

## 전자기기 나노튜브 메모리의 분자 동역학 모델링

이준하, 김형진, 강신혜, 주아영

상명대학교 컴퓨터시스템공학과

### 초록

연속 전자 모델과 결합된 종래의 분자 동역학 방법은 원자 사이의 힘과 원자의 전기용량에 의해 야기되는 탄소 나노튜브의 구부러지는 성질의 특성을 해석하였다. 탄소 원자의 전기 용량은 탄소 원자의 길이에 따라 변하였다. 본 연구는  $11.567\text{nm}(L_{\text{CNT}})$ 의 길이와  $0.9\sim 1.5\text{nm}(H)$ 의 안쪽 깊이를 가진 (5,5) 탄소 나노튜브 브리지로 MD 시뮬레이션을 수행하였다. 탄소 나노튜브는 금 표면에 부딪힌 후 탄소 나노튜브 브리지는 약  $\sim 1\text{\AA}$ 의 크기로 금 표면에서 진동하며, 크기는 차츰 감소하였다.  $H\leq 1.3\text{nm}$ 일 때, 탄소 나노튜브 브리지는 첫 번째 충돌 후에 금 표면과 계속 접촉해 있었고,  $H\geq 1.4\text{nm}$ 일 때, 탄소 나노튜브 브리지는 몇 번의 충돌 후에 금 표면과 안정한 접촉상태가 되었다.  $H/L_{\text{CNT}}$ 가 0.13보다 작을 때, 탄소 나노튜브 초소형 전자기기 메모리는 반영구적인 비활성의 메모리 장치가 되는 반면에  $H/L_{\text{CNT}}$ 가 0.14보다 클 때 탄소 나노튜브 초소형 전자기기 메모리는 휘발성이거나 스위치 장치로 동작할 수 있다.

### 1. 서론

탄소 나노튜브(CNT) [1,2]에 기반한 NEM 스위치와 메모리는 동역학(MD) [3-5]과 연속 모델 [4,6]을 사용해서 연구되었다. Edquesnes는 나노튜브 브리지에 기반한 NEM 스위치의 이론적 연구를 보였다. 나노튜브 브리지에 기반한 NEM 스위치는 CNT의 전기적, 역학적 특성으로 상호작용을 하였다 [7]. 3상 장치는 두 개의 금속 전극 사이에 부유한 브리지로 이루어져 있다. 브리지는 옹덩이가 있는 기관 위에 놓여져 있고 소스와 드레인 전극에 고정되어 연결되어 있다. CNT 기반의 나노 릴레이는 기가헤르츠 영역에서의 메모리와 스위치 장치로 활동하고, 잠재적으로는 전압 전류 증폭기, 펄스 발생기, 메모리, 로직 소자와 같은 응용에 적합하다 [8]. 최근 Nantero Inc는 나노튜브 랜덤 액세스 메모리라고 불리는 부유 CNT에 기반한 NEM 메모리 어레이를 발명하였다 [9]. CNT 브리지 NEM(CNT-NEM) 메모리는 드레인, 소스, 게이트, 게이트 부근에 소스와 드레인 전극 사이의 자유로이 매달린 나노튜브 브리지로 구성되어 있다. 본 연구에서, 전하 이동을 고려한 원자적 전기용량 모델 [12]과 합동으로 종래의 분자 동역학 시뮬레이션을 사용함으로써 CNT-NEM 메모리의 전기기계적 작동을 연구하였다. CNT-NEM 메모리 작동은 역학적으로 Tersoff-Brenner 전위식으로 원자사이의 상호작용을 사용함으로써 모델화 하였고, 정전기력과 전하 이동 모델은 연속식을 사용함으로써 모델화 하였다. 시뮬레이션 결과 이러한 전기기계적 모델은 효과적으로 CNT-NEM 메모리의 전류-전압 특성을 기술하였다.

### 2. 실험 방법 및 구조

그림.1(a)는 간단한 CNT-NEM 메모리 장치의 도식을 보여주고 있다. H는 부유 CNT의 밑부분과 게이트 표면간의 거리인 도랑의 깊이이다. CNT가 게이트로부터 떨어져 있을 때 메모리 상태는 OFF이다. 그래서 이러한 NEM 메모리 동작은 정전기, 탄성, 반데르발스(vdW) 힘 3가지 힘에 의해 결정된다. CNT가 게이트에 접촉될 때 전류는 흐를 수 있고 메모리 상태는 ON이다. 그래서 이러한 NEM 메모리 동작은 정전기, 탄성, 사정이 짧은 탄소-메탈, vdW 힘 4가지 힘에 의해 결정된다. 그러므로 CNT-NEM 메모리는 탄성, 정전기, 원자간 상호작용, 전하 이동 모델에 의해 특성을 기술할 수 있을 것이다.

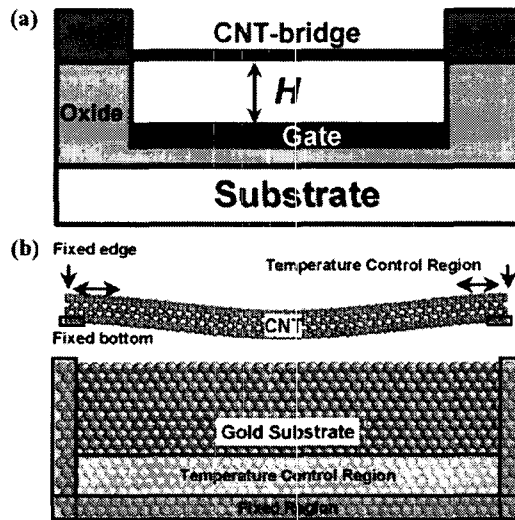


그림 1. (a) CNT-NEM 메모리 구조 (b) 원자적 시뮬레이션 구조

(1) 원자적 전기용량 모델

CNT-NEMS 분석을 위한 원자적 전기용량 힘은 양자 모델 [11]과 종래의 전기용량 모델 [4-8]을 사용해서 측정되었다. 종래의 원자적 전기용량 모델은 CNT가 금속 전극과 접촉되는 가장자리 영역에서 양자 모델과 다르다 [5]. 그림.1(a)는 CNT-NEM 메모리 동작에 대하여 CNT 브리지의 중심 영역에서 전기 용량 힘이 매우 중요하다는 것을 보여준다. 전기용량 힘으로 인한 CNT-NEM 메모리 동작에 대하여 모든 접촉 영역에서의 탄소 원자의 변위는 중심 영역에서의 변위보다 훨씬 덜 중요하다. 그러므로, 종래의 모델에 기반을 둔 원자적 전기용량 모델은 CNT-NEMS를 연구하는데 효과적으로 사용되었다 [4-8,13].

(2) 분자 동역학 및 CNT와 게이트 사이의 전하이동 모델

CNT의 역학적 특성은 종래의 MD 시뮬레이션으로 원자간 상호작용 함수를 사용해서 직접적으로 계산할 수 있다. 탄소의 경우에, 탄소 체계에 폭넓게 적용되고 있는 Tersoff-Brenner 전위식을 사용하였다 [14-15]. 변형, 영률, 탄성력, 뒤틀림 에너지는 Tersoff-Brenner 전위식에 기초하여 종래의 MD 시뮬레이션으로부터 얻었다.

3. 실험결과 및 고찰

바이어스가 없는 안정적인 구조를 사용함으로써 게이트 바이어스( $V_{app1}$ )와 응덩이 깊이(H)의 함수로써 MD 시뮬레이션을 수행하였다. 그림.2는  $H=1.1nm$ 에 대한 다양한  $V_{app1}$ 에서의 MD 시간함수에 따른 CNT 브리지( $z(L/2)$ )의 중심 위치 변위를 보여준다. 적용된 바이어스에서 MD 시간이 증가함에 따라 CNT 브리지의 중심은 정전기력 때문에 금 표면쪽으로 향하였다. CNT 브리지의 중심이 금 표면으로부터 약 0.6nm의 거리에 도달했을 때 CNT 브리지의 중심은 탄소-금 상호작용에 의해 크게 영향을 받게 되었다. 그런 후에 CNT 브리지는 금 표면쪽으로 급격하게 구부러졌다. 이러한 현상은 모든 MD 시뮬레이션의  $z(L/2)$  축에서 발견될 수 있다. H가 증가함에 따라 문턱전압( $V_{th}$ )은 증가하였다.  $V_{app1}$ 이 증가함에 따라 전이 시간( $\tau_1$ )은 감소하였다. CNT가 금 표면에 충돌한 후에 CNT는  $\sim 1A$  크기의 진동이 있고, 크기는 MD 시간이 증가함에 따라서 급격하게 감소하였다.  $H \leq 1.3nm$ 에 대하여 CNT 브리지의 중심 영역은 첫 번째 충돌 후에 금 표면에 계속적으로 접촉되었다.  $H \geq 1.4nm$ 에 대하여 CNT 브리지의 중심 영역은 몇 번의 반동 후에 금 표면에 안정적으로 접촉되었다.  $V_{app1}$ 이 게이트에 적용되었을 때 CNT-NEM 메모리나 스위치는 실제로 지연 시간( $\tau_1$ ) 후에 작동되었다. 그러므로 CNT-NEM메모리에 대한  $\tau_1$ 은 첫 번째 충돌 동안에 경과된 시간이다.  $V_{app1}$ 이 증가되면  $\tau_1$ 은 각각의 H에서 감소된다. H가 증가하게 되면 문턱전압( $V_{th}$ )은 선형적으로 증가하는 반면에 전이 시간은 감소된다.

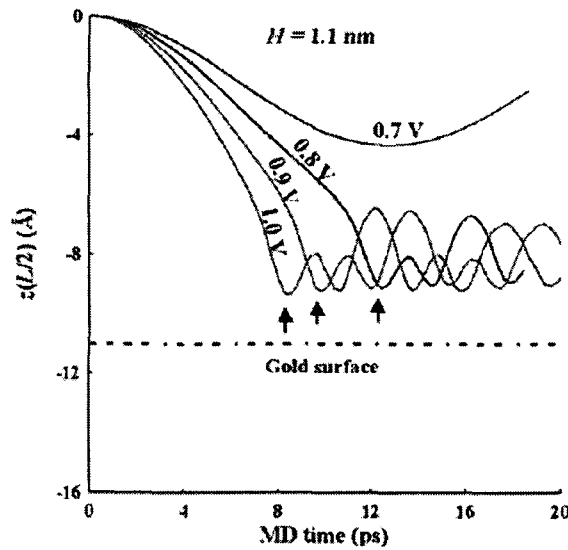


그림 2. CNT 브리지의 중심 위치

$V_{app}$ 이 차츰 증가되었을 때 CNT-NEM 메모리 동작을 연구하기 위하여 MD 시뮬레이션을 수행하였다.  $V_{app}$ 이 0.1V부터 단계별 0.1V씩 증가되었다. 그래서 250ps MD 시뮬레이션은 각  $V_{app}$  단계 동안 수행되었다. 그림.3(a)-(e)는 CNT 중심( $z(L/2)$ )의 변위, CNT와 금( $P_{CNT-gold}$ ) 사이의 전체 전위 에너지, CNT( $P_{CNT}$ )의 전체 전위 에너지, 터널링 전류,  $H=1.0nm$ 에 대한 MD 시간 함수에 따른  $V_{app}$ 을 보여준다. 그림.3(a)의  $z(L/2)$ 는  $V_{app}$ 이 증가됨에 따라 게이트 표면 쪽으로 움직인다. 그래서, CNT는  $V_{app}=0.6V$ 에서 게이트 표면으로 급격히 접촉된다.  $V_{app}=0.6V$ 에서 CNT-NEM 메모리가 작동될 때  $P_{CNT-gold}$ 와  $P_{CNT}$ 는 각각 갑자기 감소되어지고, 증가되어진다. 그리고 전류는 갑자기 흐르게 된다. CNT-NEM 메모리가 작동된 후에  $V_{app}$ 이 증가됨에 따라 그림.3(b)의  $z(L/2)$ 는 거의 일정해지고, 그림.3(b)의  $P_{CNT-gold}$ 와 그림.3(c)의  $P_{CNT}$ 는 각각 약간 감소되어지고 증가되어진다. 그리고 터널링 전류는 거의 선형적으로 증가된다. 그림.3(a)는  $V_{app}$ 이 적용된 상태에서 CNT 브리지가 중심의 진동 크기로 진동된다는 것을 보여준다. 적용된 바이어스에서 CNT 브리지의 조율할 수 있는 진동은 실험에 근거를 두었다 [10].

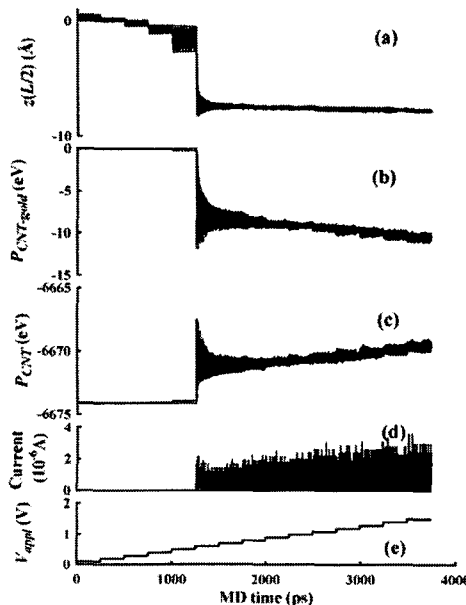


그림 3. (a)  $z(L/2)$ , (b)  $P_{CNT-gold}$ , (c)  $P_{CNT}$ , (d) 터널링 전류, (e)  $V_{appl}$

#### 4. 결론

종래의 MD 방법에 기반을 둔 초소형 전자기계(NEM) 모델은 연속체 전자 모델과 함께 겸하였다. 전하 이동 모델을 포함하여 원자적 시뮬레이션에 기반한 이러한 결합된 모델은 원자적 전기용량과 원자 상호간의 힘에 의해 CNT의 구부러지는 성질의 특성을 일으킬 수 있는 NRAM이라고 불리는 CNT-NEM 메모리 장치에 적용될 수 있었다. 탄소 원자의 전기용량은 탄소 원자의 길이와 함께 변화되었다. 탄소의 전기용량이 탄소 원자의 각 위치로부터 얻게 되기 때문에 CNT의 중심 영역에서의 원자적 전기용량 힘은 CNT의 경계영역에서의 힘보다 더 컸다. 본 연구는 11.567nm( $L_{CNT}$ )의 길이를 가지는 부유한 (5,5) CNT와 0.9 ~ 1.5nm(H)의 웅덩이 깊이를 이용해서 MD 시뮬레이션을 수행하였다. CNT가 금 표면에 충돌된 후에 CNT는  $\sim 1\text{\AA}$ 의 크기로 금 표면에서 진동하였고, 그 크기는 차츰 줄어들었다.  $H \leq 1.3\text{nm}$ 의 경우, CNT 브리지는 첫 번째 충돌 후에 계속해서 금 표면에 접촉되었다.  $H \geq 1.4\text{nm}$ 의 경우, CNT 브리지는 몇 번의 충돌 후 금 표면과 안정적인 접촉이 되었다.  $H/L_{CNT}$ 가 0.13 이하일 때, CNT-NEM 메모리는 반영구적 비휘발성 메모리 장치였던 반면에  $H/L_{CNT}$ 가 0.14 이상일 때 CNT-NEM 메모리는 휘발성 메모리나 스위치 장치가 되었다. CNT 브리지의 탄성 에너지는  $V_{appl}$ 이 갑자기 적용될 때 급격하게 증가되었고,  $V_{appl}$ 이 차츰 증가될 때는 거의 일정하였다.

#### 참고문헌

- [1] Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology, edited by W. A. Goddard, D. W. Brenner, S. E. Lyshevski and G. J. Iagrate, New York, CRC Press, 250, 2003.
- [2] S. Iijima, Nature 354, 56, 1991.
- [3] M. Dequesnes, S.V. Rotkin and N. R. Aluru, Nanotechnology 13, 120, 2002.
- [4] M. Dequesnes, Z. Tang and N. R. Aluru, J. Eng. Mater. Tech. 126, 230, 2004.
- [5] C. Ke and H. D. Espinosa, J. Appl. Mech. 72, 721, 2005.
- [6] J. W. Kang, J. H. Lee, H. J. Lee, O. K. Kwon and H. J. Hwang, Physica E 28, 273, 2005.
- [7] S. Sapmaz, Y. M. Blanter, L. Gurevich and H. S. J. vander Zant, Phys. Rev. B67, 235414, 2003.
- [8] C. Ke and H. D. Espinosa, Appl. Phys. Lett. 85, 681, 2004.
- [9] J. W. Ward, M. Meinhold, B. M. Segal, J. Berg, R. Sen, R. Sivarajan, D. K. Brock and T. Rueckes, in Proceedings for Non-Volatile Memory Technology Symposium, Orlando, Florida, 34, 2004
- [10] V. Sazonva, Y. Yaish, H. Ustunel, D. Roundy, T. A. Arias and P. L. McEuen, Nature 431, 284, 2004.
- [11] S. V. Rotkin, V. Shrivastava, K. A. Bulashevich and N. R. Aluru, Inter. J. Nanosci. 1, 337, 2002.
- [12] J. W. Kang and H. J. Hwang, Nanotechnology, 2006
- [13] A. Mayer and Ph. Lambin, Nanotechnology 16, 2685, 2005.
- [14] J. Tersoff, Phys. Rev. B 39, 5566, 1989.
- [15] D. W Brenner, Phys. Rev. B 42, 9458, 1990.