

## 나노튜브 임베디드 비휘발성 메모리 소자 특성 연구

강정원\*, 변기량\*, 황호정\*

\*중앙대학교 전자전기공학부

### 초록

본 논문에서는 탄소나노튜브 기반 비휘발성 메모리 소자를 설계하고 분자동역학 방법을 이용하여 이중벽 탄소나노튜브 구성된 소자에 대하여 동작 특성을 분석하였다. 탄소나노튜브는 탄소-탄소 반데르발스 힘과 탄소나노튜브-금속 결합력 간의 균형점에서 국부적으로 안정화 되도록 하는 방법으로, 탄소나노튜브와 양쪽에서 간격을 두고 마주대하는 소스 및 드레인 전위를 조절함으로써 탄소나노튜브에 유도된 정전기인력으로 내부 탄소나노튜브의 움직임 제어한다. 본 나노메모리 소자는 테라급 재기록 비휘발성 나노메모리(Rewritable Non-Volatile Nano-Memory)로 활용될 수 있으며, 2bit 뿐만 아니라 3bit 정보저장 소자로 활용될 수 있다. 분자동역학 결과는 정보저장 동안에 발생하는 탄소나노튜브와 금속전극 사이의 충돌은 메모리 소자의 동작 속도 및 비휘발성 특성에 매우 중대한 영향을 미치게 될 것을 알 수 있었다.

### 1. 서론

양자점(Quantum Dot), 나노선(Nanowire), 나노튜브(Nanotube) 등의 나노구조물들은 미래사회의 기술적 응용을 위한 매우 중요한 물질들로 널리 알려져 있다. 특별히 탄소로 구성된 내부가 텅 빈 구조물인 탄소나노튜브는 다른 나노구조물보다 더욱 많은 관심을 받고 있고 [1], 이를 이용한 나노전자소자 개발을 위한 실험적, 이론적 연구들이 활발히 진행되고 있는 중이다. 탄소나노튜브 기반 나노메모리(Nanomemory) 개발에 관한 몇 가지 개념들은 제시되어 왔다. 그중 하나는 교차하는 탄소나노튜브 사이의 반데르발스 힘에 의하여 교차점에서 탄소나노튜브들의 접촉 및 비접촉을 제어함으로써 터널링 전류의 차이를 이용하는 방법이다 [2-4]. 이와 같이 탄소나노튜브의 접촉 및 비접촉 특성을 이용한 나노메모리 소자들은 탄소나노튜브 진동기(CNT-bridge-type oscillator), 나노릴레이(nano-relay), NEM (nanoelectromechanical) 스위치 등이 제안되어 왔다. 최근 Zettl 등은 [5] 다중벽 탄소나노튜브(Multi-walled Carbon Nanotube)에서 각 껍질 사이에 매우 낮은 마찰력이 작용하기 때문에 에너지 소모가 매우 적은 선형베어링 특성을 실험적으로 보여주었다. 이러한 특성을 이용하여 Zheng 과 Jiang [6]은 기가헤르쯔 동작 주파수를 갖는 탄소나노튜브 왕복 진동기를 제안하였으며, Deshpande 등[7]은 다중벽 탄소나노튜브에 정전기력이 작용될 때 내부의 움직일 수 있는 탄소나노튜브들이 선형 베어링 특성에 의하여 확장됨에 따른 전압-전류 특성을 분석하여 탄소나노튜브 선형 베어링 스위칭 소자(Nanotube Linear Bearing Switch)를 개발하였다.

본 논문에서는 탄소나노튜브 기반 테라비트급 비휘발성 나노메모리 소자를 설계하고 그 동작 특성을 원자단위 시뮬레이션을 통하여 분석하였다. Maslov[8]에 의해 제안된 탄소나노튜브 메모리소자 제작을 위한 상부 금속 패턴 기판이 따로 필요한 반면에, 본 논문에서 제안하는 나노메모리 구조는 하나의 기판위에 탄소나노튜브의 수평 왕복 및 탄소나노튜브 왕복을 조절하는 전극 형성할 수 있기 때문에 현재 반도체 공정의 증착 및 에칭 공정으로 쉽게 형성시킬 수 있는 장점을 가지고 있다.

### 2. 실험 방법

탄소 근거리 상호작용은 Tersoff-Brenner 전위식을 사용하였으며, 탄소 반데르발스 힘은 Lennard-Jones 12-6 전위식을 사용하였다. Lennard-Jones 12-6 전위식의 변수는  $\epsilon_{\text{carbon}} = 2.4038 \times 10^{-3}$  eV며  $\sigma$

$z_{\text{carbon}} = 3.37 \text{ \AA}$ 이며, Cutoff 거리는  $10 \text{ \AA}$  이다. 백금-탄소나노튜브 결합력은 금-탄소나노튜브 결합력보다 큰 것으로 알려져 있어, 금속-탄소나노튜브 결합력의 차이에 따른 특성을 연구하기 위하여 본 연구에서는 금속전극으로 백금 또는 금을 고려하였다. 금속 및 금속-탄소 상호작용은 Lennard-Jones 12-6 전위식을 사용하였다. 금-탄소 상호작용 파라미터는 이전 탄소나노튜브와 금 사이의 상호작용 연구에 이용되었던  $\epsilon_{\text{AuC}} = 2.9943 \text{ \AA}$  과  $\sigma_{\text{AuC}} = 0.01273 \text{ eV}$ 를 사용하였으며, 백금-탄소 상호작용은 ab initio 계산 결과를 사용하여 맞춰진  $\epsilon_{\text{PtC}} = 2.1253 \text{ \AA}$  과  $\sigma_{\text{PtC}} = 0.0376 \text{ eV}$ 를 사용하였다. 금을 위해서는  $\epsilon_{\text{Au}} = 2.569 \text{ \AA}$  과  $\sigma_{\text{Au}} = 0.458 \text{ eV}$ , 백금을 위해서는  $\epsilon_{\text{Pt}} = 2.471 \text{ \AA}$  과  $\sigma_{\text{Pt}} = 0.694 \text{ eV}$ 를 사용하였다. 분자동역학 시뮬레이션은 본 연구실에서 개발한 코드로, velocity Verlet 방법과 이웃원자 목록 (Neighbor List) 방법을 사용한다. 분자동역학 시뮬레이션에서 Timestep은  $5 \times 10^{-4} \text{ ps}$ 이며 온도는 항상  $1 \text{ K}$ 를 유지하도록 Berendsen 방법을 사용하였다.

본 연구에서는 (10,10)(5,5) 이중벽 탄소나노튜브를 가지고 분자동역학 시뮬레이션을 수행하였다.  $20 \text{ \AA}$  길이의 (10,10) 외곽 나노튜브와  $32 \text{ \AA}$  길이의 (5,5) 내부 나노튜브로 구성되었다. 외곽 나노튜브는 금속전극에 묻혀있기 때문에, 분자동역학 시뮬레이션 동안 외곽 나노튜브 중심은 고정되어 있는 것으로 하기 위하여, 매 분자동역학 계산마다 외곽 나노튜브의 무게 중심은 고정되도록 한 반면에, 내부 나노튜브는 자유롭게 움직이도록 하였다. 금속전극은 10개의 원자층으로 구성된 (100) 표면의 금 또는 백금을 사용하였으며, 그 표면이 외곽 나노튜브 모서리와  $13 \text{ \AA}$  떨어져 있도록 하였다.

### 3. 실험결과 및 고찰

탄소나노튜브와 전극 사이 전위차가 증가함에 따른 내부 (5,5) 탄소나노튜브 위치 변화를 계산하였다. 그림 1은 백금 및 금 전극에 대하여 전위차가  $0 \text{ V}$ 에서  $7 \text{ V}$ 까지  $0.05 \text{ V/ps}$ 로 증가함에 따른 (5,5) 탄소나노튜브의 위치 변화를 보여준다. 백금 및 금 전극에 대한 Turn-On 전압은  $5.5 \text{ V}$ 로 이전의 이론 연구 결과[8]와 잘 일치하는 값이며 실험 결과[7]와도 유사한 값이다. 탄소나노튜브와 금속전극이  $1.2 \text{ nm}$  떨어져 있는 경우의 (5,5) 나노튜브의 Turn-On 전압은  $6 \text{ V}$ 이었으며 [8],  $5 \text{ nm}$  떨어져 있는 이중벽 탄소나노튜브 사이에서는 Turn-On 전압은  $4.5 \text{ V}$ 이었다 [7]. 따라서 본 연구에서는 백금 또는 금 전극에 대하여 탄소나노튜브 메모리 소자 동작을 위해서  $6 \text{ V}$ 와  $-6 \text{ V}$ 를 사용하여 3 주기 (Cycle) 동안 분자동역학 시뮬레이션이 수행되었다. 내부 (5,5) 탄소나노튜브의 초기 위치는 외곽 (10,10) 탄소나노튜브 중심에 위치하도록 하였다.

분자동역학 시뮬레이션의 각 주기는 8 부분으로 구성되었다. 먼저 오른쪽 전극에 연결된  $V_1$ 은  $0 \text{ V}$ 에서부터  $6 \text{ V}$ 까지  $20 \text{ ps}$  동안 선형으로 증가하고, 이어서  $6 \text{ V}$ 는 지속시간동안 유지된다. 이후  $V_1$ 은  $20 \text{ ps}$  동안  $0 \text{ V}$ 까지 선형으로 감소하며 이후 지속시간 및 나머지 주기 동안  $0 \text{ V}$ 로 유지된다. 왼쪽 전극에 연결된  $V_2$ 는 주기의 절반동안  $0 \text{ V}$ 로 유지되다 주기 절반부터 다음  $20 \text{ ps}$  동안  $-6 \text{ V}$ 까지 선형으로 감소한다. 이후  $V_2$ 는 지속시간동안  $-6 \text{ V}$ 로 유지된 다음  $20 \text{ ps}$  동안  $0 \text{ V}$ 까지 선형으로 증가한 후 지속시간동안  $0 \text{ V}$ 로 유지된다. 본 연구에서는 지속시간  $20 \text{ ps}$ ,  $30 \text{ ps}$ ,  $40 \text{ ps}$  세 경우에 대하여 수행하였다.

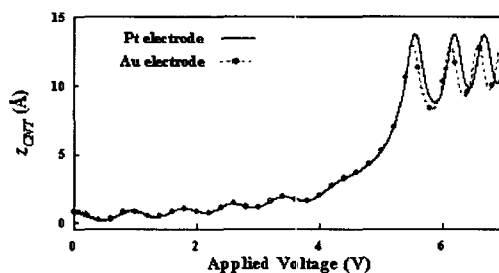


그림 1. 백금 및 금 전극과 내부 (5,5) 탄소나노튜브 사이의 전위차(V)에 따른 내부 탄소나노튜브의 위치 변화. 전위차는  $0 \text{ V}$ 부터  $10 \text{ V}$ 까지  $0.05 \text{ V/ps}$ 로 선형으로 증가.

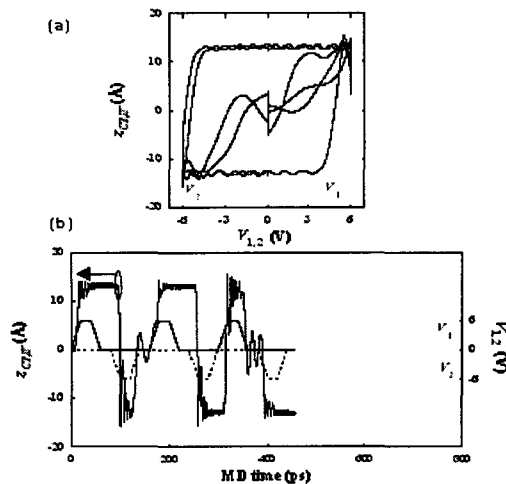


그림 2. 백금 전극에 대하여 20 ps 지속시간을 가지는 경우의 분자동역학 결과. (a)  $V_1$  and  $V_2$  의 함수로써  $z_{CNT}$  변화 (b) 분자동역학 시간에 따른  $z_{CNT}$ ,  $V_1$ ,  $V_2$  변화.

그림 2은 백금 전극에서 20 ps 지속시간에 대한 분자동역학 결과를 보여준다. 그림 6(a)는  $V_1$  과  $V_2$  의 함수로 내부 (5,5) 탄소나노튜브 위치 변화( $z_{CNT}$ )를, 그림 6(b)는 분자동역학 시간의 함수로  $z_{CNT}$  를 보여준다. 그림 6(b)는 시간에 따른  $V_1$  과  $V_2$  의 변화도 보여주고 있다. 분자동역학 결과는  $V_1$  과  $V_2$  조절로 내부 탄소나노튜브 위치를 제어할 수 있다는 것을 분명히 보여준다. 위치에 따른  $F_{CNT}$ 는 탄소나노튜브의 쌍안정성 (Bi-stability)과 비휘발성 특성을 보여준다. 그러나 20 ps 지속시간 은 탄소나노튜브가 백금 전극위에서 안정화되기에 충분한 시간이 못하여 세 번째 주기 동안에 탄소나노튜브는 백금 전극위에 붙어있을 수 없었다.

#### 4. 결론

본 논문에서는 탄소나노튜브 기반 비휘발성 메모리 소자를 설계하고 이중벽 탄소나노튜브 구조에 대하여 분자동역학 방법을 이용하여 그 동작 특성을 분석하였다. 탄소나노튜브는 탄소-탄소 반데르발스 힘과 탄소나노튜브-금속 결합력 간의 균형점에서 국부적으로 안정화 되도록 하는 방법으로, 소스 및 드레인 전위를 조절함으로써 탄소나노튜브에 유도된 정전기인력으로 내부 탄소나노튜브의 움직임을 제어한다. 본 나노메모리 소자는 테라급 재기록 비휘발성 메모리로 활용될 수 있으며, 2bit 뿐만 아니라 3bit 정보저장 소자로 활용될 수 있다. 분자동역학 결과는 정보저장 동안에 발생하는 탄소나노튜브와 금속전극 사이의 충돌은 메모리 소자의 동작 속도 및 비휘발성 특성에 매우 중대한 영향을 미치는 것을 알 수 있었다. 분자동역학 결과는 TURN-ON 스위칭 시간은  $8 \times 10^{-12}$  s 이고 TURN-OFF 시간은  $10^{-12}$  s 로 매우 빠르며, 안정적인 메모리 ON-OFF cycle 시간은  $12 \times 10^{-11}$  s 로 8.3 GHz에 동작 속도로 예측되었다.

#### 후기

본 연구는 정보통신부 및 정보통신연구진흥원의 대학 IT연구센터 지원사업의 연구결과로 수행되었음(IITA-2006-C109006030030)

#### 참고문헌

[1] Iijima S, "Helical microtubes of graphitic carbon", Nature 354, 56 (1991)  
 [2] Rueckes T, Kim K, Joselevich E, Tseng G Y, Cheung C-L and Lieber C M, "Carbon nanotube-based nonvolatile random access memory for molecular computing", Science 289, 94 (2000)

- [3] Ward J W, Meinhold M, Segal B M, Berg J, Sen R, Sivarajan R, Brock D K and Rueckes T, "A nonvolatile nanoelectromechanical memory element utilizing a fabric of carbon nanotubes", Proc. Non-Volatile Memory Technology Symp. (Orlando, FL, Nov. 2004) pp 34-38
- [4] Fuhrer M S, Nygård J, Shih L, Forero M, Yoon Y-G, Mazzone M S, Choi H J, Ihm J, Louie S G, Zettl A, McEuen P L, "Crossed Nanotube Junctions", Science 288, 494 (2000)
- [5] Cumings J and Zettl A, "Low-Friction Nanoscale Linear Bearing Realized from Multiwall Carbon Nanotubes", Science 289, 602 (2000)
- [6] Zheng Q and Jiang Q, "Multiwalled Carbon Nanotubes as Gigahertz Oscillators", Phys. Rev. Lett. 88, 045503 (2002)
- [7] Deshpande V V, Chiu H-Y, Ch Postma H W, Mikó C, Forró L and Bockrath M, "Carbon Nanotube Linear Bearing Nanoswitches", Nano Lett. 6, 1092 (2006)
- [8] Maslov L, "Concept of nonvolatile memory based on multiwall carbon nanotubes", Nanotechnology 17, 2475 (2006)