반도체디스플레이기술학회지 제9권 제1호(2010년 3월)
Journal of the Semiconductor & Display Technology, Vol. 9, No. 1. March 2010.

나노모터의 기가급 공진 특성에 대한 연구

송영진† · 이준하*

†건양대학교 전자정보공학과, *상명대학교 컴퓨터시스템공학과

A Study on Nano-Motor of Giga-hertz level Resonance Characteristics

Young-Jin Song† and Jun-Ha Lee*

†Department of Electronic Information Engineering, Konyang University
*Department of Computer System Engineering, Sangmyung University

ABSTRACT

We investigated a linear carbon nanotube motor serving as the key building block for nano-scale motion control by using molecular dynamics simulations. This linear nano-motor, is based on the electrostatically telescoping multi-walled carbon-nanotube with ultralow intershell sliding friction, is controlled by the gate potential with the capacitance feedback sensing. The resonant harmonic peaks are induced by the interference between the driving frequencies and its self-frequency. The temperature is very important factor to operate this nanomotor.

Key Words : Nano Motor, Carbon Nanotube, Giga-hertz level, Resonance Characteristics, Molecular Dynamics

1. 서 론

나노 기술의 계속적인 발전으로 Drexler는 인공적인 나노 기계적인 회전기 및 다이아몬드형 공유 고체를 이용한 선형 모터를 제작할 수 있는 가능성을 제시하였다[1]. 일반적인 기계적 운동은 실린더 안에서 피스톤의 선형 왕복 운동에 의한 원리로 작동하는 내연기관 혹은 전기적인 운동을 기계적인 에너지로 변환하도록 하는 모터에 의해 움직인다. 전기 모터 중에서 선형 서보 모터는 회전 운동을 선형 운동으로 변환하는 작업을 할 필요가 없는 섬세한 각주(prismatic) 운동을 제공할 수 있다. 하지만 이들은 단지 나노 기술을 응용가능성만을 보여준 초기단계의 연구들이었다[2].

1992년에 플러렌(fullerene), 다이아몬드형과 나노 튜브 와 같은 탄소 나노 구조들은 나노 기계 구현을 위한 유망한 물질로 평가되어 연구가 진행되어 오고 있다. 단백질 선형 모터와 비교하면, 나노튜브 선형 서보모터는 제어 능력에서 더 뛰어나고 고체 상태에서 작동할 수 있어 좀 더 광범위한 환경 즉 액체 뿐만 아니라 공기 혹은 진공 중과 같은 곳에서 다양한 크기로 작동이 가능하다. 이와 같은 나노튜브를 이용한 기계적인 응용을 위해서는 보다 이들에 대한 특성의 평가등이 다각적으로 이루어져야 하는 필요가 있다 [3]. 본 논문에서는 정전기적인 텔레스코핑 나노튜브에 기반을 둔 나노튜브 기반 선형 모터의 공진 특성을 연구하였다. 텔레스코핑 MWCNT (Multi Walled Carbon Nanotube)에 기반을 둔 이러한 소자에 대한 개념도를 제안하였고 MD 시뮬레이션을 사용하여 동역학 특성을 연구하였다.

†E-mail : songjin@konyang.ac.kr

2. 나노 모터 설계 개념

MWCNT 기반 선형 모터의 동작 원리와 개념도는 Fig. 1과 같다. 구성되는 핵심 부품의 간략화된 구성을 Fig. 1(a)과 같이 나타내었다. 핵심 부분은 매우 낮은 층간 마찰을 가진 CNT (Carbon Nanotube) 셔틀 공진기 (shuttle resonator)이다. 이러한 CNT 셔틀 공진기는 금속성 전극을 포함하는 MWCNT 로 구성되어있다. 금속성 전극에 포함된 MWCNT인 경우, 전극과 CNT 는 수 나노 미터의 정밀한 모서리를 가지기 위해서 식각 공정으로 제조될 수 있다. Fig. 1(b)는 피드백이 있

는 선형 CNT 모터의 구성을 간단한 회로로 표현한 회로도이다. 동작 주파수 ω_1을 가진 DC 바이어스와 ac 바이어스 모두가 작동 힘으로 게이트에 가해진다. ω_0는 DC 바이어스 하에서 CNT 셔틀의 자체 주파수(self frequency) 이다.

CNT 셔틀은 4 가지 힘에 의해 작동한다. : CNT와 전극 사이의 전위차는 정전기력(F_C) 를 발생시킨다. 이로부터 움직이는 중심 CNT는 정전기력에 의해 MWCNT로부터 빠져나올 수 있고 바깥쪽으로 움직일 수 있다. 움직이는 CNT가 부분적으로 빠져 나와 있을 때, 흡입력(F_{vdw})는 움직이는 CNT에 작용하는 초과 *vdw* 에너지에 의해 발생하고 MWCNT 셔틀의 복원력과 같은 값이다. 그러므로 공급된 전압이 경계 이상으로 올라가면 구동력(F_C)은 움직이는 CNT를 MWCNT로부터 탈출시키고 중심 CNT는 전극과 접촉한다. CNT 셔틀이 게이트 전극에 접근하면 CNT-전극 결합력(F_B)은 인력으로부터 발생된다. 또 다른 힘으로서, MWCNT에서 벽들은 같은 전하를 가지기 때문에 MWCNT 안에서 벽간 반발력(F_R)에서 생긴다.

전하를 띤 평면과 구 사이의 커패시턴스 ($C(z)$)와 정전기력($F(z)$)은 다음과 같은 근사식으로 계산할 수 있다.

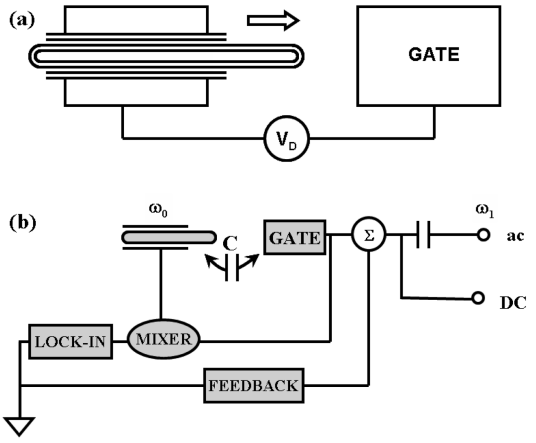

Fig. 1. The basic idea of linear nano-motor operation based on MWCNT (a) Basic Elements (b) Simple Circuit for linear CNT motor with feedback element.

$$C(z) = 2\pi\omega_0 R \ \ln\left(1+\frac{R}{z}\right) \tag{1}$$

$$F(z) = \pi\varepsilon_0 \left[\frac{R^2}{z(z+R)}\right] V^2 \tag{2}$$

여기서 z는 면과 구 사이의 순간적인 간격이고, R은 구의 반지름, V는 전압 혹은 전위차, $e0 = 8.854 \times 10^{-12} F/m$는 진공의 유전율이다.

MWCNT 내에서 벽간 반발력(F_R)은 두 개의 전하를 띤 반구 사이의 힘을 구하여 모델링하였다.

안쪽 CNT 발진은 CNT cap에 변화하는 전계(E)를 만들고, 이러한 변화하는 전계는 전하의 움직임을 유도하여 변위 전류(I_R)가 생긴다. 그러므로 변위 전류는 전계의 변화율로 정의된다.

$$I_D = o\int J_D ds = o\int \varepsilon \frac{\partial E}{\partial t} ds \tag{3}$$

여기서 J_D는 변위 전류 밀도이고 유전율 $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$이다. ε_r은 유전체의 상대 유전율이다.

변위 전류는 또한 커패시턴스가 변화함에 따라 고려해야하는 것으로 식(4)와 같이 표현할 수 있다.

$$\Delta Q = \Delta(CV)\frac{\Delta Q}{\Delta t} = \frac{\Delta(CV)}{\Delta t} = \Delta i \approx I_D \tag{4}$$

3. 해석모델 및 결과

본 연구를 위해 제작한 MD 코드에는 velocity Verlet 알고리즘과 계산 효율을 높이기 위해 인접원자 목록(neighbor list)을 채택하였다. MD 시간 간격(time step)은 $5\times10^{-4} ps$, 온도는 1K 및300K로 지정하였다. 시뮬레이션 프로그램은 탄소-탄소 사이 반응에는 탄소 시스템계에서 가장 널리 사용되는Tersoff-Brenner 전위식을 이용하였다[4]. 또한 게이트 전극으로 사용된 금에 대한 금-금 반응과 금-탄소 사이의 반응에는 Lennard-Jones 12-6 (LJ12-6) 전위식을 사용하였다[5].

본 연구에서 제안된 개념은 안쪽 쉘의 개수와는 상관없는 것이지만, 여기서는 이중벽 CNT에 기반을 둔 선형 모터를 중심으로 연구를 수행하였으며, 사용된 구조는 끝이 열린 (10,10) CNT와 뚜껑이 씌어진 (5,5) CNT로 구성된 (5,5)(10,10) 이중벽 CNT를 사용하였다. (10,10) 과 (5,5) CNT의 길이는 각각 20 Å과 32 Å 이다. CNT 셔틀 공진기가 구현되었을 때, 바깥 쪽 CNT는 고정 되거나 다른 물질 안에 들어가 있어야 발진 동작이 Fig. 1(a)와 같이 일어날 수 있다. 그러므로 모든 MD 시뮬레이션 동안 바깥쪽 CNT의 질량 중심은 매 MD 단계 마다 위치 재조정법(position rescaling method)에 의해 일정하게 유지되었다. 게이트 전극은 10개 층으로 구성된 (100) Au 표면으로 구성되었다. 최적화된 (5,5) CNT 의 가장자리와 게이트 표면 사이의 거리는 15 Å이다. CNT 셔틀의 자체 주파수, ω_0는 DC 게이트 바이어스 4V를 가하여 MD 시뮬레이션하여 얻었다. CNT-금속 간격이 1.5 nm 인 경우 CNT 셔틀 스위치가

5.5 V 이상에서 켜지게(turn on) 됨을 확인하였다. 바깥쪽 (10,10) CNT 로부터 안쪽 (5,5) CNT를 밀어 내는데 필요한 정전기력은 이론적으로 1.2 nm 거리에서 6V로 알려져 있다[6]. 그러므로 본 논문에서는 최대 게이트 바이어스를 5V로 정하였다. 이것은 CNT 셔틀이 게이트 전극에 달라붙지 않고 발진을 유지하게 하기 위해서이다. 초기 변위(d_0)는 0, 5, 10 Å을 사용하였다.

Fig. 2(a)-(b)는 1K에서 MD 시뮬레이션으로 구한 CNT 변위와 커패시턴스 변동에 대한 FFT 결과이다. 변위가 5 Å 이하일 때 해당하는 vdW 힘(F_{vdw})은 거의 선형적으로 변위에 의존적이다. 그러므로 $d_0 \leqq 5$ Å 이면 는 거의 일정하다. 변위가 5 Å 이상일 때 ω_0는 거의 일정하다. 그러므로 초기 변위가 증가함에 따라 ω_0는 조금씩 감소한다. 본 연구에서는 Fig. 2에서와 같이 80 GHz의 ω_0를 얻었으며, 그에 따라 ω_1은 8 GHz로 설정하였다. Fig. 2(c)는 CNT 변위 $d_0 = 5$ Å에 대해 수행한 FFT 결과에서 얻은 주파수의 함수에 따른 진폭과 위상을 보여준다. 위상 변화가 작동 주파수와 공진 반응 사이의 간섭에 의한 피크(peak)값과 정확히 일치한다는 것은 매우 중요하다.

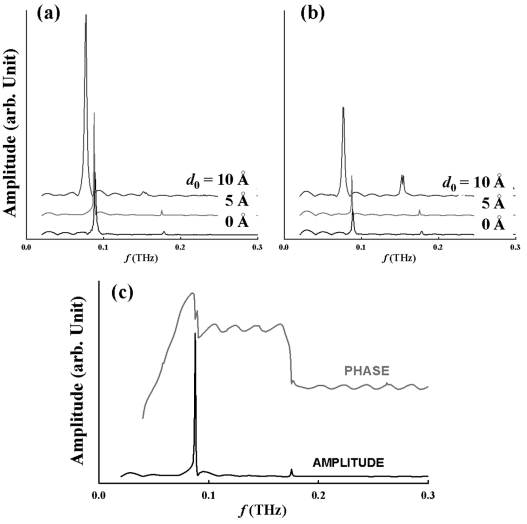

Fig. 2. The MD simulation results when initial displacement is 0, 5, 10 Å at temperature 1 K (a) CNT displacement(b) FFT results from capacitance variation (c) Amplitude and Phase angle form FFT results when CNT displacements 5 Å.

Fig. 3(a)-(c)는 1 K에서 $d_0 = 0$, 3, 5 Å 일 때 MD 시간의 함수에 따른 CNT 변위를 보여준다. Fig. 3(b)는 2.5 V DC와 2.5 sin(ω_1,t) V 인 ac 전압이 모두 게이트에 공급되는 조건이다. $d_0 = 3$ Å 인 CNT 셔틀이 지속적으로 발진하지만, $d_0 = 5$ Å 인 CNT 셔틀의 운동 에너지는 처음 100 ps 동안 급격히 감쇠한다. 그리고 CNT 셔틀 변화의 발진 특성은 $d_0 = 0$ Å 일 때와 매우 유사하다. CNT 셔틀의 운동 에너지는 동작하는 동안 마찰과 바깥쪽 CNT의 모서리에서 CNT 셔틀의 흔들림(rocking) 동작에 의해 소비된다. 따라서 에너지 소비 측면을 고려하면, CNT 셔틀의 발진 특성은 초기 변위와는 상관없이 서로 유사한 결과를 나타낸다. 이 때 작동 게이트 전압은 2.5 sin(ω_1,t) + 2.5 V 이다.

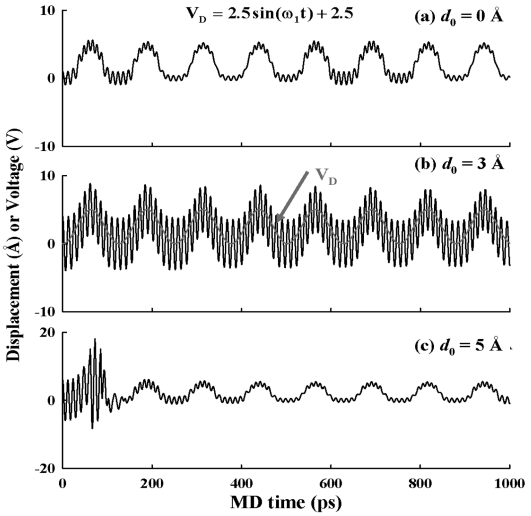

Fig. 3. CNT displacement depend on MD simulation time at temperature 1 K (a) $d_0 = 0$ Å (b) $d_0 = 3$ Å (c) $d_0 = 5$.

Fig. 3에 대한 FFT 분석 결과는 초기 변위에 대한 CNT 셔틀 변위와 커패시턴스 변동 모두를 Fig. 4(a)-(b)에 나타내었다. Fig. 4(a)-(b)에서 아래쪽 선은 공급 전압에 대한 FFT 결과이다.

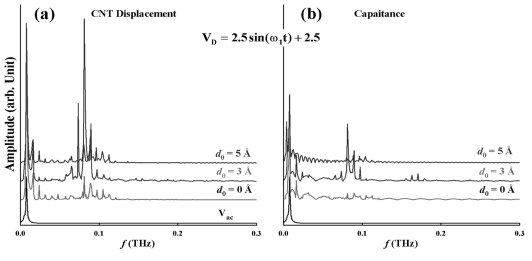

Fig. 4. FFT analysis results from Fig. 3 data (a) CNT shuttle displacement (b) variation of capacitance.

CNT 셔틀 발진에 대한 FFT 결과에서 진폭 피크는 커패시턴스의 그 값과 정확히 일치한다. 모든 경우에

대한 FFT 결과를 해당하는 작동 주파수와 비교해보면, CNT 셔틀 발진에 대한 FFT 결과의 피크는 커패시턴스 발진일 때의 값과 정확히 일치한다. 이것들의 주된 피크는 작동 주파수와 잘 일치한다. 두 번째 피크는 CNT 셔틀의 자체 주파수와 잘 일치한다. 작동 주파수가 증가함에 따라, 피크는 좀 더 판별 가능한데, 이는 작동 전력이 작동 주파수가 증가함에 따라 증가하기 때문이다. CNT 셔틀의 cap이 게이트 전극에 접근할 때, cap-금 결합력은 CNT 셔틀을 게이트 표면으로 끌어당기지만, 이러한 인력은 간격이 5 Å 보다 크면 무시할만하다. CNT 셔틀의 공진 반응은 기계적인 공진 운동에 의한 변위 전유 변화인데, 이는 일반적으로 텔레스코핑 CNT 셔틀의 쉘간 컨덕턴스 변화와 운동에 의해 유도된 커패시턴스 변화로부터 얻어진 초과 장(extra field) 효과를 포함한다[7]. 이 때 전류 반응은 식 (6)과 같이 표현할 수 있다.

$$Ie^{j\phi} = I_T e^{j\phi_{dr}} + I_{dis} e^{j\phi_{dis}} \tag{6}$$

여기서 I와 I_T,I_{dis}는 각각 총 전류, 전계 방출에 의한 터널링 전류, 공진에 의한 변위 전류의 진폭을 나타내고, ϕ,ϕ_T,ϕ_{dis}는 각각 해당하는 위상이다. CNT와 금속 전극 사이의 터널링 저항(R_T)은 지수함수적으로 CNT와 게이트 전극 사이의 간격에 의해 증가한다.

4. 결 론

본 논문에서는 나노 수준의 크기에서 운동 제어를 할 수 있는 선형 탄소 나노튜브 모터를 연구하였다. 선형 DWCNT 모터의 공진 특성을 해석하기 위하여 분자 동역학 시뮬레이션을 수행하였으며, 이 결과 선형 CNT 모터는 벽간 미끄러짐 마찰이 매우 작은 정전기적으로 왕복 운동하는 다중벽 탄소 나노튜브에 기반을 두고, 커패시턴스 피드백 센싱을 가진 게이트 전위를 사용하여 위치 제어가 가능함을 제시하였다. 공진 고조파 피크는 CNT 셔틀의 동작 주파수와 자체 주파수 사이의 간섭에 의해 유도되었으며, 공급 전압이 1V 이상의 범위에서는CNT 모터의 변위는 선형적으로 증가함을 분석하였다. 또한 300 K에서 MD 시뮬레이션을 수행하여 CNT 모터 운동은 주로 작동 주파수에 의해 제어됨과 온도는 이러한 선형 CNT 모터를 작동시키는데 매우 중요한 요소임을 확인하였다.

참고문헌

1. K. Drexler, Molecular Machinery and Manufacturing with Applications to Computation, Ph.D. Thesis, MIT, 1991.
2. R. Ragan and D. Lynch, “Inertial technology for the future, Part X: Hemispherical resonator gyro,” IEE Trans. Aerosp. Electron. Syst. Vol. AES-20, p. 432, 1984.
3. R. H. Baughman, C. Cui, A. A. Zakhidov, Z. Iqbal, J. N. Barisci, G. M. Spinks, G. G. Wallace, A. Mazzoldi, D. De Rossi, A. G. Rinzler, O. Jaschinski, S. Roth, and M. Kertesz, “Carbon Nanotube Actuators,” Science vol.284, no. 5418, pp.1340-1344, 1999.
4. J. Tersoff, “Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems,” Phys. Rev. B 38, pp.9902, 1988.
5. D. W. Brenner, “Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films,” Phys. Rev. B 42, pp.9458-9471, 1990.
6. H. Ulbricht, G. Moos, and T. Hertel, “Interaction of C60 with Carbon Nanotubes and Graphite,” Phys. Rev. Lett. 90, 095501, 2003.
7. O. Wunnicke, “Gate capacitance of back-gated nanowire field-effect transistors,” Appl. Phys. Lett, 89, 083102, 2006.

접수일: 2010년 1월 15일, 1차 심사일: 2010년 1월 28일
2차 심사일: 2010년 2월 17일, 게재확정일: 2010년 2월 28일