

그래핀 나노리본 메모리의 동적 특성에 대한 연구

이 준 하[†]

[†]상명대학교 컴퓨터시스템공학과

A Study of Dynamic Properties of Graphene-Nanoribbon Memory

Jun Ha Lee[†]

[†]Department of Computer System Engineering, Sangmyung University, Cheonan 330-720

Abstract

In this work, we investigate the operational properties of this proposed device in detail via classical MD simulations. The bi-stability of the GNF(Graphene Nano-flake) shuttle encapsulated in bi-layer GNR could be achieved from the increase of the attractive energy between the GNRs when the GNF approached the edges of the GNRs. This result showed the potential application of the nano-electromechanical GNR memory as a NVRAM.

Key Words : MD Simulation, Bi-stability, Graphene Nano-ribbon, Nano-flake

1. 서 론

비휘발성 RAM(NVRAM : Non-volatile Random Access Memory)은 전원이 종료된 후에도 저장된 정보가 유지되는 소자이다. 대표적으로는 플래시 메모리로서, 이 소자는 일명 USB메모리라는 명칭으로 현재 개인용 정보저장 장치 및 스마트폰 및 디지털 카메라 등의 저장장치로 사용되고 있으며, 노트북등의 SSD(Solid-Sate Disk)등의 소자로 사용되고 있다. 이러한 정보저장 장치는 스케일링에 의한 고집적화가 요구되고 있으나 셀 크기 감소에 따른 전하저장의 물리적인 한계를 극복해야 하는 문제를 가지고 있다. 대체적인 소자로서 MRAM (Magnetoresistive RAM), PCRAM (Phase Change RAM) 및 RRAM(Resistive RAM)등의 다양한 물리적 메커니즘을 갖는 비휘발성 소자들이 제시되고 있다[1-3].

탄소나노튜브를 이용한 셔틀 메모리는 1999년 'bucky shuttle' 메모리로 발표된 이후로 다양한 형태의 탄소나노튜브 기반의 셔틀 메모리가 이론적으로 연구되어 왔다[4-6]. 초기의 이론적 연구들은 제작의 어려움으로 소자로서 동작이 가능하다는 것의 제시로 그

중요성을 입증 받았으나, 최근에는 그래핀을 기초로 한 셔틀 메모리의 몇몇 새로운 구조가 제시되고 있으며, 제시되고 있는 구조 중 주목할 수 있는 것은 그래핀 나노리본(GNR:Graphene Nano-Ribbon)을 기초로 한 그래핀 나노플레이크(GNF:Graphene Nano-Flake) 셔틀 메모리이다[7,8].

본 연구에서는 그림1과 같은 형태의 그래핀 나노플레이크 셔틀 메모리를 제안하고자 한다. GNF를 포함하고 있는 두 층의 GNR 및 GNF 자체는 국부 에너지 최소 위치에서 안정화 될 수 있으며, 이러한 동작원리에 대한 해석을 위하여 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 동작 특성을 분석하였다. GNF이중층 GNR에 캡슐화된 GNF 셔틀의 두가지 안정성은, GNF가 GNR의 모서리 부근으로 접근할 때 GNR간의 서로 당겨지는 인력적 반데어발스(Van der Waals) 에너지의 증가에 의해 이루어질 수 있다. 이러한 결과를 통하여 NVRAM으로 활용 가능한 GNR메모리의 동작을 제시하였다.

2. 모델링 및 시뮬레이션 방법

모델링을 위한 제안한 구조는 그림 1과 같은 2진 데이터를 저장하기 위한 두가지 상태가 존재하는 형태이

[†]E-mail : junha@smu.ac.kr

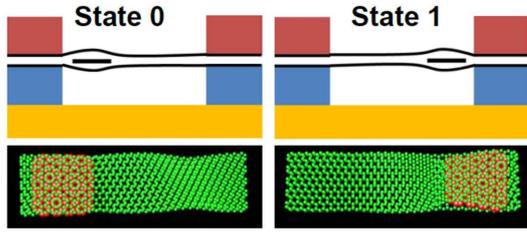


Fig. 1. Shuttle memory schematics of two-states to store binary data information.

다. 이러한 GNR메모리의 동적 움직임을 분석하기 위하여 본 연구에서는 자체 제작한 분자동역학 코드를 이용한 시뮬레이션을 사용하였다. Fig. 1은 1466개의 탄소 원자로 구성되어 있고 이중 GNF는 $1.97 \text{ nm} \times 1.99 \text{ nm}$ 크기의 166개 원자로 구성되어 있으며, GNR은 7.85 nm 의 650개 원자로 이루어져 있다. 초기의 원자 속도는 맥스웰 분포로 가정하였으며 온도는 1 K 로 설정하였다. 이중층 GNR의 양 끝 부분이 Fig. 1과 같이 전극에 내장되어진 형태이므로 시뮬레이션이 수행되는 동안에 양 끝 부분의 GNR원자는 고정되어 있으며, GNF 셔들은 이중층 GNR내에서 자유롭게 이동할 수 있다. 탄소 원자 상호간의 인력 작용으로 인한 그래핀의 공유결합 형성을 모델화하는 원자상호간 에너지는 Tersoff- Brenner 포텐셜 모델을 이용하며, 탄소의 원거리 상호작용을 기술하는 모델은 Lennard-Jones 12-6 포텐셜을 이용하였다 [9,10].

Fig. 2는 GNF에 2 meV/\AA 의 힘(F_A)이 가해질 때 셔틀메모리의 동작과 연관된 파라미터 값의 변동을 나타내고 있다. 셔틀의 위치(X_S)는 초기에 -3 nm (상태 0)이지만, 0.01 ns 후에 3 nm (상태 1)의 위치로 변화되었다. 이는 초기의 안정된 구성에서 외부에서 가해진 힘에 의하여 불안정 상태로 변화된 것을 의미하며, 이로부터, GNF가 포텐셜 에너지 장벽을 넘어 왼쪽 위치에서 벗어나 다른 상태로 이동하였음을 의미한다. 몇번의 변동 이후에 GNF는 안정화되고 이는 셔틀메모리가 NVRAM으로 동작할 수 있는 가능성을 확인시켜줄 수 있는 결과이다.

3. 결 과

Fig. 3은 “상태 0” 및 “상태 1”의 셔틀의 위치에 따른 셔틀의 속도(v_S) 및 반데어발스 에너지의 변화를 나타내고 있다. 그림 3(a)에서는 셔틀의 모멘텀이 국부 에너지 최소 위치로 수렴함을 보여주며, (b)에서는 $U_{vdW} - X_S$ 상호관계를 분석할 수 있다. 셔틀메모리의

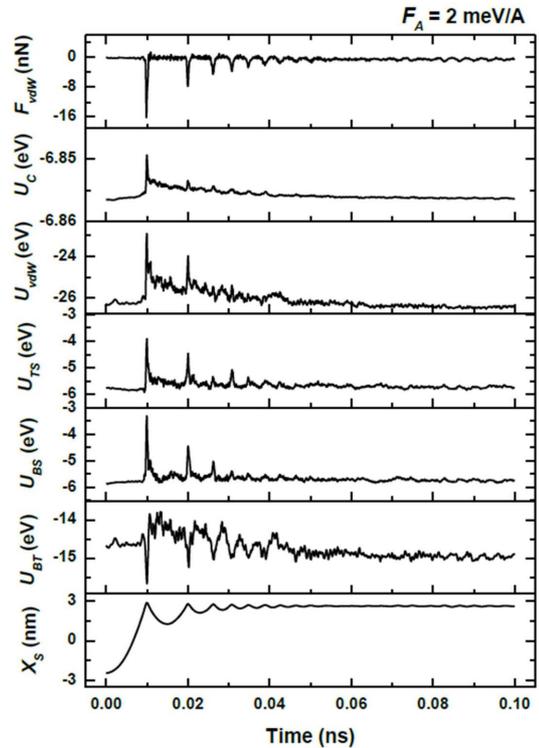


Fig. 2. MD results as a function of the MD time when the force field (F_A) of 2 meV/\AA was applied to the GNF. From bottom, the shuttle's position (X_S), the vdW energy between the bottom GNR and the GNF (U_{BS}), the vdW energy between the top GNR and the GNF (U_{TS}), the total vdW energy (U_{vdw}), the covalent bonding energy per atom (U_C), and the vdW force exerted on the GNF along the GNR's axis (F_{vdw}).

비휘발성은 국부 에너지 최소 위치에서의 포텐셜 우물의 깊이와 밀접한 관계가 있어, 포텐셜 우물의 깊이가 깊어질수록 비휘발성은 증가하게 되므로, 이러한 포텐셜 우물의 근원을 분석하는 것이 매우 중요하다. 초기 위치의 변화와 힘에 따른 12번의 시뮬레이션 결과 X_S 의 함수에 따른 U_{BS} , U_{TS} , U_{BT} 의 변화를 분석하였으며, 이 결과를 Fig. 4에 나타내었다. GNF가 금속 전극에 가까워지면, GNF와 GNR간의 반데어발스 포텐셜 에너지는 Fig. 4(a) 및 (b)와 같이 급격하게 증가하게 되며, GNR간의 반데어발스 포텐셜 에너지는 (c)와 같이 감소하게 된다.

따라서 총 반데어발스 에너지 $U_{vdW} = U_{BS} + U_{TS} + U_{BT}$ 는 (d)와 같이 GNR의 양 끝 모서리에서 쌍-안정

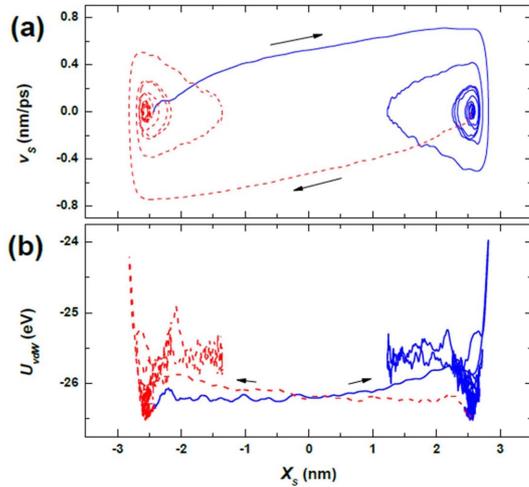


Fig. 3. Variations of (a) the shuttle's velocity (v_s) and (b) the vdW energy as a function of the shuttle's position (X_s) for two cases such as the transition from 'state 0' to 'state 1' under $F_A = 2$ meV/Å and vice versa under $F_A = -2$ meV/Å .

포텐셜 우물을 형성할 수 있는 구조가 된다. 이러한 해석을 통해, GNF가 GNR의 중심에서 벗어날 때 GNR 간의 인력 증가에 의하여 포텐셜 우물이 형성되는 메카니즘이 검증되어 질 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 NVRAM 소자로서 동작할 수 있는 GNF 셔틀로 캡슐화 동적 특성을 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 분석하였다. 분석된 시뮬레이션 결과는 이러한 나노전자기계적 비휘발성 메모리는 다양한 스마트 디바이스의 스위칭 소자, 미세센서 및 양자컴퓨터로 활용될 수 있기를 기대한다.

감사의 글

본 논문은 상명대학교 2012년 교내연구비에 의하여 수행되었음.

참고문헌

1. T. Bedeschi, et al, "A bipolar-selected phase change memory featuring multi-level cell storage," IEEE J. of Solid-State, vol. 44, no. 1, pp. 217-227, Feb. 2008.
2. W. Zhao, E. Belhaire, Q. Mistral, C. Chappert, V.

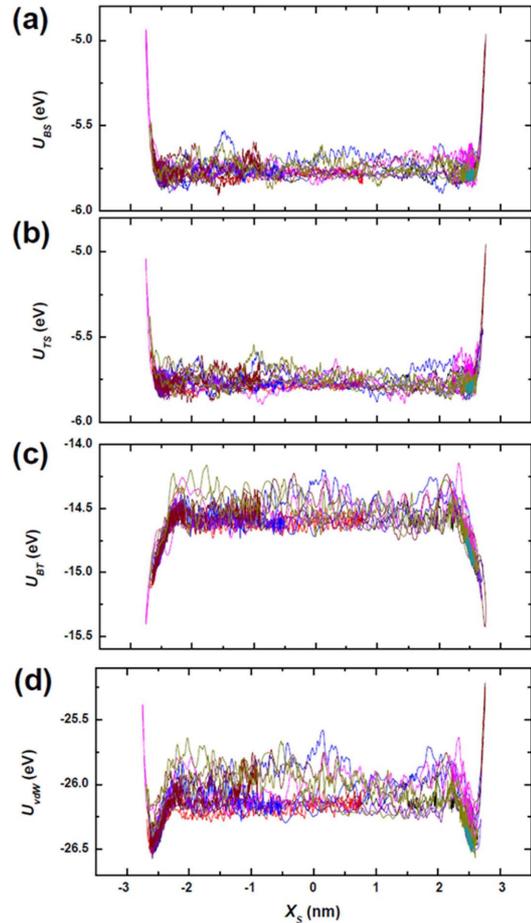


Fig. 4. Variations of (a) U_{BS} , (b) U_{TS} , (c) U_{BT} , (d) U_{vdW} , (e) U_C , and (f) U as a function of the X_s twelve MD simulations with different initial positions and force fields.

Javerliac, B. Dieny, and E. Nicolle, "Macro-model of Spin-Transfer Torque Based Magnetic Tunnel Junction Device for Hybrid Magnetic-CMOS Design," in IEEE Int'l Behavior Modeling and Simulation Workshop, Sep. 2006, pp. 40-43.

3. R. Beech, J. Anderson, A. Pohm, and J. Daughton, "Curie point written magnetoresistive memory," J. Appl. Phys., vol. 87, pp. 6403, 2000.
4. V. Pott, G. K. Chua, R. Vaddi, J. M.-L. Tsai, and T. T. Kim, "The shuttle Nanoelectromechanical Nonvolatile Memory," IEEE Trans. Electron. Dev. Vol. **59**, pp.1137-1143, 2012.
5. Y. K. Kwon, D. Tománek, and S. Iijima, Phys. Rev. Lett. **82**, 1470, 1999.

6. I. V. Lebedeva, A. A. Knizhnik, A. M. Popov, Yu. E. Lozovik, and B. V. Potapkin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 5687, 2011.
 7. I. V. Lebedeva, A. A. Knizhnik, A. M. Popov, Yu. E. Lozovik, and B. V. Potapkin, *Physica E* **44**, 949, 2012.
 8. A. Chuvilin, U. Kaiser, E. Bichoutskaia, N. A. Besley, and A. N. Khlobystov, *Nature Chemistry* **2**, 450, 2010.
 9. D. W. Brenner, *Phys. Rev. B* **42**, 9458, 1990.
 10. Z. Mao, A. Garg, and S. B. Sinnott, *Nanotechnology* **10**, 273, 1999.
-
- 접수일: 2014년 6월 3일, 심사일: 2014년 6월 13일,
게재확정일: 2014년 6월 20일