

## 원자단위 Electromechanical 모델링을 통한 나노튜브 메모리 연구

### An Atomistic Modeling for Electromechanical Nanotube Memory Study

이강환<sup>1,a</sup>, 권오근<sup>2</sup>

(Kang Whan Lee<sup>1,a</sup> and Oh Keun Kwon<sup>2</sup>)

#### Abstract

We have presented a nanoelectromechanical (NEM) model based on atomistic simulations. Our models were applied to a NEM device as called a nanotube random access memory (NRAM) operated by an atomistic capacitive model including a tunneling current model. We have performed both static and dynamic analyses of a NRAM device. The turn-on voltage obtained from molecular dynamics simulations was less than the half of the turn-on voltage obtained from the static simulation. Since the suspended carbon nanotube (CNT) oscillated with the amplitude for the oscillation center under an externally applied force, the quantity of the CNT-gold interaction in the static analysis was different from that in the dynamic analysis. When the gate bias was applied, the oscillation centers obtained from the static analysis were different from those obtained from the dynamics analysis. Therefore, for the range of the potential difference that the CNT-gold interaction effects in the static analysis were negligible, the vibrations of the CNT in the dynamics analysis significantly affected the CNT-gold interaction energy and the turn-on voltage. The turn-on voltage and the tunneling resistance obtained from our tunneling current model were in good agreement with previous experimental and theoretical works.

**Key Words** : Nanoelectromechanical memory, NEMS, NRAM, Carbon nanotube

#### 1. 서 론

탄소나노튜브(Carbon Nanotube: CNT)[1]의 뛰어난 전기적 기계적 특성으로 인하여 최근 나노전기기계시스템 (NanoElectroMechanical System: NEMS)[2] 개발에 많은 관심의 대상이 되고 있다. CNT 기반 NEMS 중에서, 기가 헤르쯔 영역에서 작동하는 메모리소자 및 스위칭 소자로 작동되는 나노릴레이(Nanorelay)[3-9]가 집중적으로 연구되어왔다. 이는 논리 소자, 메모리 소자, 펄스 발생기

와 진류 혹은 전압 증폭기[5] 등에 응용 가능성이 있다. 최근 미국 Nantero 회사에서 트렌치(trench)를 가로질러 드레인(Drain)과 소스(Source) 전극에 연결되어있는 CNT에 기반한 NEM 메모리[10]를 소개하여 NRAM(Nanotube Random Access Memory)으로 명명하였다. 이 NRAM은 드레인, 소스, 게이트(Gate)와 나노튜브 브릿지(Nanotube Bridge)가 소스와 드레인 전극 사이에 자유롭게 매달려 있는 구조로 되어 있다.

CNT 기반 NEM switch에 관한 연구는 분자동역학 모델[3,11,12]과 연속체(continuum) 모델[11,13] 등을 사용하여 연구되어왔다. Dequesnes 등[3]은 이론적으로 CNT-브릿지에 기반을 둔 NEM-switch를 연구하였다. Sapmaz 등[14]은 CNT-브릿지에 기반을 둔 NEM-switch의 전기와 기계적 성질간의 상호작용에 대해 이론적으로 연구하였다. CNT-브릿지는 트렌치 양쪽 금속 전극 사이에 놓

1. 한국기술교육대학교 정보기술공학부  
(충남 천안시 병천면 가전리 307)  
2. 세명대학교 인터넷정보학부  
a. Corresponding Author : kwlee@kut.ac.kr  
접수일자 : 2005. 9. 29  
1차 심사 : 2005. 11. 15  
심사완료 : 2005. 12. 1

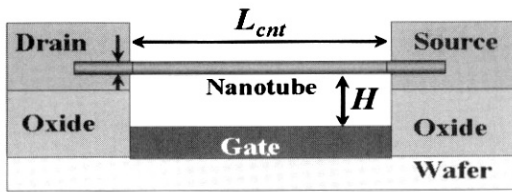


그림 1. 간단한 NRAM 모델 구조[10].  $L_{cnt}$  는 CNT의 길이,  $H$  는 트렌치의 깊이.

Fig. 1. Simple NRAM model structure[10].  $L_{cnt}$  are the length of the suspended CNT.  $H$  is the depth of the trench.

여있고, 게이트는 트렌치 밑에 위치하는데, 이는 외부에서 공급된 게이트 전압에 의해 CNT-브릿지에 전하가 유도될 수 있도록 하기 위함이다. 게이트와 CNT 사이의 전위차가 있을 때, CNT와 게이트 사이에 정전용량으로 쿨롱힘(Coulomb force)이 유도되어 유연한 CNT가 구부러지고, 결국에는 CNT가 게이트에 달라붙게 된다.

CNT-브릿지의 기계적인 진동 역학은 실험과 이론적인 연구에 의해 집중적으로 연구되었다 [15,16]. 그러나 최근에 개발된 NRAM 소자의 동작은 거의 연구되어지지 않은 실정이다[13]. CNT 기반 NEMS 분석을 위한 정전기적 원자단위 정전용량 모델이 최근 몇몇 제안되어 왔다[12,17]. 그러나 NRAM 동작을 모델화하기 위해서는 전하 이동에 따른 전류가 포함되어야 할 뿐만 아니라 전하 이동에 의한 비 정전기(non-electrostatic) 원자단위 정전용량 모델이 고려되어야만 한다. 그러나 이전의 원자단위 정전용량 모델에서는 이러한 전류 및 비정전기적 정전용량 현상은 고려되지 않았다. 본 논문에서는 전하 이동을 포함한 원자단위 정전용량 모델을 결합한 고전적인 분자동력학(Molecular Dynamics: MD) 시뮬레이션을 사용하여 NRAM의 전기기계적 동작을 연구하였다. NRAM 동작의 기계적인 모델은 Tersoff-Brenner 전위에너지 함수와 정전기력 (electrostatic force)을 사용한 원자간 반응으로 모델화하였고, 전하 이동 모델은 연속체 모델에 의해 모델화되었다. 본 논문에서 사용된 MD 모델에 의한 시뮬레이션 결과는 NRAM의 turn-on 동작과 전류-전압 특성을 효과적으로 묘사하였다.

## 2. NRAM의 전기기계 모델링

그림 1은 간단한 NRAM 모델 구조를 보여준다

[10].  $D_{cnt}$  와  $L_{cnt}$  는 트렌치 사이에서 드레인과 소스 사이에 걸쳐있는 CNT의 지름과 길이이다.  $H$  는 CNT의 하단과 게이트 표면 사이의 거리이다. 게이트 전극에 공급된 전압에 의해 CNT에 전하가 유도된다. 정전하는 정전기력을 일으키고, 이것은 CNT를 구부린다. CNT와 게이트 사이에 발생하는 정전기력에 의해 CNT가 구부러지고 CNT가 게이트 전극 위에 접촉하게 된다. 정전기력 이외에, CNT와 게이트 전극 사이의 간격에 따라서, 원자간 인력도 CNT에 영향을 미쳐 CNT를 더욱 구부린다. 정전기력과 원자간 힘은 CNT를 게이트 전극 쪽으로 구부러지게 만든다. 정전기력과 원자간 힘에 대하여 CNT 탄성력, 즉 CNT가 본래의 위치로 복귀하려는 힘이 작용한다. 전압이 게이트에 인가될 때, CNT의 평행 위치는 정전기력, 탄성력과 원자간 힘으로부터 얻어진다. CNT와 게이트 전극 사이에 공급된 전위차가 특정 전위보다 커지면, CNT는 불안정해지고 게이트 전극에 급속하게 접촉한다. CNT를 게이트에 접촉하게 하는 전위차를 turn-on 전압이라고 정의한다. Turn-on 전압이 가해졌을 때, CNT는 게이트 전극과 접촉하게 되고, 소자는 ON 상태가 된다. 전위차가 줄어들면 CNT는 게이트 전극에서 떨어지게 되고, 소자는 OFF 상태로 된다. CNT와 금속 사이의 결합에너지는 CNT와  $\text{SiO}_2$  혹은 CNT와 흑연(graphite) [18] 사이에서 보다 크기 때문에 이러한 근접 범위의 높은 결합에너지는 NRAM을 비휘발성 메모리 소자로 동작하게 만든다.

그러므로 NRAM을 모델화하기 위해서는, 탄성적, 정전기적, 원자상호간 작용 모델이 포함되어야 한다. 고전적인 분자동력학 시뮬레이션에서는 물질의 전자 전기적 특성을 보여주지 못하지만, 열적 기계적 성질은 보여줄 수 있다. 그러므로 몇 개의 경험적 전위식을 기반으로 한 고전적인 분자동력학 모델은 CNT의 탄성 역학 성질과 CNT와 게이트 사이의 원자간 상호작용을 묘사할 수 있다. 본 논문에서는 NRAM 동작을 고전적인 정전용량 모델로부터 원자적 정전용량 모델로 유도하고 터널링 전류 모델을 사용하여 전류-전압 특성을 모델화하였다.

### 2.1 원자단위 정전용량 모델

원통(나노튜브)과 평면(게이트) 사이의 구조의 정전기력은 고전적 정전용량 모델[19]을 사용하여 계산할 수 있다. 원통(나노튜브)의 단위 길이당 정전용량( $C$ )과 원통(나노튜브)의 선 전하 밀도( $\rho_L$ )는

다음과 같이

$$C(h) = \frac{2\pi\epsilon}{\ln\left[\frac{h + \sqrt{h^2 - r^2}}{r}\right]} = \frac{2\pi\epsilon}{\cosh^{-1}\left(\frac{h}{r}\right)} \quad (1)$$

과

$$\rho_L = \frac{4\pi\epsilon V_{gate}}{\ln K_1} \quad (2)$$

로부터 계산된다. 여기서  $\epsilon$  는 유전율,  $h$ 와  $r$ 은 게이트 전극과 CNT 사이의 높이와 CNT의 반지름이고,  $V_{gate}$  는 게이트 전극의 전위이다. 또한  $K_1$  은 식 (2)에서  $\rho_L$ 을 계산하기 위해 사용되는 무차원 파라미터로써 시스템에서  $h$ 와  $r$ 의 구조적 특성을 고려한 값이다.

$$\sqrt{K_1} = \frac{h + \sqrt{h^2 - r^2}}{r} \quad (3)$$

그러므로 단위 길이당 정전기력 ( $F_e$ ) 은 다음과 같다.

$$F_e = \frac{d\left(\frac{1}{2}C(h)V_{gate}^2\right)}{dh} = \frac{\pi\epsilon V_{gate}^2}{\sqrt{h^2 - r^2}} \quad (4)$$

이 때, 총 정전기력( $F_{e,t}$ ) 은

$$F_{e,t} = \int_0^{L_{tot}} F_e dl \quad (5)$$

그러므로  $V_{gate} = 0$  V 이고 CNT와 전극 사이에 원자간 반응이 없을 때, 초기 정전용량( $C_0$ ), 초기 전하 밀도 ( $Q_0$ ), 그리고 초기 정전기력( $F_0$ )이 얻어질 수 있다. 원자 당 정전용량( $C_{0,atom}$ ), 원자당 전하( $Q_{0,atom}$ )와 원자 당 정전기력( $F_{e0,atom}$ ) 은 다음과 같다.

$$C_{0,atom} = \frac{C_0}{N}, \quad Q_{0,atom} = \frac{Q_0}{N}, \quad F_{e0,atom} = \frac{F_0}{N}, \quad (6)$$

여기서  $N$ 은 CNT를 구성하는 원자 개수이다.

본 논문에서, 세 가지의 원자단위 정전용량 모델이 연구되었다. 세 가지의 모델은 다음과 같다.

(1) Model 1:  $V_{gate} \neq 0$  V 일 때 정전용량은 항상  $C_0$  이다. 그러므로 탄소 원자들의  $F_{e0,atom}$  은 CNT의 변위와 무관하게  $V_{gate}$  에서 동일하다.

(2) Model 2:  $V_{gate} \neq 0$  V 일 때, 식 (1)을 사용하여 CNT의 평균 높이 ( $\bar{h}$ )에 따라 정전용량이 변화한다. 그러므로 탄소 원자들의  $F_{e,atom}$  은 탄소 원자들의 변위와 무관하게  $V_{gate}$  에서 동일하다.

(3) Model 3: 각 탄소 원자의 정전용량은 각 탄소 원자의 변위에 따라 변화한다. 그러므로 시간  $t$  에서,

$$C_{t,atom} = C_{0,atom} \frac{\ln\left(\frac{H + \sqrt{H^2 + r^2}}{r}\right)}{\ln\left(\frac{h_{t,atom} + \sqrt{h_{t,atom}^2 + r^2}}{r}\right)}, \quad (7)$$

$$Q_{t,atom} = Q_{0,atom} \frac{\ln\left(\frac{H + \sqrt{H^2 + r^2}}{r}\right)}{\ln\left(\frac{h_{t,atom} + \sqrt{h_{t,atom}^2 + r^2}}{r}\right)}, \quad (8)$$

$$F_{et,atom} = F_{e0,atom} \frac{\sqrt{H^2 - r^2}}{\sqrt{h_{t,atom}^2 - r_{t,atom}^2}}, \quad (9)$$

여기서  $C_{t,atom}$ ,  $Q_{t,atom}$  와  $F_{et,atom}$ 는 각각 시간  $t$ 에서의 원자의 정전용량, 충전전하와 정전기력이고  $h_{t,atom}$  는 각 원자의 높이이다. 세 번째 모델에서 CNT의 반지름은 항상 일정하다고 가정하였다.

## 2.2 CNT의 역학적 특성 모델

CNT의 역학적 특성은 고전적인 분자동역학 시뮬레이션에서 원자간 상호작용 에너지함수를 계산하여 직접적으로 얻을 수 있다. 탄소인 경우, 본 논문에서는 탄소 시스템에서 널리 쓰이는 Tersoff-Brenner 전위함수[20-22]가 사용되었다. 변형(strain), 영률(Young's Modulus), 탄성역학력과 변형에너지(strain energy)는 Tersoff-Brenner 전위식에 기반을 둔 고전적인 분자동역학 시뮬레이션에서 얻어졌다.

### 2.3 CNT-게이트 원자간 반응 모델

본 논문에서는, 게이트 금속으로 금을 사용하였다. 금-금과 금-탄소 반응은 Lennard-Jones (LJ) 12-6 전위 함수를 사용하였다. 금-탄소에 대한 LJ12-6 전위식에서  $\sigma_{AuC}$ 와  $\epsilon_{AuC}$ 는 각각 2.9943 Å와 0.01273 eV이다[23]. 금에 대한 LJ12-6 전위식에 대한  $\sigma_{Au}$ 와  $\epsilon_{Au}$ 는 각각 2.569 Å와 0.458 eV이다[24]. 일반적으로 CNT와 게이트 사이의 반응은 van der Waals (vdW) 반응과 근접 범위 반응으로 나뉜다. 일반적으로 CNT와 게이트 사이의 거리가 1 nm 이하일 때 CNT에 대한 vdW 반응이 CNT에 영향을 미친다[6,7]. 본 연구에서는 금-탄소 반응에 대한 원자 상호작용의 Cut-off 거리는 1 nm로 고려하였으므로, vdW 반응에 대한 다른 모델은 사용되지 않았다.

### 2.4 유효 운동 방정식(Effective equation of motion)

CNT에 대한 전기기계적인 운동은 정전기, 탄성과 원자간 반응 모델을 고려하여 고전적인 분자동역학 방법을 사용하여 해석하였다. 그러므로 탄소 원자에 대해서, 운동 방정식은 다음과 같이 주어진다.

$$m\ddot{x} = F_{TB} + F_{e\_atom} + F_{LJ} - \gamma_d \dot{x} \quad (10)$$

여기서  $m$ 은 탄소 원자의 질량,  $F_{TB}$ 와  $F_{LJ}$ 는 각각 Tersoff-Brenner 함수와 LJ12-6 함수에 의해 계산된 힘이다.  $\gamma_d = 0.1$ 은 경험적으로 결정된 감쇠 파라미터(Damping parameter)이다. NRAM에 대한 정적 분석(static analysis)을 위해  $\gamma_d$ 는 불필요한 반면  $\gamma_d$ 는 NRAM의 동적 분석(dynamic analysis)을 위해서는 필요하다.

본 논문에서는 정적 분석을 위해 최대 경사법(steepest descent)을 사용하였고, 동적 분석을 위해서는 이전 연구에서 사용되어 온 분자동역학 시뮬레이션을 수행하였다[25-29]. 분자동역학 코드에는 velocity Verlet algorithm과 계산 성능 향상을 위해 이웃원자목록(neighbor list) 방법이 사용되었고, 온도 조절을 위해서 Gunsteren-Berendsen thermostat을 이용하였다. MD 시간 간격( $\Delta t$ )은  $5 \times 10^{-4}$  ps이다.

### 2.5 터널링 전류 모델

CNT와 게이트 사이에 흐르는 터널링 전류의

비율은 Coulomb blockade 이론을 사용하여 계산될 수 있고, 터널링 저항( $R_T$ )은 다음과 같이 모델화된다.

$$R_T(\Delta) = R_0 \exp\left(\frac{\Delta}{\lambda}\right), \quad (11)$$

여기서  $\lambda$ 는 터널링 길이인데 보통 0.0439 nm이고,  $R_0 = 1 \times 10^3 \sim 2 \times 10^5 \Omega$ 는 실험 자료[5-8]로부터 얻어진 접촉 저항이다. 그러므로 터널링 전류  $I = V_{gate} / R_T$ 로 계산된다. CNT의 구부러짐에 대해서 터널링 저항은 지수함수적인 의존성이 있기 때문에 일정한 소스-드레인 전압에서 게이트 전압이 변할 때 전류는 OFF에서 ON 상태로 급격한 전환이 일어난다.

이러한 터널링 저항 모델을 사용하여, 금으로 된 게이트와 접촉된 CNT인 경우, MD 시간  $t$ 에서 전달된 전하량( $\Delta q_T$ )은 다음과 같이 근사적으로 얻어질 수 있다.

$$i(t) = \frac{V_{appl}}{R_0} \exp\left(-\frac{\Delta}{\lambda}\right) \approx \frac{\Delta q_T}{\Delta t_c} = \frac{\sum_i \Delta q_{Ti}}{\Delta t_c}, \quad (12)$$

여기서  $\Delta t_c$ 는 전하 터널링 시간이고  $\Delta q_{Ti}$ 는  $i$ 번째 탄소 원자로부터 전달된 전하량이다. 다음으로, 접촉된 탄소 원자로부터 전달된 전하량,  $\Delta q_{T\_atom}$ 은, 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\Delta q_{T\_atom} = \frac{1}{R_0 C_i} Q_{i\_atom} \exp\left(-\frac{\Delta_{Au-C} - D_0}{\lambda}\right) \Delta t_c \quad (13)$$

여기서  $C_i$ 는 MD 시간  $t$ 에서 CNT의 총 정전용량이다.  $\Delta_{Au-C}$ 는 탄소와 가장 가까이 있는 금-원자 사이의 거리이다.  $D_0 = 3.579$  Å는 탄소와 금의 원자 반지름의 합에  $\lambda$ 를 더하여 얻어진 접촉 거리이다. 본 논문에서는  $\Delta t_c / R_0 C_i = 1$ 로 정하였다. 그러므로 접촉점에서  $\Delta q_{T\_atom}$ 는 다음과 같이 다시 표현된다.

$$\Delta q_{T\_atom} = \begin{cases} Q_{i\_atom} \exp\left(-\frac{\Delta_{Au-C} - D_0}{\lambda}\right) & \Delta_{Au-C} > D_0 \\ Q_{i\_atom} & \Delta_{Au-C} \leq D_0 \end{cases} \quad (14)$$

결과적으로 탄소 원자의 전하  $Q_{i\_atom}$ 는 전달된

전하량  $\Delta q_T$  만큼 감소한다. 이 때 또한,  $C_{i-atom}$  도 감소된다. 최종적으로 전류는 다음과 같은 식에서 얻어진다.

$$I(t) = \frac{1}{\Delta t_c} \sum_{i=0}^N \Delta q_{Ti} \quad (15)$$

본 모델은  $\Delta t_c / R_0 C_i$ 의 값이 실험과 양자 계산을 통해 정확하게 얻어질 때 게이트 금속에 대해 최적화될 수 있을 것이다.

### 3. 결과 및 토론

#### 3.1 시뮬레이션 구조

본 논문에서 모델은 원자단위 시뮬레이션을 기반으로 터널링 전류 모델을 포함하고 정전기력, 탄성력 및 원자간 힘을 이용하여 NRAM 이라고 불리는 NEM 소자에 적용 가능하다. 그림 2는 원자단위 시뮬레이션을 위한 구조를 보여준다. 게이트는 {111} 금으로 구성되어 있다. 표면 지역을 제외한 경계의 두 개의 원자 층 안에 든 금 원자들은 고정되어 있었고, 고정된 아래 층 바로 위의 4개 층은 온도 조절을 위해 사용되었고, 이외 영역은 자유 MD 법에 의해 시뮬레이션 되었다. 이전의 실험들 [10]과 시뮬레이션 결과들[30]은 NRAM의 트렌치 깊이가 CNT의 길이의 약 10 % 일 때 NRAM 구조에 가장 적합함을 보여주고 있다. 길이가 11.567 nm 인 (5,5) CNT의 밑 부분이 금 표면으로부터 1 nm 떨어져 있다. CNT의 양쪽 끝은 모두 고정되어 있고 양쪽의 10개의 원자 층에 온도 조절을 위해 구속 동력학이 적용되었다. 양쪽에서 4개의 원자층의 밑바닥 원자들은 접촉 효과를 고려하기 위해 MD 시뮬레이션 동안 고정되었다.

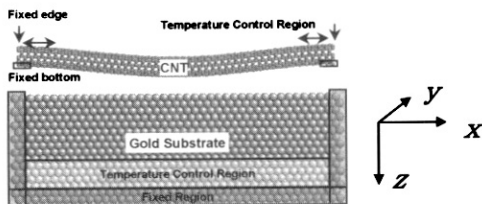


그림 2. 원자단위 시뮬레이션을 위한 구조.  
Fig. 2. Structure for atomistic simulations.

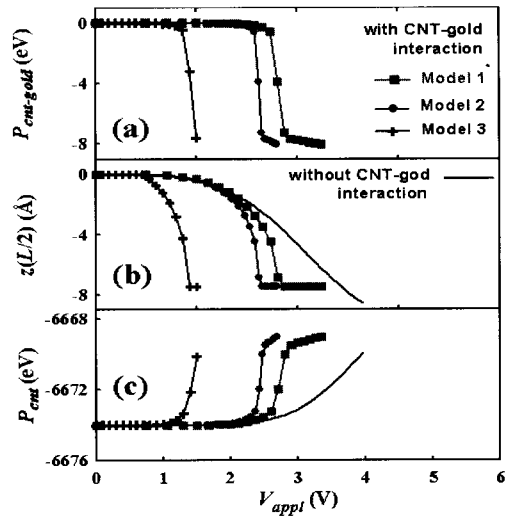


그림 3. (a) 게이트 전압과 정전기 모델에 따른 CNT-금 반응에서의 전위 에너지 ( $P_{cnt-gold}$ ), (b) CNT의 중심점의 변위 ( $z(L/2)$ ), (c) CNT의 전위 에너지( $P_{cnt}$ ).

Fig. 3. (a) The potential energy of the CNT-gold interaction ( $P_{cnt-gold}$ ), (b) the displacement ( $z(L/2)$ ) of the central position of the suspended CNT, and (c) the potential energy of the CNT ( $P_{cnt}$ ).

#### 3.2 정적 분석(Static analysis)

게이트 바이어스( $V_{appl}$ )가 가해졌을 때, CNT의 안정된 구조가 최대 경사법으로 계산되었다. 그림 3(a)-(c)는 CNT-금 반응에 대한 전위 에너지, CNT의 중심점의 변위 ( $z(L/2)$ ), 게이트 전압과 정전기 모델의 함수인 CNT의 전위 에너지( $P_{CNT}$ )를 각각 나타낸다.

그림 3(b)-(c)의 실선은 CNT-금 반응을 고려하지 않은 경우에  $z(L/2)$  와  $P_{cnt}$ 의 변동을 보여준다. 그러나 CNT-금 반응이 고려될 경우, CNT는 급격히 금 표면을 향해 구부러진다. 본 논문에서 시뮬레이션으로 얻어진 turn-on 전압(1.4 ~ 2.7 V)은 실험 결과[10]로부터 얻어진 turn-on 전압 ( $1.5 \pm 0.5$  V)과 매우 유사하다. 흑연판으로부터 1 nm의 간격을 가진 CNT에 대한 끌어당김 전압이 1.9 V 이었음[11]을 고려하면 금-게이트에 대한 본 연구의 결과는, 금-CNT 결합 에너지가 CNT-흑연 결합 에너지[18]에서보다 크기 때문에 합리적이다. 모델 2의 정전기력이 모델 1의 그것보다 약간 높

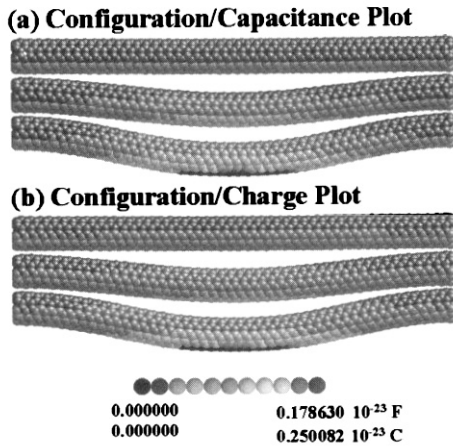


그림 4. 모델 3의 시뮬레이션 결과에 대한 원자당 (a) 구성/정전용량 그림 (b) 구성/전하 그림.  
 Fig. 4. (a) Configuration/capacitance and (b) configuration/charge plots per atom for the simulation results of the Model 3.

기 때문에, 모델 1의 turn-on 전압(2.7 V)은 모델 2의 그것(2.4 V) 보다 0.3 V 만큼 높다. 모델 3의 turn-on 전압(1.4 V)은 모델 1의 절반이었다. CNT의 중간 부분은 CNT의 경계부분보다 좀 더 잘 변화되므로, 모델 3의 turn-on 전압은 모델 1과 2의 그것보다 더 급격히 감소한다. 모델 3이 모델 1과 2보다 더 현실적이다. 모델 3에서, 탄소 원자의 정전기력이 탄소 원자들의 각 위치에서 얻어졌기 때문에, CNT의 중간 부분에 대한 정전기력은 가장자리 부분에서보다 훨씬 높았다. 그러므로 CNT의 중간 부분에 대한 전하와 정전용량은 CNT의 가장자리 부분의 값들과는 다르다.

그림 4(a)-(b)는 모델 3의 CNT 구조에 따른 원자당 정전용량과 전하량을 보여준다. 그림 4에서, 공급된 전압( $V_{appl}$ )은 위로부터 0.8, 1.3 과 1.4 V이다. 동일한 전압에서 원자당 정전용량과 전하량의 값이 서로 다른 것을 그림 4를 통하여 확인할 수 있다.

### 3.3 동적 분석(Dynamic analysis)

그림 2와 같은 NRAM 구조에 대한 동적 분석이 고전적인 분자동역학 시뮬레이션에 의해 연구되었다. 모든 시뮬레이션의 온도는 300 K로 하였다. 그림 5(a)-(e)는 MD 시간에 따른 CNT 중심의 변위 ( $z(L/2)$ ),  $P_{CNT-gold}$ ,  $P_{CNT}$ , 터널링 전류와  $V_{appl}$

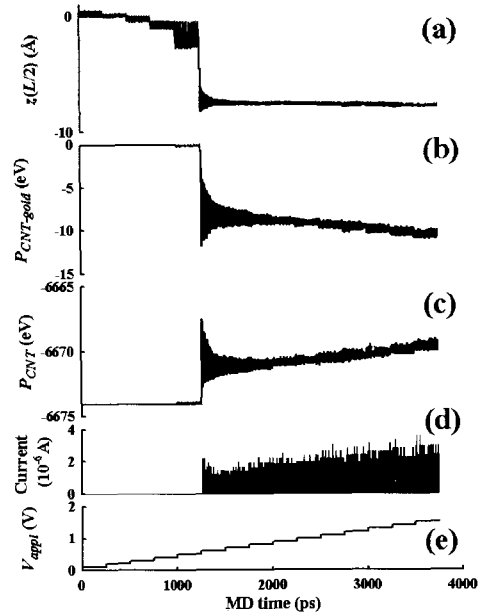


그림 5. (a) CNT 중심의 변위 ( $z(L/2)$ ), (b)  $P_{CNT-gold}$ , (c)  $P_{CNT}$ , (d) 터널링 전류, (e)  $V_{appl}$ .  
 Fig. 5. (a)  $z(L/2)$ , (b)  $P_{CNT-gold}$ , (c)  $P_{CNT}$ , (d) the tunneling current, and (e)  $V_{appl}$ .

를 보여준다.  $V_{appl}$ 이 0.1 V에서부터 250 ps마다 0.1 V씩 증가되었다. 그림 5(a)는  $z(L/2)$ 가  $V_{appl}$ 이 증가함에 따라 게이트 표면 쪽으로 움직이는 것을 보여준다.  $V_{appl} = 0.6$  V에서 CNT는 급격히 게이트 표면에 접촉된다.  $V_{appl} = 0.6$  V에서 NRAM이 turn-on 될 때,  $P_{CNT-gold}$ 와  $P_{CNT}$ 는 급격히 각각 감소하고 증가한다. 또한 전류가 갑자기 흐르기 시작한다. NRAM이 turn-on 된 이후,  $V_{appl}$ 이 증가함에 따라, 그림 5(a)의  $z(L/2)$ 는 거의 일정한 반면, 그림 5(b)의  $P_{CNT-gold}$ 는 약간 감소하고 그림 5(c)의  $P_{CNT}$ 는 약간 증가하였다. 터널링 전류 또한 증가하였다. 동적 시뮬레이션으로부터 얻어진 turn-on 전압 (0.6 V)은 정적 시뮬레이션에서 얻어진 turn-on 전압(1.4 V)의 절반보다 약간 더 작다. 이러한 차이점은 외부에서 공급된 힘에 대해서 CNT가 가장 안정한 위치가 진동의 중심이 되고 이 때 일정한 진폭을 가지고 진동하기 때문이다. 정적 시뮬레이션으로부터는, 단지 CNT의 진동 중심만이 얻어질 수 있는 반면에, 동적 시뮬레이션은 진동 중심에 따른 CNT의 진동을 보여줄 수 있다. 특정

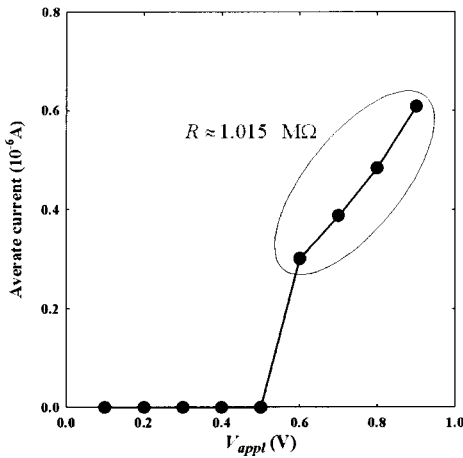


그림 6. 그림 5의 결과에 대한 전류 전압(I-V) 특성.  
 Fig. 6. Current-voltage (I-V) characteristics for results of Fig. 5.

$V_{appl}$ 에 대해, 정적 분석에서의 CNT-금 반응량과 동적 분석에서의 값과는 다르기 때문에, 정적 분석에서 얻어진 진동 중심은 동적 분석에서 얻어진 값과는 다르다. 그러므로 정적 분석에서 CNT-금 반응 효과가 너무 미미한  $V_{appl}$  범위에서, 동적 분석에서 CNT의 진동은 CNT-금 상호작용에 많은 영향을 미친다. 본 논문의 NRAM 구조에서, 트렌치의 깊이가 1 nm 이었고 탄소-금 상호작용 거리가 1 nm 이내 이기 때문에 CNT의 작은 진동에도 CNT-금 상호작용 효과는 NRAM의 동적 동작 분석에 매우 중요하였다.

그림 6은 그림 5의 결과에 대한 전류-전압(I-V) 특성을 보여준다. 전류는 각  $V_{appl}$ 에서 마지막 100 ps 동안의 평균으로 구해졌다.  $V_{appl} = 0.5$  V 때까지, 전류는 흐르지 않았다. 그러나 터널링 전류가 그림 5에 보이듯이  $V_{appl} = 0.6$  V에서 급격히 흘렀다. Turn-on 된 이후에, 터널링 전류는  $V_{appl}$ 가 증가함에 따라 증가한다. 이 때, 계산된 저항은 1.015 MΩ이었고, 이 값은 이 전의 실험값 1 MΩ [10]과 잘 일치한다. 이러한 결과는 본 연구의 모델이 NRAM을 분석하는데 매우 효과적임을 보여주고, 다른 NEM 소자의 분석에도 본 논문의 원자 단위 시뮬레이션을 기초한 모델들이 잘 적용할 수 있음을 보여준다.

$V_{appl} = 0.6$  V 일 때, NRAM의 동적 특성을 보여주기 위해 MD 시뮬레이션을 수행하였다. 그림 7(a)-(e)는 MD 시간에 따른 CNT 중심의 변위

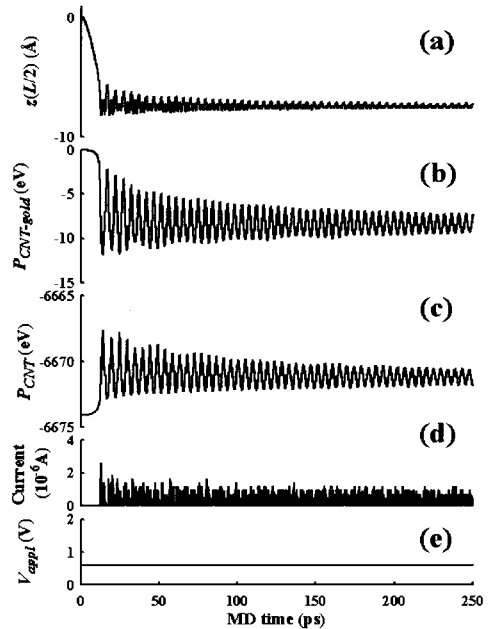


그림 7.  $V_{appl} = 0.6$  V 일 때, MD 시간에 따른 (a)  $z(L/2)$ , (b)  $P_{CNT-gold}$ , (c)  $P_{CNT}$ , (d) 터널링 전류, (e)  $V_{appl}$ .  
 Fig. 7. When  $V_{appl} = 0.6$  V, (a)  $z(L/2)$ , (b)  $P_{CNT-gold}$ , (c)  $P_{CNT}$ , (d) the tunneling current, and (e)  $V_{appl}$ .

( $z(L/2)$ ),  $P_{CNT-gold}$ ,  $P_{CNT}$ , 터널링 전류와  $V_{appl}$ 를 보여준다. 그림 7(a)의  $z(L/2)$ 는 CNT가 10 ps 동안 급격히 금 표면으로 다가감을 보여준다. 터널링 전류는 10 ps 후에 발견되었다. MD 시간이 증가함에 따라, 구부러진 CNT는 더욱 금 표면 위에서 안정화되고 터널링 전류도 안정화되어 거의 일정한 값을 가진다.

그림 8에 보이듯이, 50 ps 에서 100 ps 사이에서  $V_{appl} = 1.0$  V 의 조건으로 150 ps 동안 MD 시뮬레이션을 수행하였다. 그림 8(a)-(e)는 MD 시간에 따른  $z(L/2)$ ,  $P_{CNT-gold}$ ,  $P_{CNT}$ , 터널링 전류와  $V_{appl}$  를 보여준다.  $V_{appl}$ 는 처음 50 ps 동안 0 V 이었다. 이후,  $V_{appl} = 1.0$  V 가 두 번째 50 ps 동안 NRAM에 가해졌다. 마지막으로,  $V_{appl}$ 가 영으로 주어졌다.  $V_{appl} = 1.0$  V 가 가해졌을 때, CNT는 급격히 금 표면으로 다가갔고, CNT는 7.5 ps 후에 금속 표면에 충돌하였다. 그 다음, 터널링 전류의 최고치가 나타났다. 그림 8의  $V_{appl} = 1.0$  V 가 그림 7의  $V_{appl} = 0.6$  V 보다 높았기 때문에, 그림 8의 전이 시간(transition time)은 그림 7에서 보다

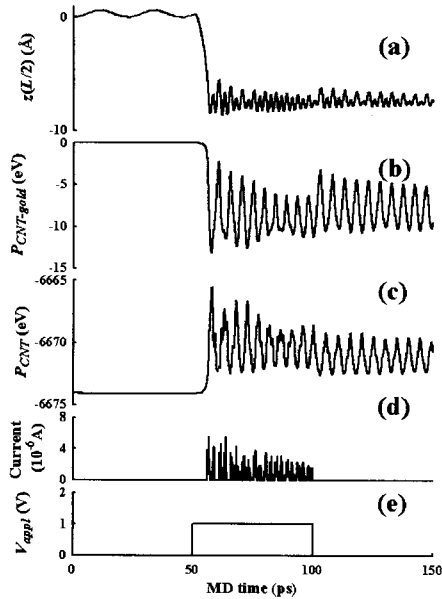


그림 8. MD 시간에 따른 (a)  $z(L/2)$ , (b)  $P_{CNT-gold}$ , (c)  $P_{CNT}$ , (d) 터널링 전류, (e)  $V_{appl}$ .  
 Fig. 8. (a)  $z(L/2)$ , (b)  $P_{CNT-gold}$ , (c)  $P_{CNT}$ , (d) the tunneling current, and (e)  $V_{appl}$ .

작았다. 공급된 전압이 제거된 이후에도, 그림 8(a)의  $z(L/2)$ 는 CNT가 아직 금 표면에 붙어있음을 보여준다. 그러나 CNT-금 결합 에너지 ( $P_{CNT-gold}$ )는 약간씩 감소하였다. CNT의 전위에너지 ( $P_{CNT}$ )는 외부 정전기적인 힘이 감소함에 따라 약간 감소하였다. 100 ps 이후에,  $P_{CNT-gold}$ 는 점진적으로 CNT-금 사이의 결합 에너지인 7.5 eV에 접근하였다.

#### 4. 결론

본 논문에서는 정전용량 모델과 결합된 고전적인 분자동역학 방법에 기초를 둔 나노전기기계시스템(NEMS) 해석을 위한 모델을 연구하였다. 본 모델은 터널링 전류를 고려한 원자단위 시뮬레이션에 기반을 둔 최초의 모델로, 원자단위 정전용량 모델과 원자간 상호작용 에너지 함수들을 포함하고 있다. 본 모델을 NRAM 이라고 불리는 NEM 소자에 적용하여, NRAM 소자에 대한 정적 분석과 동적 분석을 수행하였다. 본 연구에서는 세 가

지의 원자단위 정전용량 모델을 비교하여 NRAM의 동작을 분석하였다. 탄소 원자의 변위에 따라 탄소 원자 정전용량의 변화를 고려하는 모델이 가장 적합하다는 것을 알 수 있었다. 고전적인 분자동역학 시뮬레이션에서 얻어진 turn-on 전압은 정적 분석에서 얻어진 turn-on 전압보다 작게 나타났는데, 이러한 차이는 외부에서 가해지는 힘에 대하여 CNT가 가장 안정한 위치를 진동 중심으로 하여 일정한 진폭을 가지고 진동하기 때문이었다. 정적 분석으로부터 CNT와 게이트 사이의 원자간 상호작용의 영향이 거의 영향을 미치지 못하는 범위의 게이트 바이어스 영역에 해당함에도 불구하고, 동적 분석에서는 CNT와 게이트 사이의 원자간 상호작용은 CNT의 진동으로 인하여 NRAM 동작에 매우 중요한 영향을 끼쳤다. 본 모델로부터 얻어진 터널링 전류-게이트 전압(I-V) 특성 곡선은 이전의 실험에서 얻어진 값과 매우 잘 일치하였다. 향후 본 연구에서 얻어진 모델 및 모델링 기법은 단전자 트랜지스터(Single Electron Transistor)와 같이 원자단위 영역에서 고려되어야 하는 전기역학적 특성을 연구하는데 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

#### 참고 문헌

- [1] S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon", Nature, Vol. 354, No. 6348, p. 56, 1991.
- [2] W. A. Goddard, D. W. Brenner, S. E. Lyshevski, and G. J. Iagrate, "Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology", CRC Press, New York, p. 23, 2003.
- [3] M. Dequesnes, S. V. Rotkin, and N. R. Aluru, "Calculation of pull-in voltages for carbon-nanotube-based nanoelectromechanical switches", Nanotechnology, Vol. 13, No. 1, p. 120, 2002.
- [4] J. M. Kinaret, T. Nord, and S. Viefers, "A carbon-nanotube-based nanorelay", Appl. Phys. Lett., Vol. 82, No. 8, p. 1287, 2003.
- [5] C. Ke and H. D. Espinosa, "Feedback controlled nanocantilever device", Appl. Phys. Lett., Vol. 85, No. 4, p. 681, 2004.
- [6] L. M. Jonsson, T. Nord, J. M. Kinaret, and S. Viefers, "Effects of surface forces and phonon dissipation in a three-terminal

- nanorelay", J. Appl. Phys., Vol. 96, No. 1, p. 629, 2004.
- [7] L. M. Jonsson, S. Axelsson, T. Nord, S. Viefers, and J. M. Kinaret, "High frequency properties of a CNT-based nanorelay", Nanotechnology, Vol. 15, No. 11, p. 1497, 2004.
- [8] S. W. Lee, D. S. Lee, R. E. Morjan, S. H. Jhang, M. Sveningsson, O. A. Nerushev, Y. W. Park, and E. E. B. Campbell, "A three-terminal carbon nanorelay", Nano Lett., Vol. 4, No. 10, p. 2027, 2004.
- [9] H. J. Hwang and J. W. Kang, "Carbon-nanotube-based nanoelectromechanical switch", Physica E, Vol. 27, Iss. 1-2, p. 163, 2005.
- [10] J. W. Ward, M. Meinhold, B. M. Segal, J. Berg, R. Sen, R. Sivarajan, D. K. Brock, and T. Rueckes, "A non-volatile nanoelectromechanical memory element utilizing a fabric of carbon nanotubes", in proceedings of 2004 Non Volatile Memory Technology Symposium, Vol. 15, p. 34, 2004.
- [11] M. Dequesnes, Z. Tang, and N. R. Aluru, "Static and dynamic analysis of carbon nanotube-based switches", J. Eng. Mater. Tech., Vol. 126, Iss. 3, p. 230, 2004.
- [12] C. Ke and H. D. Espinosa, "Numerical analysis of nanotube-based NEMS devices. Part I: Electrostatic charge distribution on multiwalled nanotubes", J. Appl. Mech., Vol. 72, Iss. 5, p. 721, 2005.
- [13] J. W. Kang, J. H. Lee, H. J. Lee, O. K. Kwon, and H. J. Hwang, "Electromechanical modeling and simulations of nanobridge memory device", Physica E, Vol. 28, Iss. 3, p. 273, 2005.
- [14] S. Sapmaz, Y. M. Blanter, L. Gurevich, and H. S. J. van der Zant, "Carbon nanotubes as nanoelectromechanical systems", Phys. Rev. B, Vol. 67, No. 23, p. 235414, 2003.
- [15] V. Sazonova, Y. Yaish, H. Üstünel, D. Roundy, T. A. Arias, and P. L. McEuen, "A tunable carbon nanotube electromechanical oscillator", Nature, Vol. 431, No. 7006, p. 284, 2004.
- [16] H. Üstünel, D. Roundy, and T. A. Arias, "Modeling a suspended nanotube oscillator", Nano Lett., Vol. 5, No. 3, p. 523, 2005.
- [17] S. V. Rotkin, V. Shrivastava, K. A. Bulashevich, and N. R. Aluru, "Atomistic capacitance of a nanotube electromechanical device", Inter. J. Nanosci. Vol. 1, No. 3-4, p. 337, 2002.
- [18] A. Maiti and A. Ricca, "Metal-nanotube interactions - binding energies and wetting properties", Chem. Phys. Lett., Vol. 395, Iss. 1-3, p. 7, 2004.
- [19] W. H. Hayt, "Engineering Electromagnetics, 5th edition", McGraw Hill International Editions, Singapore, p. 152, 1989.
- [20] J. Tersoff, "Empirical interatomic potential silicon with improved elastic properties", Phys. Rev. B, Vol. 38, No. 14, p. 9902, 1988.
- [21] J. Tersoff, "Modeling solid-state chemistry: interatomic potentials for multicomponent systems", Phys. Rev. B, Vol. 39, No. 8, p. 5566, 1989.
- [22] D. W. Brenner, "Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films", Phys. Rev. B, Vol. 42, No. 15, p. 9458, 1990.
- [23] S. Arcidiacono, J. H. Walther, D. Poulikakos, D. Passerone, and P. Koumoutsakos, "Solidification of gold nanoparticles in carbon nanotubes", Phys. Rev. Lett., Vol. 94, No. 10, p. 105502, 2005.
- [24] P. M. Agrawal, B. M. Rice, and D. L. Thompson, "Predicting trends in rate parameters for self-diffusion on FCC metal surfaces", Surf. Sci., Vol. 515, Iss. 1, p. 21, 2002.
- [25] J. W. Kang, K. R. Byun, and H. J. Hwang, "Twist of hypothetical silicon nanotubes", Model. Simul. Mater. Sci. Eng., Vol. 12, No. 1, p. 1, 2004.
- [26] J. W. Kang and H. J. Hwang, "Structural properties of caesium encapsulated in carbon nanotubes", Nanotechnology, Vol. 15, No. 1, p. 115, 2004.
- [27] J. W. Kang and H. J. Hwang, "Fullerene

- nano ball bearings: an atomistic study", *Nanotechnology*, Vol. 15, No. 5, p. 614, 2004.
- [28] J. W. Kang and H. J. Hwang, "The electroemission of endo-fullerenes from a nanotube", *Nanotechnology*, Vol. 15, No. 12, p. 1825, 2004.
- [29] J. W. Kang and H. J. Hwang, "A bucky shuttle three-terminal switching device: classical molecular dynamics study", *Physica E*, Vol. 23, Iss. 1-2, p. 36, 2004.
- [30] J. W. Kang, J. H. Lee, H. J. Lee, and H. J. Hwang, "A study on carbon nanotube bridge as a electromechanical memory device", *Physica E*, Vol. 27, Iss. 3, p. 332, 2005.