

질화붕소 나노피포드 기반 나노분자 메모리 시스템

Jun-Ha Lee^{*}, Hoong-Joo Lee^{*}, Oh-Keun Kwon^{**}, Ki-Ryang Byun^{***} and Jeong-Won Kang^{***}

^{*}Information Display Research Center, Sangmyung University, ^{**}Dept. of E-Commerce, Semyung University,

^{***}Nano Electronic Future Technology Lab., Chung-Ang University

초록

분자 위치제어 메모리 시스템에 대하여 고전적인 분자동역학을 이용하여 결합에너지 및 다양한 외부전압의 형태에 따른 셔틀 풀러렌 동작에 관하여 연구하였다. 단일 나노피포드 형(single-nanopeapod type)은 질화붕소 나노튜브(boron-nitride nano tube) 속에 세 개의 엔도풀러렌(endo-fullerene)과 양쪽 끝에 구리 전극이 채워져 있는 구조를 갖고 있는 구조를 갖고 있다. 결론적으로, 분자동역학 시뮬레이션 결과로부터 이 나노메모리 시스템은 비휘발성임을 알 수 있었다. 안정적인 bit 변화를 위해서는 단일 나노피포드 형은 0.1 eV/A 외부전압이 필요로 함을 알 수 있었다.

1. 서론

나노구조(nanostructure)와 나노입자(nanoparticle)는 재료 및 전기전자 기술 분야에 있어서 중요한 연구 주제가 되어 오고 있다. 나노구조들의 물리, 화학적 특성들을 연구하기가 쉽지 않은 가운데서도 나노구조들의 작은 크기 때문에 많은 관심을 끌어들였다. 풀러렌(fullerene) 관련 물질은 물리, 화학적 특성이 일정한 것으로 밝혀지면서[1], 지난 십 수 년간 풀러렌 관련한 연구가 진행되어 오고 있다. 다른 나노구조와 비교하여, 풀러렌은 전자회로 설계, 촉매물질 등과 같은 다양한 분야에서 중요한 기술 공정에 응용될 것으로 기대되고 있다[2]. 또한, 탄소나노튜브(CNT; carbon nanotubes)와 같이 큰 빈 공간을 가지고 있어서, 저장 물질로써 용기와 안정성에 대한 응용이 기대되고 있다[3]. 풀러렌의 빈 공간에도 다양한 원자(atom)나 분자(molecular)가 존재할 수 있으며, 그 안에 존재하는 물질에 따라 풀러렌의 특성이 달라질 수 있다. 특히 나노피포드(nanopeapod)라 불리는 CNT 안에 풀러렌이 들어가 있는, 새로운 형태의 혼합된 구조가 발견되었다[4]. 이 나노피포드는 나노미터 크기의 화학 반응물 용기에서부터[5] 데이터 저장장치[3] 뿐 아니라 고온 초전도체(superconductor)[7]에 이르기까지 응용될 수 있을 것으로 기대된다.

2. 시뮬레이션 방법

엔도풀러렌이 들어있는 다양한 나노피포드에 대하여 실험적으로나 이론적으로 많은 연구들이 진행되어 왔다. 본 연구에서는 풀러렌 안에 삽입된 금속 물질이 F⁻, Na⁺, K⁺, Mg²⁺, Al³⁺ 등과 같이 완전히 이온화 된다고 가정한다. 이전의 논문[6]에서도 이러한 가정을 사용하였다. 그러나 MD 코드에서는 효율을 위해서는 엔도풀러렌 안의 이온화 금속 물질에 대해서는 계산상에 고려를 하지 않았다. Kwon 등이 연구한 논문[6]에서처럼 이온화된 풀러렌 안에서 +e 전하가 C₆₀에 균일하게 분포되었다고 가정하였다. 따라서

풀러렌을 이루는 탄소 원자는 $+e/60$ 의 전하를 가지게 된다. 붕소원자와 질소원자 사이의 상호작용에서는 Tersoff 전위 에너지 함수(식 2-1)가 널리 사용되고 있다[8]. BNNT의 벽과 C_{60} 의 상호작용은 BNNT와 C_{60} 상호작용 사이에 알맞은 파라미터가 없기에, Hodak과 Girifalco가 연구한 C_{60} 과 (10, 10) CNT 상호작용 에너지 함수를 적용하였다[9]. C_{60} 과 C_{60} 의 상호작용은 Girifalco 등[10]의 Lennard-Jones (LJ12-6) 포텐셜을 이용하였다. 전극으로 사용되는 구리원자와 BNNT 사이에는 $\epsilon = 0.1448$ eV과 $\sigma = 2.039$ Å의 값을 갖는 LJ12-6 포텐셜[11]을 사용하였으며, 구리 원자들 사이에는 $\epsilon = 0.415$ eV과 $\sigma = 2.277$ Å의 값을 갖는 LJ12-6 포텐셜[11]을 적용하였다. 단일 나노피포드 형에서는 탄소 원자 60개로 이루어진 풀러렌을 하나의 원자로 고려하여 동작과 특성을 시뮬레이션을 하였다. 본 논문에서는 최대 경사법(SD; steepest descent)과 분자동역학을 사용하여 시뮬레이션을 하였다. MD 코드는 속도 Verlet 알고리즘을 사용하여 원자의 속도에 적용하였으며, Gunsteren-Berendsen 온도 조절 방법을 모든 원자에 적용하였다[12]. 단, 단일 나노피포드 형에서 피포드를 한 개의 원자로 고려하여 하였다. 계산량을 줄이기 위해서 이웃 원자 목록(neighbor list)을 계산하여 시뮬레이션을 하였다. MD 시간 간격은 5×10^{-4} ps 이며, 시뮬레이션의 온도는 300 K이다.

3. 결과 및 고찰

그림 3-1 은 가운데 있는 셔틀 풀러렌의 위치에 따라 에너지 변화를 나타낸 것이다. 양쪽 끝에 C_{60} 풀러렌을 고정시키고, 셔틀 풀러렌을 0.01 Å씩 z 축 방향으로 이동하면서 SD 방법을 이용하여 에너지를 측정하였다.

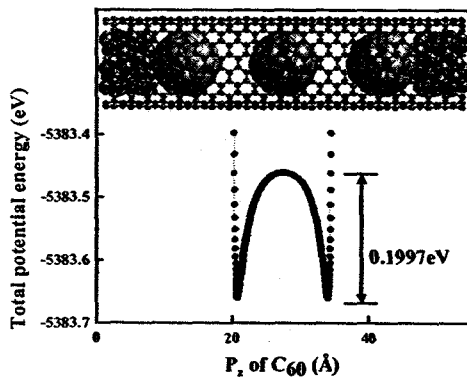


그림 3-1 셔틀 풀러렌의 위치에 따른 결합에너지

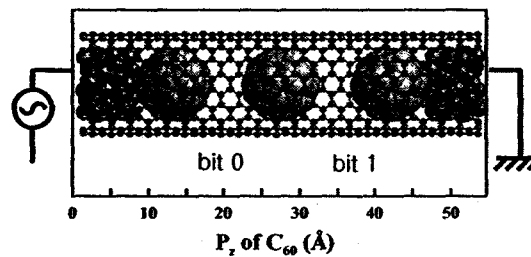


그림 3-2 MD 시뮬레이션을 위한 셔틀 풀러렌의 z 축에 대한 위치 및 외부 전압

반데르발스(van der Waals) 힘이 C_{60} 풀러렌이 있는 피포드 양쪽 끝에서 안정하게 되며, 전극 부분에서 가장 큰 힘을 갖게 되는데, 그림 3-1 의 결과는 셔틀 풀러렌의 위치 변화에 따른 포텐셜 에너지의 변화를 잘 나타내고 있다. 포텐셜 에너지가 제일 낮은 피포드의 양쪽 끝에서 셔틀 풀러렌이 움직이기 위한 활성화 에너지 벽(activation energy barrier)은 약 0.1997 eV 이다. 또한, 구리 전극과 C_{60} 와의 결합 에너지가 C_{60} 풀러렌들 간의 결합 에너지 보다 훨씬 높기 때문에 (+) 혹은 (-)의 외부 전압이 가해져도 셔틀 풀러렌만 그 위치가 변하게 됨을 알 수 있었다. 그림 3-2 에서 보는 바와 같은 구조를 가지고 여러 형태의 외부 전압을 인가하여 MD 시뮬레이션을 하였다. 그림 3-3 에서 그림 3-6 까지는 (+) 전압을 인가하여, 셔틀 풀러렌이 bit 0 의 위치 즉, 왼쪽 위치에서 bit 1 로 바꾸는 동작을 시뮬레이션 한 것이다. 여기서 V_z 는 셔틀 풀러렌이 z 축 방향으로 이동하는 속도, P_z 는 셔틀 풀러렌의 z 축 방향에서의 위치, F_{ext} 는 메모리 시스템 외부에

결리는 외부 전압을 나타낸다. 그림 3-3 은 외부전압을 0.09 eV/Å로 인가한 결과인데, 서틀 풀러렌의 위치를 보면 bit 0 이 bit 1 로 바뀌지 않았으며, 이것은 풀러렌 사이의 상호작용에 의한 결합을 0.09 eV/Å 이하의 외부 전압의 힘으로 끊지 못한 것이다. 그림 3-4 에서 그림 3-6 까지의 결과를 비교하여 보면, 외부 전압이 0.1 eV/Å 때보다 0.2 eV/Å 때가 bit 변환 시간이 줄어들었다. 0.2 eV/Å 과 0.4 eV/Å 을 비교하면, 0.4 eV/Å 때의 속도가 빠르지만, 반복해서 뿜겨 나오는 것을 고려한다면, 0.2 eV/Å 때와 0.4 eV/Å 때에 외부전압으로 인하여 bit 이 바뀌는 시간에는 큰 차이가 없다.

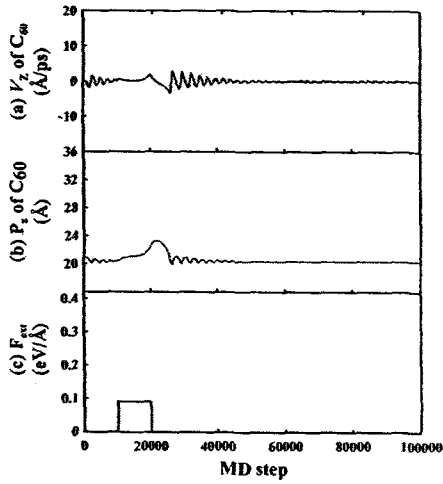


그림 3-3 bit 0 에서 bit 1 로의 결과.

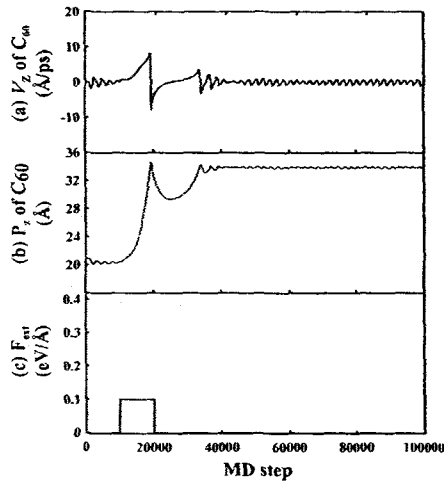


그림 3-4 bit 0 에서 bit 1 로의 시뮬레이션 결과.

$F_{ext} = 0.09 \text{ eV/\AA}$

$F_{ext} = 0.1 \text{ eV/\AA}$

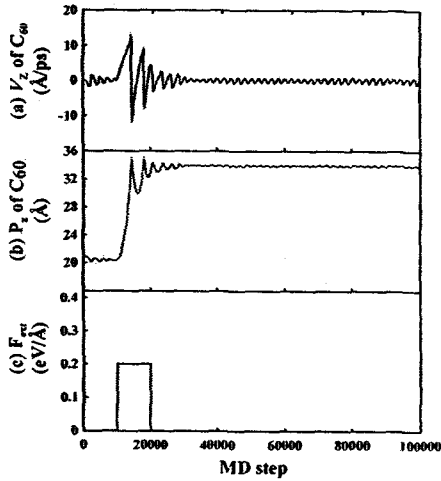


그림 3-5 bit 0 에서 bit 1 로의 결과

$F_{ext} = 0.2 \text{ eV/\AA}$

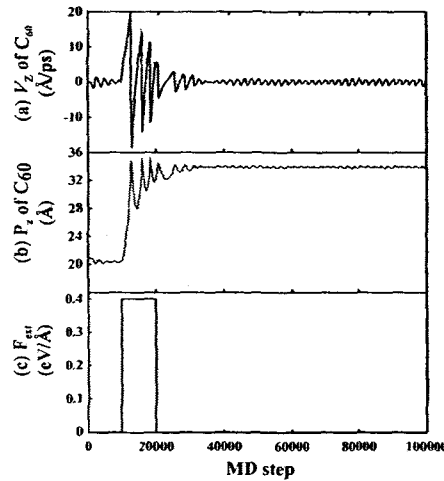


그림 3-6 bit 0 에서 bit 1 로의 결과

$F_{ext} = 0.4 \text{ eV/\AA}$

메모리 시스템으로 사용하기 위해서는 bit 0 에서 bit 1 로 혹은 그 반대로 바꾸는 것이 용이하여야 한다. 셔틀 풀러렌이 움직일 수 있는 낮은 외부 전압을 준다면 여러 번의 반발이 일어나지 않지만, 스위칭 속도가 매우 낮아지게 된다. 하지만, 높은 외부 전압을 인가한다면 스위칭 속도는 빨라지지만 여러 차례 반발이 생기게 된다. 셔틀 풀러렌의 활성 영역(active region)을 충분히 길게 만든다면, 반발되어 반대편의 풀러렌의 상호작용의 영향이 미치는 곳으로 끌려가지 않을 것이다. 따라서 단일 나노피포드 형 메모리 시스템을 활용하기 위해서는 외부전압, 스위칭 속도, 활성 영역의 길이 등을 충분히 고려하여 설계한다면, 메모리 소자로서 동작할 가능성이 있다는 것을 알 수 있다. 본 연구결과 외부전압 0.1 eV/A 이상 0.2 eV/A 미만의 값을 가질 때 단일 나노피포드 형 메모리 시스템이 안정한 동작을 함을 알 수 있었다.

4. 결론

본 논문에서는 분자동역학 시뮬레이션을 이용하여, 질화붕소 나노튜브 및 나노피포드를 기초로 구성된 형태의 나노 메모리 시스템의 에너지 준위와 동작에 대하여 연구하였다. 단일 나노피포드 형은 질화붕소 나노튜브 양쪽 끝에 구리로 채워져 있으며 그 안에는 세 개의 C₆₀ 풀러렌이 있는 형태로 구성되어 있다. 가운데 있는 풀러렌이 셔틀 풀러렌으로서 동작을 하며, 나머지 두 개의 풀러렌은 구리 전극에 붙어 있다. 이러한 단일 나노피포드 형에서 에너지가 가장 낮은 위치는 셔틀 풀러렌이 구리 전극에 붙어 있는 풀러렌과 일정한 위치를 이루는 두 군데임을 알 수 있었다. 따라서 셔틀 풀러렌의 위치에 따라 bit 0 과 1 을 구분할 수 있으며, 외부전압에 의하여 위치를 조절할 수 있다. 또한, 셔틀 풀러렌과 구리전극에 붙은 풀러렌 사이의 결합 에너지는 쉽게 끊을 수 없기 때문에 비휘발성 메모리 소자라고 할 수 있다.

참고문헌

- [1] S. Iijima, Nature 354, 56 (1991).
- [2] J. Zhao, A. Buldum, J. Han and J. P. Lu, Nanotechnology 13, 195 (2002).
- [3] R. E. Barajas-Barraza and R. A. Guirado-Lopez Phys. Rev. B 66, 155426 (2002).
- [4] B. W. Smith, M. Monthieux and D. E. Luzzi, Nature 396, 323 (1998).
- [5] B. W. Smith and D. E. Luzzi Chem. Phys. Lett. 321, 169 (2000).
- [6] Y. K. Kwon, D. Tomá nek and S. Iijima Phys. Rev. Lett. 82, 1470 (1999).
- [7] R. F. Service Science 292, 45 (2001).
- [8] K. Albe and W. Moller, Comp. Mater. Sci. 10, 111 (1998).
- [9] M. Hodak and L. A. Girifalco Phys. Rev. B 67, 075419 (2003).
- [10] L. A. Girifalco, M. Hodak, and R. S. Lee 2000 Phys. Rev. B 62, 13104 (2000).
- [11] S. Dorfman, K. C. Mundim, D. Fuks, A. Berner, D. E. Ellis and J. V. Humbeek Met. Sci. Eng. C 15, 191 (2001).
- [12] J. W. Kang and H. J. Hwang Nanotechnology 13, 524 (2002).