

# 질화붕소 나노피포드에 기반한 나노분자 메모리 시스템에 관한 연구

변기량† · 강정원 · 최원영 · 황호정

중앙대학교 전자전기공학부 나노전자신기술연구소  
(논문접수일 : 2005년 1월 18일)

## Molecular Shuttle Memory System Based on Boron-Nitride Nanopeapod

Ki Ryang Byun†, Jeong Won Kang, Won Young Choi and Ho Jung Hwang

Nanoelectronic Future Technology Laboratory, School of Electrical and Electronic Engineering, Chung-Ang University  
(Received January 18, 2005)

### 요 약

분자 위치제어 메모리 시스템에 대하여 고전적인 분자동역학을 이용하여 결합에너지 및 다양한 외부전기장의 형태에 따른 셔틀 풀러렌 동작에 관하여 연구하였다. 단일 나노피포드 형(single-nanopeapod type)은 질화붕소 나노튜브(boron-nitride nanotube) 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  $0.1 \text{ eV/\AA}$  외부전기장이 필요로 함을 알 수 있었다.

주제어 : 분자 위치제어, 분자동역학, 나노피포드, 나노튜브

### Abstract

Bucky shuttle memory systems were investigated by the classical molecular dynamics(MD) simulations. Energetics and operating response of the shuttle-memory-elements were examined by MD simulations of the  $C_{60}$  shuttle in the nanomemory systems under various external force fields. Single-nanopeapod type was consisting of three fullerenes encapsulated in (10, 10) boron-nitride nanotube and filled Cu electrode. Studied systems could be applied to nonvolatile memory. MD simulation results showed that the stable bit flops could be achieved from the external force fields of  $0.1 \text{ eV/\AA}$  for single-nanopeapod type.

Key Words : Molecular Shuttle Memory System, Molecular Dynamics, Nanopeapod, Nanotube

## 1. 서 론

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 나노구

조들의 작은 크기 때문에 많은 관심을 끌어들였다. 풀러렌(fullerene) 관련 물질은 물리, 화학적 특성이 일정한 것으로 밝혀지면서 [1,2], 지난 십 수 년간 풀러렌 관련한 연구가 진행되어 오고 있다. 다른 나노구조와 비교하여, 풀러렌은 전자회로 설계, 촉매 물질 등과 같은 다양한 분야에서 중요한 기술 공정

† E-mail : krbyun87@nate.com

에 응용될 것으로 기대되고 있다 [3]. 또한, 탄소 나노튜브(CNT; carbon nanotubes)와 같이 큰 빈 공간을 가지고 있어서, 저장 물질로써 용기와 안정성에 대한 응용이 기대되고 있다 [4]. 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(nanopepod)라 불리는 CNT 안에 풀러렌이 들어가 있는, 새로운 형태의 혼합된 구조가 발견되었다 [5-10]. 이 나노피포드는 나노미터 크기의 화학 반응물 용기에서부터 [8] 데이터 저장장치 [11] 뿐 아니라 고온 초전도체(superconductor) [12]에 이르기까지 응용될 수 있을 것으로 기대된다.

C<sub>60</sub>과 같은 풀러렌들은 나노튜브의 안쪽에서 더욱 안정한 상태로 존재하기 때문에 튜브 입구 근처에서 풀러렌은 안쪽으로 끌려들어 가게 된다. Mickelson 등 [13]은 질화붕소 나노튜브(BNNT; Boron-nitride nanotube)에 C<sub>60</sub>을 채우는 방법을 보고하였다. 또한, Goldberg 등 [14]은 질화붕소 나노튜브에 금속 물질을 채우는 방법을 연구하였다. Okada 등 [15]은 질화붕소 나노피포드가 형성될 때의 반응 에너지를 계산하였다. 예를 들면 본 연구에 사용된 (10, 10) 질화붕소 나노튜브에 대한 것으로 (10, 10) BNNT + C<sub>60</sub> → C<sub>60</sub>@(10, 10) BNNT + 1.267(eV)을 계산하였다. 물론 Okada 등이 계산한 발열 에너지 1.267eV의 정확성은 조금 의심되지만 [16], (10, 10) BNNT안에 C<sub>60</sub>이 존재하는 경우가 C<sub>60</sub>과 (10, 10) BNNT이 따로 존재하는 경우 보다 훨씬 더 안정한 사실에는 의심할 여지가 없다. Kwon 등 [11]이 발표한 논문에 따르면, 특정한 조건하에서 탄소 원소들에 의하여 합성된 “Bucky shuttle” [17]을 나노미터 크기의 셔틀 메모리 소자로서의 가능성을 제시하였고 분자동역학(MD; molecular dynamics)을 이용하여 시뮬레이션 하였다.

Bucky shuttle을 메모리 소자로 만들기 위해서는 전극과 절연체로 쌓여진 전선이 필요하다. CNT는 나노구조를 대표하는 물질이지만, 탄소의 배열에 따라 반도체 혹은 도체 성질을 가지게 되는데 [2], 이 배열을 조절하여 반도체 성질을 갖게 하는 것은 쉽지 않다. 하지만, BNNT의 경우 원자 배열과 무관하게 밴드갭(bandgap)이 5.5 eV로 절연체이다 [18].

자가 정렬(self-assemble)에 의하여 Bucky shuttle 구

조를 정렬하는 것은 어렵지만, 다발 형태의 BNNT 다발을 가지고, 나노피포드를 합성하는 것은 가능하다. Mickelson 등 [13]이 BNNT 안에 C<sub>60</sub>을 삽입하는 것을 밝혀냈으며, Goldberg 등 [14]이 BNNT 안에 금속 물질을 넣는 것을 연구하였다. C<sub>60</sub> 주입 및 제어 기술, 나노 광노광 기술, 나노튜브 제단 관련 기술 등이 뒷받침이 된다면, 정렬된 Bucky shuttle 구조를 만들 수 있을 것이다.

본 논문에서는 고전적인 분자동역학을 이용하여 세 개의 엔도 풀러렌(endo-fullerene)과 (10, 10) BNNT로 구성된 분자 위치제어 메모리 시스템의 동작에 대한 특성을 연구하였다.

## 2. 시뮬레이션 방법

엔도풀러렌이 들어있는 다양한 나노피포드에 대하여 실험적으로나 이론적으로 많은 연구들이 진행되어 왔다. 본 연구에서는 풀러렌 안에 삽입된 금속 물질이 F, Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Al<sup>3+</sup> 등과 같이 완전히 이온화 된다고 가정한다. 이전의 논문 [11,19]에서도 이러한 가정을 사용하였다. 그러나 MD 코드에서는 효율을 위해서는 엔도풀러렌 안의 이온화 금속 물질에 대해서는 계산상에 고려를 하지 않았다. Kwon 등이 연구한 논문 [11]에서처럼 이온화된 풀러렌 안에서 +e 전하가 C<sub>60</sub>에 균일하게 분포되었다고 가정하였다. 따라서 풀러렌을 이루는 탄소 원자는 +e/60의 전하를 가지게 된다.

붕소원자와 질소원자 사이의 상호작용에서는 Tersoff 전위 에너지 함수(식 2-1)가 널리 사용되고 있다[20]. BNNT의 벽과 C<sub>60</sub>의 상호작용은 BNNT와 C<sub>60</sub> 상호작용 사이에 알맞은 파라미터가 없기에, Hodak과 Girifalco가 연구한 C<sub>60</sub>과 (10, 10) CNT 상호작용 에너지 함수를 적용하였다 [21].

$$\phi_{Tersoff} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})]$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & r < R-D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin[\pi(r-R)/(2D)] & |R-r| < D \\ 0 & r > R+D \end{cases}$$

$$f_R(r_{ij}) = \frac{D_0}{S-1} \exp(-\beta\sqrt{2S}(r-r_0))$$

$$f_A(r_{ij}) = \frac{SD_0}{S-1} \exp(-\beta\sqrt{2/S}(r-r_0))$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} (1 + \gamma_i^{n_i} \chi_{ij}^{n_i})^{-1/2n}$$

$$\chi_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_C(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp[\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3]$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + c^2/d^2 - c^2/[d^2 + (h_i - \cos\theta_{ijk})^2]$$

(식 2-1)

표 2-1. Tersoff 전위 에너지 함수에 관련된 파라미터

$\tau_i = 0.364153367$	$\gamma_i = 0.000011134$	$S = 1.0769$
$D_0 (eV) = 6.36$	$\beta (\text{\AA}^{-1}) = 2.043057$	$r_0 (\text{\AA}) = 1.33$
$c = 1092.9287$	$d = 12.38$	$h = -0.5413$
$\lambda_3 (\text{\AA}^{-1}) = 1.9925$	$R (\text{\AA}) = 2.0$	$D (\text{\AA}) = 0.1$

$C_{60}$ 과  $C_{60}$ 의 상호작용은 (식 2-2)와 같이 Girifalco 등 [22]의 Lennard-Jones (LJ12-6) 포텐셜을 이용하였다.

$$\phi_{LJ12-6} = -\frac{A}{x^6} + \frac{B}{x^{12}} = 4\epsilon \left[ -\left(\frac{\sigma}{x}\right)^6 + \left(\frac{\sigma}{x}\right)^{12} \right] \quad (\text{식 2-2})$$

표 2-2. LJ12-6 전위 에너지 함수를 사용하는 상호작용 원자와 파라미터

상호작용 원자	$\epsilon$ (eV)	$\sigma$ (Å)
$C_{60} - C_{60}$	0.00286	3.4681
Cu - BNNT	0.1448	2.039
Cu - Cu	0.415	2.277
C - Cu	0.0144	2.040

전극으로 사용되는 구리원자와 BNNT 사이에는  $\epsilon = 0.1448$  eV과  $\sigma = 2.039$  Å의 값을 갖는 LJ12-6 포텐셜 [23]을 사용하였으며, 구리 원자들 사이에는  $\epsilon = 0.415$  eV과  $\sigma = 2.277$  Å의 값을 갖는 LJ12-6 포텐셜[23]을 적용하였다.

단일 나노피포드 형에서는 탄소 원자 60개로 이루어진 풀러렌을 하나의 원자로 고려하여 동작과 특성을 시뮬레이션을 하였다. 따라서, (식 2-2)를  $C_{60}$ 과  $C_{60}$  사이에 거리에 따라 계산하여 (식 2-3)과 같이 피팅하였다.

$$\phi_{C_{60}-C_{60}} = 4 \times 0.085 \times \left[ -\left(\frac{9.54}{x}\right)^6 + \left(\frac{9.54}{x}\right)^{50} \right] \quad (\text{식 2-3})$$

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 [24-28]. 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  $5 \times 10^{-4}$  ps이며, 시뮬레이션의 온도는 300 K이다.

그림 2-1은 시뮬레이션된 구조 개략도를 보여주고 있다. 총 54 Å의 길이를 갖고 있으며, (10, 10) BNNT 안에 약 6 Å의 구리가 채워져 있다. 시뮬레이션의 편의를 위해서 왼쪽을 메모리의 0을 나타내는 'bit 0'이라고 하고, 오른쪽을 'bit 1'이라고 한다.

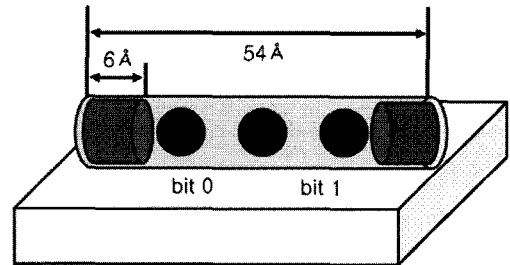


그림 2-1. 단일 나노피포드 형 메모리 시스템 구조

### 3. 결과 및 고찰

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

반데르발스(van der Waals) 힘이  $C_{60}$  풀러렌이 있는 피포드 양쪽 끝에서 안정하게 되며, 전극 부분에서 가장 큰 힘을 갖게 되는데, 그림 3-1의 결과는 셔틀 풀러렌의 위치 변화에 따른 포텐셜 에너지의 변화를 잘 나타내고 있다.

포텐셜 에너지가 제일 낮은 피포드의 양쪽 끝에

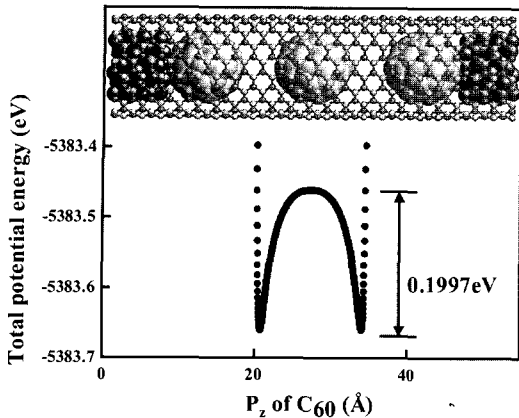


그림 3-1. 셔틀 풀러렌의 위치에 따른 메모리 시스템의 결합 에너지

서 셔틀 풀러렌이 움직이기 위한 활성화 에너지 벽 (activation energy barrier)은 약 0.1997 eV 이다. 또한, 구리 전극과 C<sub>60</sub>와의 결합 에너지가 C<sub>60</sub> 풀러렌들 간의 결합 에너지 보다 훨씬 높기 때문에 (+) 혹은 (-)의 외부 전기장이 가해져도 셔틀 풀러렌만 그 위치가 변하게 됨을 알 수 있었다.

그림 3-2에서 보는 바와 같은 구조를 가지고 여러 형태의 외부 전기장을 인가하여 MD 시뮬레이션을 하였다.

그림 3-3부터 그림 3-10까지 (a)는 셔틀 풀러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도(Vz)를 나타낸 것이고, (b)는 셔틀 풀러렌의 z축 방향에서의 위치(Pz)를 나타내는 것이며, (c)는 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장(Fext)을 나타내는 것이다. 시뮬레이션은 처음 외부전기장을 0 eV/Å를 인가한 상태로 10,000 step을 처리하다가, 100 step 동안 원하는 전

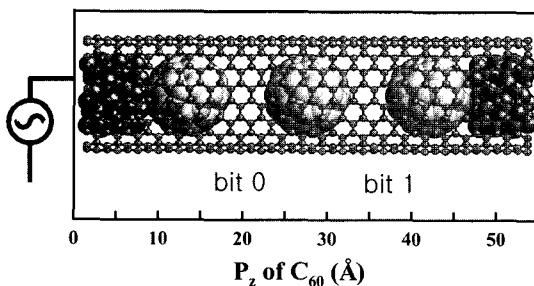


그림 3-2. MD 시뮬레이션을 위한 셔틀 풀러렌의 z축에 대한 위치 및 외부 전기장

기장으로 인가하여 총 10,000 step 동안 전계를 준 다음 100 step동안 다시 전기장을 0으로 감소시킨 다음 100,000 step 시뮬레이션을 하였다. 또한, 온도는 300 K으로 처리하였다. z축 방향의 속도 그림에서 피크(peak)가 나타내는 것은 셔틀 풀러렌이 양쪽 끝에 있는 다른 풀러렌과 충돌할 때 생긴 것이며, 피크이후에 반대 방향으로 진행 방향이 바뀐 것을 알 수 있다.

그림 3-3에서 그림 3-6까지는 (+) 전기장을 인가하여, 셔틀 풀러렌이 bit 0의 위치 즉, 왼쪽 위치에서 bit 1로 바꾸는 동작을 시뮬레이션 한 것이다. 그림 3-3은 외부전기장을 0.09 eV/Å로 인가한 결과인데, 셔틀 풀러렌의 위치를 보면 bit 0이 bit 1로 바뀌지 않았으며, 이것은 풀러렌 사이의 상호작용에 의한 결합을 0.09 eV/Å 이하의 외부 전기장의 힘으로 끊지 못한 것이다. 그림 3-4에서 그림 3-6까지의 결과를 비교하여 보면, 외부 전기장이 0.1 eV/Å 때보다 0.2 eV/Å 때가 bit 변환 시간이 줄어들었다. 0.2 eV/Å과 0.4 eV/Å을 비교하면, 0.4 eV/Å 때의 속도가 빠르지만, 반복해서 튕겨 나오는 것을 고려한다면, 0.2 eV/Å 때와 0.4 eV/Å 때에 외부전기장으로 인하여 bit이 바뀌는 시간에는 큰 차이가 없다.

그림 3-7에서 그림 3-10까지는 (-)전기장을 인가한 것으로 bit 1에서 bit 0으로 바꾸는 동작의 결과이다. (+)전기장을 인가한 것과 같은 결과로 0.09 eV/Å 이하의 전기장에서는 풀러렌 사이의 결합을 끊지 못하였다. 그림 3-7에서 그림 3-10까지 비교하여 보면, (+)전기장의 결과와 비슷한 결과를 얻을 수 있었다. 외부전기장이 증가할수록 셔틀 풀러렌이 빠르게 가속되어 스위칭 동작이 빨라지는 것을 알 수 있지만, 여러 차례의 반발되는 것을 볼 수 있다. 이러한 반발되는 동작에 의하여, -0.2 eV/Å의 힘을 가질 때는 스위칭 동작이 이루어지지 못하고 처음 상태로 돌아오는 경우가 있다. 이것은 셔틀 풀러렌이 구리에 붙어 있는 반대편 풀러렌과 부딪히면서 큰 반발력으로 인하여 제자리로 돌아온 것이다.

메모리 시스템으로 사용하기 위해서는 bit 0에서 bit 1로 혹은 그 반대로 바꾸는 것이 용이하여야 한다. 그림 3-11에서 그림 3-14까지는 반복되는 동작을 고려하여 시뮬레이션 하였다.

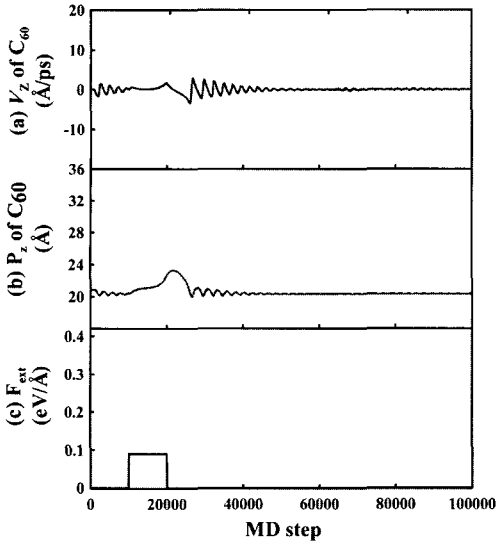


그림 3-3.  $F_{ext} = 0.09 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 0에서 bit 1로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 셔틀 풀러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도  $V_z$ . (b) 셔틀 풀러렌의 z축 방향에서의 위치  $P_z$ . (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

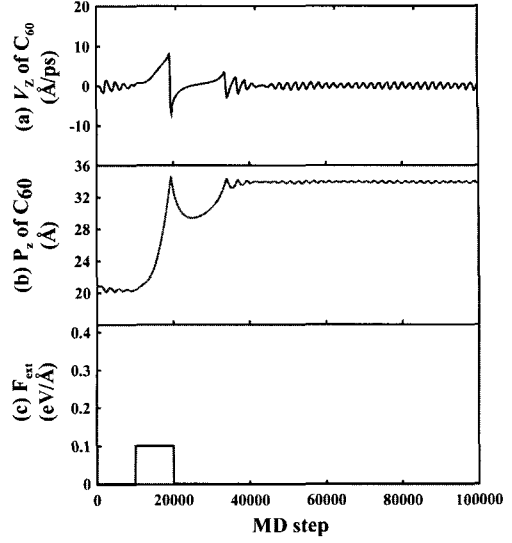


그림 3-4.  $F_{ext} = 0.1 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 0에서 bit 1로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 셔틀 풀러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도  $V_z$ . (b) 셔틀 풀러렌의 z축 방향에서의 위치  $P_z$ . (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

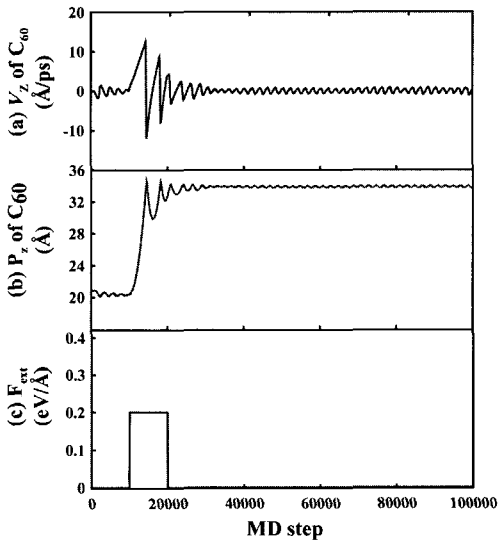


그림 3-5.  $F_{ext} = 0.2 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 0에서 bit 1로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 셔틀 풀러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도  $V_z$ . (b) 셔틀 풀러렌의 z축 방향에서의 위치  $P_z$ . (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

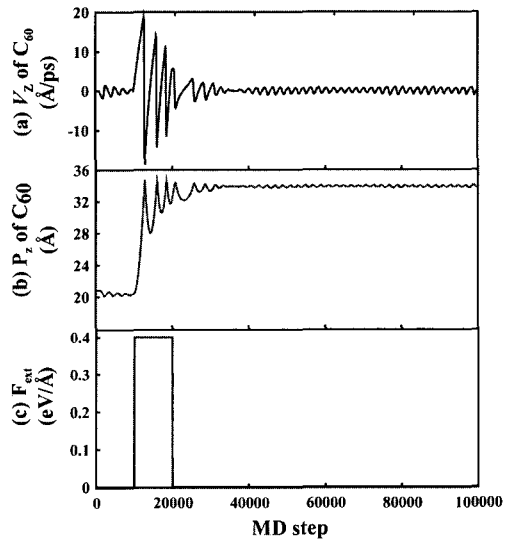


그림 3-6.  $F_{ext} = 0.4 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 0에서 bit 1로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 셔틀 풀러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도  $V_z$ . (b) 셔틀 풀러렌의 z축 방향에서의 위치  $P_z$ . (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

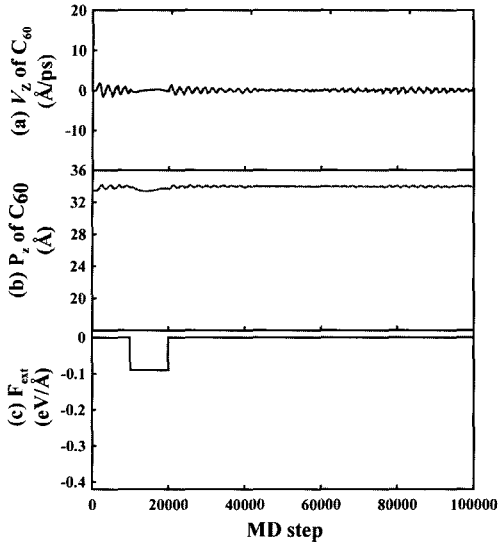


그림 3-7.  $F_{ext} = -0.09 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 1에서 bit 0으로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 서플롤러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도  $V_z$ . (b) 서플롤러렌의 z축 방향에서의 위치  $P_z$ . (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

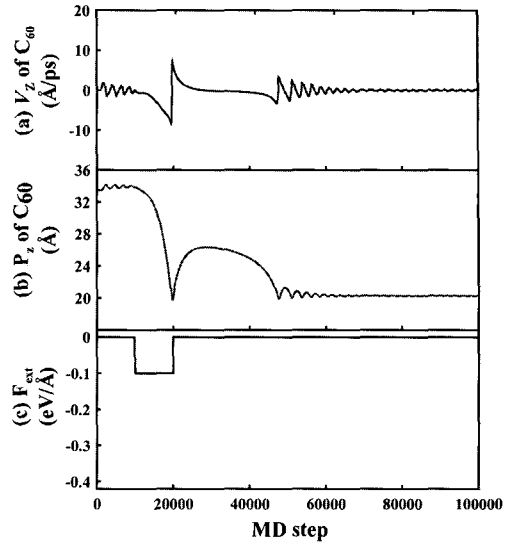


그림 3-8.  $F_{ext} = -0.1 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 1에서 bit 0으로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 서플롤러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도  $V_z$ . (b) 서플롤러렌의 z축 방향에서의 위치  $P_z$ . (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

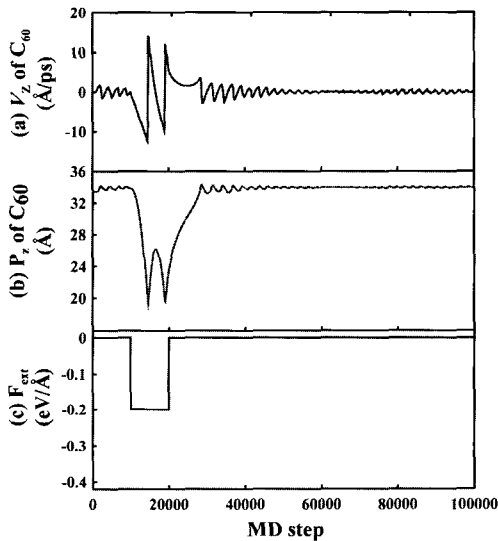


그림 3-9.  $F_{ext} = -0.2 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 1에서 bit 0으로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 서플롤러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도  $V_z$ . (b) 서플롤러렌의 z축 방향에서의 위치  $P_z$ . (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

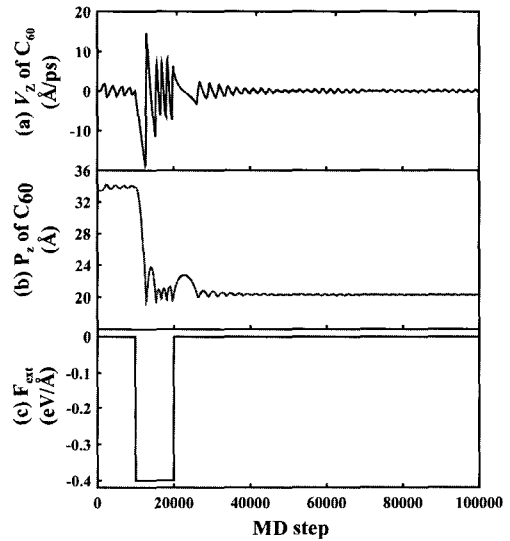


그림 3-10.  $F_{ext} = -0.4 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 1에서 bit 0으로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 서플롤러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도  $V_z$ . (b) 서플롤러렌의 z축 방향에서의 위치  $P_z$ . (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

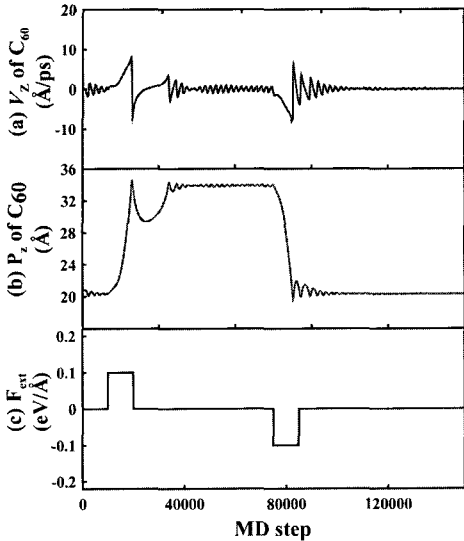


그림 3-11.  $|F_{ext}| = 0.1 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 0  $\rightarrow$  bit 1  $\rightarrow$  bit 0으로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 셔틀 풀러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도 Vz. (b) 셔틀 풀러렌의 z축 방향에서의 위치 Pz. (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

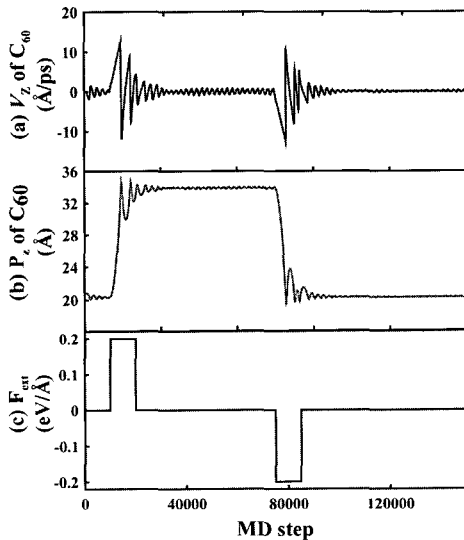


그림 3-12.  $|F_{ext}| = 0.2 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 0  $\rightarrow$  bit 1  $\rightarrow$  bit 0으로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 셔틀 풀러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도 Vz. (b) 셔틀 풀러렌의 z축 방향에서의 위치 Pz. (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

시뮬레이션은 처음 외부전압을  $0 \text{ eV/\AA}$ 를 인가한 상태로 10,000 step을 처리하다가, 원하는 전기장으로 10,000 step 동안 증가하여 다시 외부 전기장을 0으로 감소하여 75,000 step까지 시뮬레이션 한 다음 10,000 step 동안 반대 방향의 외부 전기장을 인가하여 시뮬레이션 하고, 다시 외부 전기장을 0으로 감소시킨 다음 150,000 step까지 시뮬레이션 하였다.

그림 3-11과 그림 3-12는 bit 0에서 시작하여 bit 1로 다시 bit 0으로 이동시키는 시뮬레이션을 각각  $0.1 \text{ eV/\AA}$ ,  $0.2 \text{ eV/\AA}$ 의 외부전기장의 크기를 가지고 동작시켰다. 또한, 그림 3-13과 3-14는 bit 1에서 시작하여 반복되는 bit 변화를 각각  $0.1 \text{ eV/\AA}$ ,  $0.2 \text{ eV/\AA}$ 의 외부전기장을 인가하여 동작시켰다. 그림 3-11의  $0.1 \text{ eV/\AA}$ 의 외부전기장보다 그림 3-12의  $0.2 \text{ eV/\AA}$ 의 동작이 좀 더 빠르게 스위칭 동작이 일어났음을 알 수 있었다.

하지만, 그림 3-13과 3-14를 비교하면,  $0.2 \text{ eV/\AA}$ 의 외부전기장을 인가한 그림 3-14에서는 셔틀 풀러렌이 구리 전극에 붙어있는 풀러렌과 강한 반발

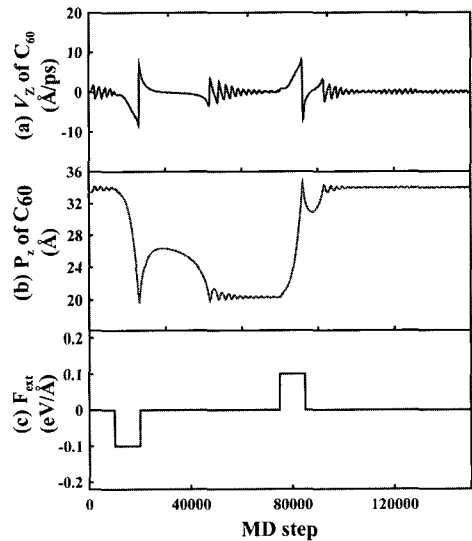


그림 3-13.  $|F_{ext}| = 0.1 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 1  $\rightarrow$  bit 0  $\rightarrow$  bit 1로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 셔틀 풀러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도 Vz. (b) 셔틀 풀러렌의 z축 방향에서의 위치 Pz. (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

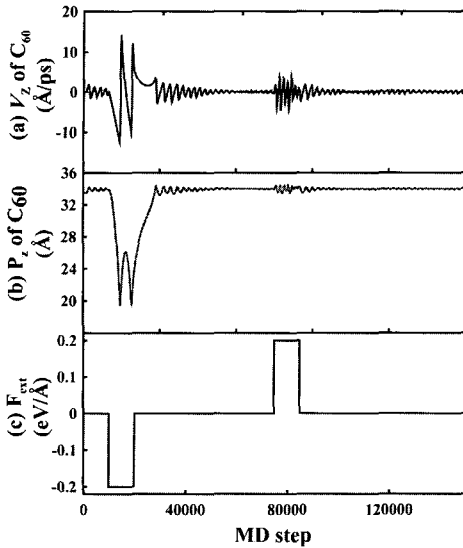


그림 3-14.  $|F_{ext}| = 0.2 \text{ eV/\AA}$  일 때 bit 1  $\rightarrow$  bit 0  $\rightarrow$  bit 1로 바꾸는 시뮬레이션 결과. (a) 셔틀 풀러렌이 z축 방향으로 이동하는 속도  $V_z$ . (b) 셔틀 풀러렌의 z축 방향에서의 위치  $P_z$ . (c) 메모리 시스템 외부에 걸리는 외부 전기장  $F_{ext}$ .

력으로 인해서, bit의 변화가 일어나지 못한 경우가 있음을 알 수 있다.

셔틀 풀러렌이 움직일 수 있는 낮은 외부 전기장을 준다면 여러 번의 반발이 일어나지 않지만, 스위칭 속도가 매우 낮아지게 된다. 하지만, 높은 외부 전기장을 인가한다면 스위칭 속도는 빨라지지만 여러 차례 반발이 생기게 된다.

본 연구에서 시뮬레이션 한 결과  $F_{ext} = \pm 0.1 \text{ eV/\AA}$  일 때는 정확한 비트 변화가 주어진 조건하에서 100% 일어났으나  $-0.2 \text{ eV/\AA}$  일 때는 bit 변화가 일어나지 않는 경우가 발견되었다. 이것은  $-0.2 \text{ eV/\AA}$  영역에서 100%의 확률로 정확한 bit 변화가 일어나지 않을 수 있다는 것이다. 그래서 본 연구에서는  $F_{ext} = -0.2 \text{ eV/\AA}$  를 넘어서는 전기장 영역은 메모리의 정상적 동작을 위한 고려 대상이 아니므로 이러한 경우의 확률 계산은 수행하지 않았다.

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 외부전기장, 스위칭 속도, 활성 영역의 길이 등을 충분히 고려하여 설계한다면, 메모리 소자로서 동작할 가능성이 있다는 것을 알 수 있다.

본 연구결과 외부전기장  $0.1 \text{ eV/\AA}$  이상  $0.2 \text{ eV/\AA}$  미만의 값을 가질 때 단일 나노피포드 형 메모리 시스템이 안정한 동작을 함을 알 수 있었다.

#### 4. 결 론

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  $C_{60}$  풀러렌이 있는 형태로 구성되어 있다. 가운데 있는 풀러렌이 셔틀 풀러렌으로써 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 0과 1을 구분할 수 있으며, 외부전기장에 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.

본 논문은 분자동역학 시뮬레이션을 통하여, 단일 나노피포드 형의 비휘발성의 특성을 갖는 나노미터 크기의 메모리 소자를 연구하였으며, 실제로 구현하기 위해서는 스위칭 속도, 외부 전기장의 크기, 활성 영역의 길이 등 여러 가지를 고려하여 설계해야 한다. 본 연구결과는 세계적 관심사항인 나노소자 개발에 활용될 것으로 기대된다.

#### 참 고 문 헌

- [1] S. Iijima, Nature **354**, 56 (1991).
- [2] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus and P. C. Eklund, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, (Academic Prss, San Diego, 1996)



- [3] J. Zhao, A. Buldum, J. Han, and J. P. Lu, *Nanotechnology* **13**, 195 (2002).
- [4] R. E. Barajas-Barraza and R. A. Guirado-Lopez, *Phys. Rev. B* **66**, 155426 (2002).
- [5] B. W. Smith, M. Monthioux, and D. E. Luzzi, *Nature* **396**, 323 (1998).
- [6] B. Bouteaux, A. Claye, B. W. Smith, M. Monthioux, D. E. Luzzi, and J. E. Fischer, *Chem. Phys. Lett.* **310**, 21 (1999).
- [7] B. W. Smith, M. Monthioux, and D. E. Luzzi, *Chem. Phys. Lett.* **315**, 31 (1999).
- [8] B. W. Smith and D. E. Luzzi, *Chem. Phys. Lett.* **321**, 169 (2000).
- [9] K. Hirahara, K. Suenaga, S. Bandow, H. Kato, T. Okazaki, H. Shinohara, and S. Iijima, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5384 (2000).
- [10] J. Sloan, R. E. Dunin-Borkowski, J. L. Hutchison, K. S. Coleman, V. C. Williams, J. B. Claridge, A. P. E. Yorka, C. Xu, S. R. Bailey, G. Brown, S. Friedrichs, and M. K. H. Green, *Chem. Phys. Lett.* **316**, 191 (2000).
- [11] Y. K. Kwon, D. Tománek, and S. Iijima, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1470 (1999).
- [12] R. F. Service, *Science* **292**, 45 (2001).
- [13] W. Mickelson, S. Aloni, W-Q Han, J. Cumings, and A. Zettl, *Science* **300**, 467 (2003).
- [14] D. Goldberg, F. F. Xu, and Y. Bando, *Appl. Phys. A.* **76**, 479 (2003).
- [15] S. Okada, S. Saito, and A. Oshiyam, *Phys. Rev. B.* **64**, 201303 (2003).
- [16] L. A. Girifalco and M. Hodak, *Phys. Rev. B.* **65**, 125404 (2002).
- [17] B. I. Yakobson and R. E. Smalley, *Am. Sci.* **85**, 324 (1997).
- [18] X. Blase, A. Rubio, S. G. Louie, and M. L. Cohen, *Europhys. Lett.* **28**, 335 (1994).
- [19] G. Gao, T. Cagin, and W. A. Goddard III, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5556 (1998).
- [20] K. Albe and W. Moller, *Comp. Mater. Sci.* **10**, 111 (1998).
- [21] M. Hodak and L. A. Girifalco, *Phys. Rev. B* **67**, 075419 (2003).
- [22] L. A. Girifalco, M. Hodak, and R. S. Lee, *Phys. Rev. B* **62**, 13104 (2000).
- [23] S. Dorfman, K. C. Mundim, D. Fuks, A. Berner, D. E. Ellis, and J. V. Humbeeck, *Met. Sci. Eng. C* **15**, 191 (2001).
- [24] J. W. Kang and H. J. Hwang, *Nanotechnology* **13**, 524 (2002).
- [25] W. Y. Choi, J. W. Kang, and H. J. Hwang, *Physica E* **23**, 135 (2004).
- [26] J. W. Kang and H. J. Hwang, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 2629 (2002).
- [27] J. W. Kang and H. J. Hwang, *Comp. Mater. Sci.* **23**, 105 (2002).
- [28] J. W. Kang and H. J. Hwang, *J. Korean Phys. Soc.* **40**, 946 (2002).