나타낸다. CNT 가속도계의 변위는 그림 5(a)에서 보는 바와 같이 공급되는 가속도와는 비선형 관계이지만, CNT 가속도계의 커패시턴스 변동은 거의 공급되는 가속도와는 비례함을 그림 5(b)를 통하여 알 수 있다. 또한 가속도는 자체 발전에 해당하는 CNT 가속도계의 피크-피크와 관련된 오차 한계를 가지고 커패시턴스 변동에 의해 관찰 가능하지만, 이 값은 공급되는 힘의 주파수와는 무관하다. 오차 한계는 공급되는 가속도가 증가할수록 늘어난다.



[그림 5] 그림 4. 의 자료를 이용한 (a) 변위와 (b) 커패시턴스 대 공급된 가속도.

## 5. 결론

나노튜브를 기반으로 한 용량성 나노 가속도계에 대한 특성을 고전적인 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여 연구하였다. 외부에서 공급된 힘을 이용하여 텔레스코핑 나노튜브의 위치를 제어할 수 있었고, 해당하는 위치에 의한 커패시턴스의 변화를 통하여 피드백 센싱을 할 수 있었다. 에너지 소모 측면을 고려하면, 나노 가속도계의 진

동 특성은 이것의 초기 변위와는 서로 무관하였다. 이러한 측정 시스템은 진동하는 커패시턴스를 추적하여 가속도를 결정하고, 이것은 또한 공급된 힘과 용량성 힘, 반데르발스 힘, 결합력, 반발력과 같은 힘들이 균형을 이루는 위치를 결정할 수 있다. 공급된 가속도에 거의 선형적으로 비례하는 커패시턴스 변동은 오차 한계 이내에서 측정되었다.

## 참고문헌

- [1] Drexler K E, *Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing, and Computation*, New York: Wiley, 1992.
- [2] Hierold C, From micro-to nanosystems: mechanical sensors go nano, *J. Micromech. Microeng.* 14 S1-11, 2004.
- [3] Iijima S, Helical microtubules of graphitic carbon, *Nature* 354 56-85, 1991.
- [4] Mineta T, Kobayashi S, Watanabe Y, Kanauchi S, Nakagawa I, Suganuma E and Esashi M, Three-axis capacitive accelerometer with uniform axial sensitivities, *J. Micromech. Microeng.* 6 431-5, 1996.
- [5] Chau K H-L, Lewis S R, Zhao Y, Howe R T, Bart S F and Marcheselli R G, An integrated force-balanced capacitive accelerometer for low-g applications, *Sensors and Actuators A* 54 472-6, 1996.
- [6] Baughman R H, Cui C, Zakhidov A A, Iqbal Z, Barisci J N, Spinks G M, Wallace G G, Mazzoldi A, De Rossi D, Rinzler A G, Jaschinski O, Roth S and Kertesz M, Carbon Nanotube Actuators, *Science* 284 1340-4, 1999.
- [7] Lee C L, Noy A, Swierkowski S P, Fisher K A and Woods B W, *Carbon nanotube array based sensor*, US Patent 6,946,851, 2005.
- [8] Qian K, Chen T, Yan B, Lin Y, Xu D, Sun Z and Cai B, Research on carbon nanotube array field emission pressure sensors, *Electron. Lett.* 41 824-5, 2005.
- [9] Cumings J and Zettl A, Low-Friction Nanoscale Linear Bearing Realized from Multiwall Carbon Nanotubes, *Science* 289 602-4, 2000.
- [10] Zheng Q and Jiang Q, Multiwalled Carbon Nanotubes as Gigahertz Oscillators, *Phys. Rev. Lett.* 88 045503, 2002.
- [11] Hudlet S, Saint Jean M, Guthmann C and Berger J, Evaluation of the capacitive force between an atomi

c force microscopy tip and a metallic surface, Eur. Phys. J. B 2 5-10, 1998.

- [12] Tersoff J, Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties, Phys. Rev. B 38 9902-5, 1998.
- [13] Ulbricht H, Moos G and Hertel T, Interaction of C60 with Carbon Nanotubes and Graphite, Phys. Rev. Lett. 90 095501, 2003.

---

### 송 영 진(Song Young-Jin)

[정회원]



- 1983년 2월 : 중앙대학교 전자공학과 (공학사)
- 1985년 2월 : 중앙대학교 전자공학과 (공학석사)
- 1993년 8월 : 중앙대학교 전자공학과(공학박사)
- 1995년 3월 ~ 현재 : 건양대학교 전자정보공학과 부교수

<관심분야>

마이크로프로세서 응용, 반도체 공정개발 및 장비개발

---

### 이 준 하(Lee Jun-Ha)

[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, 영상처리시스템등