



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0107157
(43) 공개일자 2017년09월25일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C01B 31/04 (2006.01)

(52) CPC특허분류
C01B 32/182 (2017.08)
C01B 2204/06 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-0030713

(22) 출원일자 2016년03월15일

심사청구일자 2016년03월15일

(71) 출원인

고려대학교 산학협력단

서울특별시 성북구 안암로 145, 고려대학교 (안암동5가)

(72) 발명자

이철의

서울특별시 종로구 평창11길 28, 아름마을 을동 201호

전기완

서울특별시 영등포구 국제금융로 79, 한양아파트 E동 707호

이규원

서울특별시 성북구 인촌로17가길 64, 삼성래미안 아파트 111동 703호

(74) 대리인

이동건

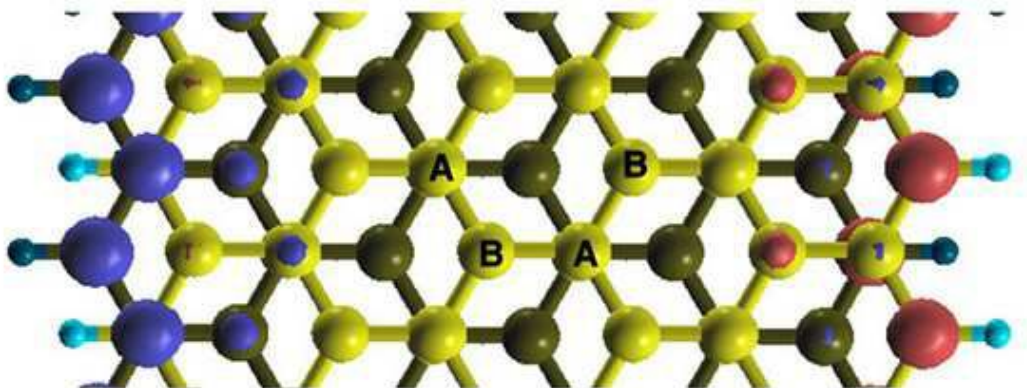
전체 청구항 수 : 총 1 항

(54) 발명의 명칭 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물

(57) 요약

이중 그래핀 나노 리본들로 이루어진 반금속 구조물은 제1 방향을 따라 제1 너비를 갖고 상기 제1 방향에 수직인 제2 방향을 따라 연장되며, 허니컴 결합 구조를 갖는 제1 그래핀 나노 리본 및 상기 제1 그래핀 나노 리본 상에 배치되고, 상기 제1 너비와 실질적으로 동일한 제2 너비를 갖고 상기 제2 방향으로 연장되며, 상기 허니컴 결합 구조를 갖는 제2 그래핀 나노 리본을 포함하고, 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본들 각각에 포함되고, 상기 제2 방향의 양 단의 에지를 따라 위치하는 탄소 원자들은 평면으로 보았을 때 교호적으로 상호 중첩되며, 상기 제1 및 제2 너비는 2.3nm 이상이다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C01B 2204/065 (2013.01)

C01B 2204/22 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

제1 방향을 따라 제1 너비를 갖고 상기 제1 방향에 수직한 제2 방향을 따라 연장되며, 허니컴 결합 구조를 갖는 제1 그래핀 나노 리본; 및

상기 제1 그래핀 나노 리본 상에 배치되고, 상기 제1 너비와 실질적으로 동일한 제2 너비를 갖고 상기 제2 방향으로 연장되며, 상기 허니컴 결합 구조를 갖는 제2 그래핀 나노 리본을 포함하고,

상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본들 각각에 포함되고, 상기 제2 방향의 양 단의 에지를 따라 위치하는 탄소 원자들은 평면으로 보았을 때 교호적으로 상호 중첩되며,

상기 제1 및 제2 너비는 2.3nm 이상인 것을 특징으로 하는 이중 그래핀 나노 리본들로 이루어진 반금속 구조물.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물에 관한 것으로서, 보다 상세하게는, 이중층으로 적층된 그래핀 나노 리본들로 이루어지고, 어느 하나의 스핀을 갖는 전자들만이 선택적으로 전류를 생성할 수 있는 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 그래핀은 탄소 원자들이 육각형 형태로 결합하여 만들어진 2차원 구조체로 반도체의 집적성을 높이는 차세대 전자소자의 소재로서 많은 기대를 받고 있다. 특히 그래핀을 띠처럼 수 나노미터 이하의 선폭으로 잘라낸 그래핀 나노리본은 현재 자주 사용되는 구리와 비교해 더 작은 선폭으로도 더 높은 전기전도도를 나타낼 것으로 예상되어 그래핀 나노리본의 전기적 특성에 대한 많은 연구들이 요구되어 왔다.

[0003] 한편, 전자는 "전하"와 "스핀"이라는 특성을 갖는다. 전하는 일상생활에서 익숙한 전기현상을 일으키며 현대 문명의 근간인 전자공학에서 활용된다. 스핀은 비교적 덜 익숙한 용어이지만 자석에서 발견되는 것과 같은 자기현상을 일으키며 자석에 N극과 S극이 있는 것처럼 스핀도 두 방향을 갖고 있다. 최근 10 여년 간, 전하만이 아니라 스핀까지 활용하려는 차세대 기술인 스핀트로닉스에 대한 연구가 계속되고 있다.

[0004] 스핀트로닉스라 부를 수 있는 일부 기술은 이미 컴퓨터 등의 기억저장장치에서 활용되고 있다. 전류는 전하를 가진 전자의 흐름을 일컫는데, 이 안에는 두 방향의 스핀이 뒤섞여 있어서 알짜 스핀은 항상 0이다. 스핀트로닉스의 기반은 한쪽 방향의 스핀만을 갖는 전류를 생성하고 검출하는 것이다. 이와 같이 스핀 분극된 전류(이하, 스핀전류 라 함)를 생성하고 검출할 수 있는 기본적인 특성을 가진 물질이 반금속 (Half-metal)이다. 금속은 전하가 잘 흐르는 물질이고 절연체는 전하가 흐르지 못하는 물질이다. 반금속에서는 한쪽 방향 스핀을 가진 전자는 금속처럼 잘 흐르지만, 반대 방향의 스핀은 흐르지 못한다. 이처럼 절반은 금속이고 절반은 절연체이므로 반금속이라 하며, 반금속을 통과한 전류는 스핀 분극된다. 지금까지 알려진 반금속 물질들은 대부분 중금속으로 무겁고 환경 및 생체에 해롭다. 따라서 가볍고 친환경적인 반금속 물질에 대한 탐색이 계속되어왔다.

[0005] 근래에 그래핀 나노리본에 외부 전기장을 가하면 반금속이 될 수 있다는 것이 이론적으로 알려졌다. 가볍고 부피가 작은 탄소 고유의 특성 덕분에 그래핀 나노리본은 스핀트로닉스 분야에서의 중요한 연구대상으로도 자리매김하고 있다.

[0006] 그래핀을 층층이 쌓으면 다층 그래핀이 만들어진다. 단순히 그래핀을 층층이 쌓은 것이지만, 층의 수의 따라 다층 그래핀은 다른 특성을 보인다. 단층 그래핀과 다층 그래핀의 특성이 다르듯, 다층 그래핀 나노리본은 단층 그래핀 나노리본과 비교하여 특이한 성질들을 보유하고 있다는 것이 최근 연구결과를 통해 드러나고 있다. 다층 그래핀 나노리본의 전기적 특성에 대한 이론적 접근은 활용 가능한 미래 집적회로 기술의 세계 우위를 점하기 위해서 반드시 필요하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명의 일 목적은, 반금속 특성을 갖는 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물을 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명의 일 실시예에 따른 이중 그래핀 나노 리본들로 이루어진 반금속 구조물은 제1 방향을 따라 제1 너비를 갖고 상기 제1 방향에 수직한 제2 방향을 따라 연장되며, 허니컴 결합 구조를 갖는 제1 그래핀 나노 리본 및 상기 제1 그래핀 나노 리본 상에 배치되고, 상기 제1 너비와 실질적으로 동일한 제2 너비를 갖고 상기 제2 방향으로 연장되며, 상기 허니컴 결합 구조를 갖는 제2 그래핀 나노 리본을 포함하고, 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본들 각각에 포함되고, 상기 제2 방향의 양 단의 에지를 따라 위치하는 탄소 원자들은 평면으로 보았을 때 교호적으로 상호 중첩되며, 상기 제1 및 제2 너비는 2.3nm 이상이다.

발명의 효과

[0009] 본 발명에 따르면, 반금속 구조물에 포함된 이중 그래핀 나노리본은 수평 방향의 외부 전기장에 크기를 조절하여 이중 그래핀 나노 리본 중 어느 하나의 그래핀 나노 리본만 전류가 선택적으로 흐르도록 할 수 있다. 이로써, 수평방향의 전기장 세기만을 조절하여 수직방향으로의 리본들 간에 전기적 성질에 차이를 줄 수 있음으로써, 필요 부품 절감, 집적도 향상, 무게 경감 등을 달성할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0010] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물을 설명하기 위한 평면도이다.

도 2는 도 1의 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물의 정면도이다.

도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물의 선택적 반금속화 특성을 나타내는 모식도이다.

도 4는 본 발명의 일 실시예에 따른 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물에 대한 전기장의 크기 변화에 따른 전도 밀도 함수를 나타내는 그래프들이다.

도 5는 제1 너비의 크기 별 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물에 인가되는 전기장의 방향(각도, θ)에 따른 임계 전기장의 크기를 나타내는 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0011] 이하, 첨부한 도면을 참조하여 본 발명의 실시예들에 대해 상세히 설명한다. 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 첨부된 도면에 있어서, 대상물들의 크기와 양은 본 발명의 명확성을 기하기 위하여 실제보다 확대 또는 축소하여 도시한 것이다.

[0012] 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다.

[0013] 본 출원에서 사용한 용어는 단지 특정한 실시예를 설명하기 위해 사용된 것으로, 본 발명을 한정하려는 의도가 아니다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, "포함하다" 또는 "구비하다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 단계, 기능, 구성요소 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 다른 특징들이나 단계, 기능, 구성요소 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.

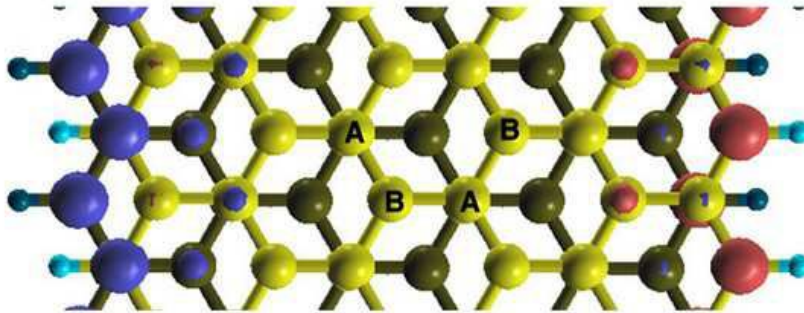
- [0014] 한편, 다르게 정의되지 않는 한, 기술적이거나 과학적인 용어를 포함해서 여기서 사용되는 모든 용어들은 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 가지고 있다. 일반적으로 사용되는 사전에 정의되어 있는 것과 같은 용어들은 관련 기술의 문맥 상 가지는 의미와 일치하는 의미를 가지는 것으로 해석되어야 하며, 본 출원에서 명백하게 정의하지 않는 한, 이상적이거나 과도하게 형식적인 의미로 해석되지 않는다.
- [0015] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물을 설명하기 위한 평면도이다. 도 2는 도 1의 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물의 정면도이다.
- [0016] 도 1 및 도 2를 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물은 제1 그래핀 나노 리본 및 제2 그래핀 나노 리본으로 이루어진다. 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본들 각각은 그래핀의 단일층에 해당한다. 즉, 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본들 각각은 그래핀 단일층으로 이루어진 이차원 평면 구조를 가진다. 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본들 각각에 포함된 탄소 원자들은 상호 허니컴 구조로 상호 연결되어 있다.
- [0017] 상기 제1 그래핀 나노 리본은 제1 방향(x 방향)을 따라 제1 너비(w)를 갖고 상기 제1 방향에 수직한 제2 방향(y 방향)을 따라 연장된다.
- [0018] 상기 제2 그래핀 나노 리본은 상기 제1 그래핀 나노 리본 상에 이격되어 배치된다. 상기 제2 그래핀 나노 리본은 상기 제1 너비와 실질적으로 동일한 제2 너비를 갖고 상기 제2 방향으로 연장된다. 상기 제2 그래핀 나노 리본은 상기 허니컴 결합 구조를 가지며, 제1 그래핀 나노 리본과 실질적으로 동일한 구조를 가진다.
- [0019] 만약, 상기 제2 그래핀 나노 리본이 상기 제1 그래핀 나노 리본의 제1 너비보다 큰 제2 너비를 가질 경우, 외부로 인가되는 전기장의 방향에 관계없이 긴 너비를 갖는 제2 그래핀 나노 리본이 먼저 반금속화가 된다. 이는, 그래핀 나노 리본의 너비가 크면 클수록 제1 방향의 양측의 끝단들 간의 거리가 멀어짐으로서, 상기 전기장에 더 큰 영향을 받기 때문이다. 따라서, 전기장의 방향에 따라 선택적으로 이중 그래핀 나노 리본 중 어느 하나의 그래핀 나노 리본이 반금속화되기 위하여는, 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본이 실질적으로 동일한 너비를 가져야 한다.
- [0020] 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본들 각각에 포함되고, 상기 제2 방향의 양 단의 에지를 따라 위치하는 탄소 원자들은 평면으로 보았을 때 교호적으로 상호 중첩된다.
- [0021] 보다 상세하게는, 평면으로 보았을 때 상기 제2 방향을 따라 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본들 각각에 포함된 탄소 원자들이 지그 재그로 배열된다. 이때, 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본들 각각에 포함된 상기 탄소 원자들이 상하로 중첩되도록 배열되는 경우가 있으며, 하부의 제1 그래핀 나노 리본에 포함된 탄소 원자가 상부의 제2 그래핀 나노 리본에 포함된 탄소 원자와 중첩되지 않도록 배열되는 경우가 있다. 이 경우, 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본들 각각에 포함된 상기 탄소 원자들이 상하로 중첩되도록 배열되는 경우는 A 서브 격자를 이루는 반면에, 하부의 제1 그래핀 나노 리본에 포함된 탄소 원자가 상부의 제2 그래핀 나노 리본에 포함된 탄소 원자와 중첩되지 않도록 배열되는 경우는 B 서브 격자를 이룬다.
- [0022] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본에서 상기 제2 방향을 따라 정의되는 끝단은 A 서브 격자 및 B 서브 격자가 교대로 배열된다. 이와 같은 이중 그래핀 나노 리본의 스택 방식이 AB β 스택킹으로 정의된다. 이 경우, 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본의 상기 제1 방향의 양 끝단에는 서로 다른 스핀 성분을 갖는 전자가 분포할 수 있다.
- [0023] 보다 상세하게는 도1 및 도 2에서 그라운드 상태 하에서 왼쪽의 청색 구는 업 스핀 성분을 갖는 전자 분포를 나타내며, 오른쪽의 적색 구는 다운 스핀 성분을 갖는 전자 분포를 나타낸다. 즉, 이중 그래핀 나노 리본의 스택 방식이 AB β 스택킹에 해당할 경우, 상기 제1 방향(x 방향)의 양 끝단에서 서로 다른 스핀 성분을 갖는 전자들이 분포함을 알 수 있다.
- [0024] 반면에, 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본에 각 포함된 탄소 원자들이 평면으로 볼 경우 모든 위치에서 상호 중첩될 경우(이를, AA 스택킹으로 정의함) 그라운드 상태에서, 비자성 금속 또는 절연체로 기능한다. 또한, 상기 제1 및 제2 그래핀 나노 리본에 각 포함된 양 끝단의 탄소 원자들이 평면으로 볼 때, 서로 중첩되지 않고 서로 평행하게 배열되는 경우(이를, AA α 스택킹으로 정의됨) 이 또한, 그라운드 상태에서, 비자성 금속 또는 절연체로 기능한다.
- [0025] 또한, 상기 제1 및 제2 너비는 2.3nm 이상이다. 상기 제1 및 제2 너비의 크기에 대한 구체적인 설명은 도 5를

참고로 후술하기로 한다.

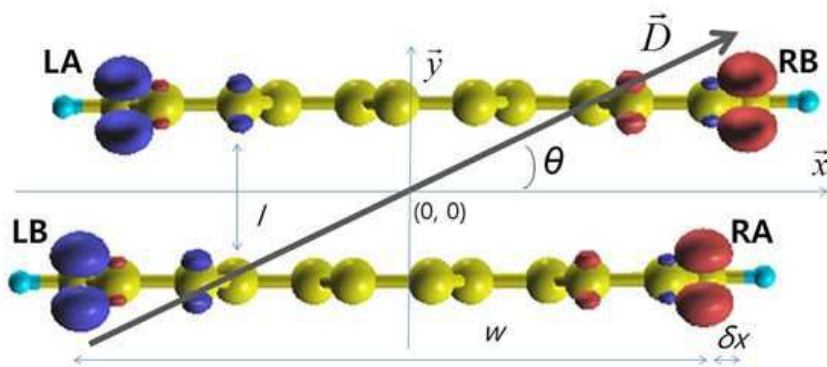
- [0026] 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물의 선택적 반금속화 특성을 나타내는 모식도이다.
- [0027] 도 3을 참조하면, 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물에 인가되는 전류 방향에 따라 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물 중 하부의 제1 그래핀 나노 리본 또는 상부의 제2 그래핀 나노 리본 중 어느 하나에 선택적으로 전류가 흐름을 확인할 수 있다. 이로써, 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물의 선택적 반금속성이 확인될 수 있다.
- [0028] 도 4는 본 발명의 일 실시예에 따른 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물에 대한 전기장의 크기 변화에 따른 전도 밀도 함수를 나타내는 그래프들이다.
- [0029] 도 4를 참조하면, 상태 a)의 경우, 외부에서 전기장이 인가되지 않은 상태의 상기 제1 방향의 양단에 위치한 탄소 원자의 상태 밀도(project density of state; PDOS)를 나타낸다. 이때, 적색 및 청색은 서로 반대되는 스핀 성분을 나타낸다.
- [0030] 상태 b), c) 및 d)에서는 각각 $0.15 \text{ V/\AA}$, $0.30 \text{ V/\AA}$, $0.60 \text{ V/\AA}$ 크기의 전기장이 인가됨에 따라 변화되는 PDOS를 나타낸다.
- [0031] 상태 b)의 경우, 적색 라인의 스핀 채널의 경우 밴드 갭이 감소하는 반면에, 청색 라인의 스핀 채널의 경우 밴드 갭이 증가함을 확인할 수 있다.
- [0032] 상태 c)의 경우, 하층의 제1 그래핀 나노 리본에 해당하는 적색 라인의 스핀 채널의 경우 밴드 갭 클로징(closing of band gap)이 발생하는 반면에, 상층의 제2 그래핀 나노 리본에 해당하는 적색 라인의 스핀 채널의 경우 밴드 갭 클로징(closing of band gap)이 발생하지 않는다. 즉, 상기 하층의 제1 그래핀 나노 리본만이 선택적으로 전류가 흐름을 알 수 있다.
- [0033] 상태 d)의 경우, 하층 및 상층의 제1 및 제2 그래핀 나노 리본에 해당하는 적색 라인의 스핀 채널 모두에 밴드 갭 클로징(closing of band gap)이 발생한다.
- [0034] 따라서, 상술한 바와 같이 특정 범위의 전기장에서 특정 층에서만 선택적으로 반금속성이 나타남을 확인할 수 있다.
- [0035] 도 5는 제1 너비의 크기 별 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물에 인가되는 전기장의 방향(각도, θ)에 따른 임계 전기장의 크기를 나타내는 그래프이다.
- [0036] 도 5는 전자띠함수(Band Structure)라는 방식을 통하여 알아낸 이중 그래핀 나노 리본으로 이루어진 반금속 구조물에 대한 반금속화 지점을 나타낸다.
- [0037] 여기서, 각도(θ)는 제1 방향($\vec{x}$) 및 전기장의 방향($\vec{D}$)이 이루는 각도에 해당한다(도 2 참조).
- [0038] 제1 너비 및 제2 너비(w)가 1.9 nm 까지는 필요한 최소 지점의 각도가 0° 가 아니며 제1 너비 및 제2 너비(w)가 2.3 nm 와 2.8 nm 에서는 필요한 전기장 세기의 최소점이 0° 에 있다.
- [0039] 단일층 그래핀 나노 리본의 경우 0° 에서 최소점을 가지며 이를 가지고 추정해보면 제1 너비 및 제2 너비(w)가 1.9 nm 까지는 전체가 반금속화하지만 2.3 nm 이상서 부터는 단층 그래핀 나노리본과 비슷한 성질을 가진다고 볼 수 있다.
- [0040] 도 4의 결과 및 도 5의 전자띠함수 방식의 결과를 모두 살펴본 결과, 제1 너비 및 제2 너비(w)가 2.3 nm 이상을 갖는 이중 그래핀 나노 나본의 경우, 단층 그래핀 나노리본과 비슷한 성질을 보이는 것 뿐만 아니라 층별로 선택적 반금속화가 일어남을 알 수 있다.
- [0041] 상기에서는 본 발명의 바람직한 실시예를 참조하여 설명하였지만, 당업계에서 통상의 지식을 가진 자라면 이하의 특허청구범위에 기재된 본 발명의 사상 및 영역을 벗어나지 않는 범위 내에서 본 발명을 다양하게 수정 및 변경시킬 수 있음을 이해할 수 있을 것이다.

도면

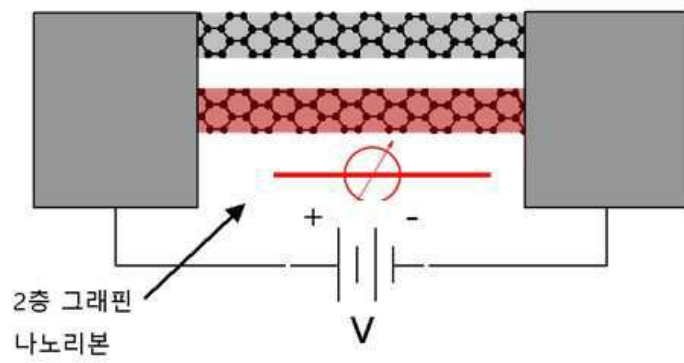
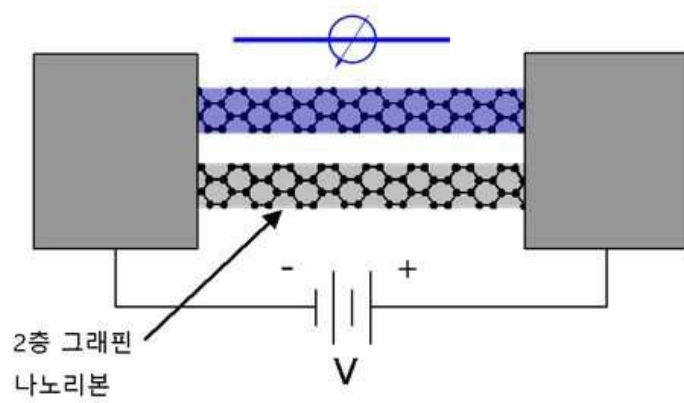
도면1



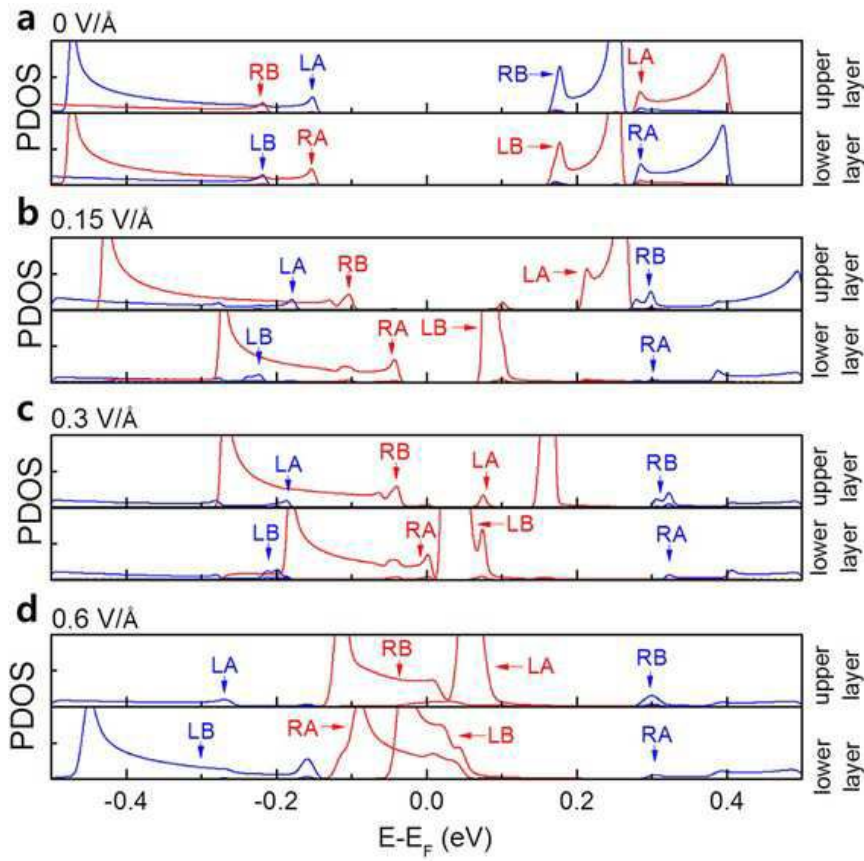
도면2



도면3



도면4



도면5

