

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 (43) 공개일자	10-2008-0076136 2008년08월20일
(51) Int. Cl. B82B 3/00 (2006.01)	(21) 출원번호 (22) 출원일자 심사청구일자	(71) 출원인 (72) 발명자	인하대학교 산학협력단 인천 남구 용현동 253 인하대학교 원태영 경기 화성시 장안면 수촌리 957-3 윤관선 인천 남구 용현1동 100-29 용담마을 다동204호 (뒷면에 계속)

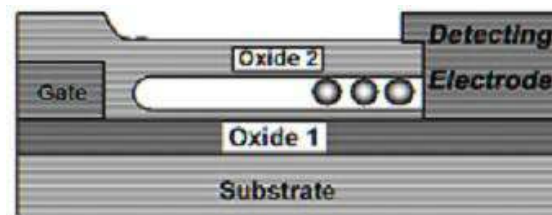
전체 청구항 수 : 총 2 항

(54) 원자스케일의 나노전자소자 구조 해석 방법

(57) 요약

본 발명은 탄소 나노튜브 내부로부터 엔도-플러렌 분자 배출과 전기 이동 현상을 이용한 나노전자소자구조 설계 기술에 관한 것이다. 엔도-플러렌 분자가 나노튜브로부터 빠져나오기 위해서는 에너지 장벽을 넘어설 수 있는 전기력이 작용 되어야 한다. 나노튜브 내부의 공간이 길수록 엔도-플러렌이 나노튜브 내부에서 가속이 잘 이루어져 쉽게 빠져나오게 되며, 나노튜브 내부에 엔도-플러렌 분자의 개수가 많을수록 엔도-플러렌 사이의 상관충돌로 엔도-플러렌 사이에 운동 에너지가 전달되어 나노튜브 끝 쪽에 있는 엔도-플러렌 분자가 빠져나오게 된다. 나아가 이를 이용하게 되면 여러 엔도-플러렌 분자들의 위치를 조절함으로써 나노전자소자로의 활용이 가능하다.

대표도 - 도5g



(72) 발명자

황호정

경기 안양시 동안구 관양동 현대아파트 4동 606호

이영하

서울 동작구 흑석동 221 중앙대학교 공과대학6층나
노전자신기술연구실

특허청구의 범위

청구항 1

원자단위 시뮬레이션을 통하여 나노튜브에서 일어나는 분자 전기 이동(Molecule Electromigration)을 모델링을 하는 데 있어,

탄소나노튜브 내부에서의 전기이동 현상 모델링 하는 단계; 및

전기이동 현상을 이용하여 나노전자소자구조 설계하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 모델링 방법.

청구항 2

제1항에 있어서, 탄소 나노튜브 내부에서의 플러렌 분자 이동 모델링 기술과 탄소 나노튜브 내에서의 플러렌의 이동에 따른 나노튜브와 기관 사이의 효과를 포함하는 모델링 방법.

명 세 서

발명의 상세한 설명

발명의 목적

발명이 속하는 기술 및 그 분야의 종래기술

- <13> 본 발명은 플러렌 왕복 메모리 소자를 연구하는 것으로서, 특히 세계 최초로 peapod 구조 나노튜브를 이용하는 것이다. 본 발명과 관련된 기초적인 구조 제안 및 몇몇 기초 연구가 진행되어왔지만, 아직 실험적으로 증명되고 실제 동작하는 소자로 구현된 것이 없다. 또한 실제 소자로 제작되기 위한 구조들에서의 양자구조적 특성에 관한 이론적인 연구 또한 전무 한 상태이다. 현재까지의 연구들에서는 몇몇 연구자들에 의하여 금속전극과 접합하는 구조에 대한 양자역학적 계산이 수행되었지만, 본 발명에서 제안하고 향후 나노 소자에서 예상되는 구조인 산화막 기관 위에 놓여 진 구조에 대하여 또는 산화막에 둘러싸인 구조에 대해서, 금속전극과 플러렌의 충돌에 따른 전자구조 변화 및 전자기동에 관한 양자역학적 연구는 전혀 수행된 적이 없다.

발명이 이루고자 하는 기술적 과제

- <14> 본 발명은 상기와 같은 문제점을 해결하기 위하여 제공된 것으로, 탄소나노튜브 내부에서의 전기이동 현상에 관한 내용으로서 내부에서의 플러렌 분자 이동과 플러렌의 이동에 따른 나노 튜브와 기관 사이의 효과를 모델링하고 이를 통해 엔도-플러렌 분자들의 위치를 조절하여 나노전자소자 설계 기술에 활용하기 위함이다. 즉, 탄소/질화붕소 나노튜브 내부에서 분자/이온 전기이동 현상 모델링, 탄소/질화붕소 나노튜브 표면에서 분자/이온 전기이동 현상 모델링, 전기 이동 현상을 이용한 나노전자소자구조 설계 기술 개발이라 할 수 있다.

발명의 구성 및 작용

- <15> 상기 목적을 달성하기 위해서 본 발명은 엔도-플러렌 분자가 나노튜브로부터 빠져나오기 위해서는 에너지 장벽을 넘어설 수 있는 전기력이 작용되어야 한다. 나노튜브 내부의 공간이 길수록 엔도-플러렌이 나노튜브 내부에서 가속이 잘 이루어져 쉽게 빠져나오는 것을 알 수 있었으며, 나노튜브 내부에 엔도-플러렌 분자의 개수가 많은 수록 엔도-플러렌 사이의 상관충돌로 엔도-플러렌 사이에 운동 에너지가 전달되어 나노튜브 끝 쪽에 있는 엔도-플러렌 분자가 빠져나오게 된다.
- <16> 이하에서는 도1 내지 도5g를 참조하여 본 발명에 따른 나노전자소자구조 설계 기술의 양호한 실시예를 상세히 설명한다.
- <17> 도1을 참조하면, 본 연구에서 사용된 (10, 10) 나노튜브 내부에 9개 C₆₀ 플러렌 분자가 삽입되어 있는 구조를 보여준다.
- <18> 도2를 참조하면, MD 시간에 따른 C₆₀ 플러렌 분자의 구조변화를 도식적으로 보여주고 있다.
- <19> 도3a를 참조하면, 외부전계 0.18 V/Å이 0.5 ps 이후 작용 되었을 때, C₆₀ 플러렌 분자의 위치 변화를 보여준다.

도3b는 외부 전계 $0.1 \text{ V/\AA}$ 이 0.5 ps 이후 작용 되었을 때 C_{60} 플러렌 분자의 위치변화를 보여준다.

- <20> 플러렌 서틀 메모리 소자인 경우, 탄소 나노튜브와 기관 사이에 발생하는 vdW(van der Waals) 반응이 탄소 나노튜브에 상당한 변형을 일으키는 것이 관찰되었다. 이러한 현상은 또한 이러한 소자의 동작 특성에 상당한 영향을 미치게 되므로 이에 대한 연구가 필요하였다.
- <21> vdW 반응이 증가함에 따라, 탄소 나노튜브는 압축이 되었고, 플러렌의 위치 또한 압축된 탄소 나노튜브 사이에 제한되는 현상이 발견되었다. 또한 플러렌의 이동은 압축된 탄소 나노튜브 사이에 막혀서, 외부에서 가해진 힘의 방향과는 반대로 움직이는 것도 발견되었다.
- <22> 도4에서는 이러한 현상으로 인해 이동거리에 따른 플러렌의 구조 변화를 나타내었다. 나아가 이러한 연구 내용들을 바탕으로 여러 엔도-플러렌 분자들의 위치를 조절하여 나노전자소자로 활용될 수 있는지를 살펴보았다. 도5와 같은 공정을 수행함으로써 엔도-플러렌 분자 위치제어 나노전자소자를 제작할 수 있을 것으로 사료된다.
- <23> 도5는 나노 peapod를 사용한 나노메모리의 모델 설계 방법을 표시한 그림이다. 도5a는 SiO_2 박막위에 게이트 전극 제작하였고 이때 나노 peapod는 SiO_2 박막 위에 증착된다. 도5b에서 기관위에 SiO_2 박막을 성장시키고 도5c는 나노 peapod의 일부분을 SiO_2 제거 공정을 통하여 제거한다. 도5d에서 노출된 나노 peapod 부분은 에칭 공정을 통하여 제거한다. 도5e에서 엔도-플러렌의 전기이동 및 전기방출 공정을 통하여, 일부 엔도-플러렌을 나노튜브로부터 빼낸다. 도5f에서 이후 SiO_2 박막 에칭된 부분에 전극을 증착한다. 도5g는 최종적인 나노 peapod 기반 엔도-플러렌 위치 제어 나노전자소자 구조를 보여준다. 본 발명에서 쓰인 시뮬레이션을 위한 초기 구조는 (10, 10) 나노튜브로써 길이는 $117 \text{ \AA}$ 이며, $7 \text{ \AA}$ 두께의 구리 전극은 나노튜브 양쪽에 삽입되어있는 모습이다.
- <24> 전술한 내용은 후술할 발명의 특허 청구 범위를 더욱 잘 이해할 수 있도록 본 발명의 특징과 기술적 장점을 다소 폭넓게 개설했다. 본 발명의 특허 청구 범위를 구성하는 부가적인 특징과 장점들은 이하에서 상술 될 것이다. 개시된 본 발명의 개념과 특정 실시예는 본 발명과 유사 목적을 수행하기 위한 다른 구조의 설계나 수정의 기본으로 즉시 사용될 수 있음이 당해 기술 분야의 숙련된 사람들에 의해 인식되어야 한다.
- <25> 또한, 본 발명에서 개시된 발명 개념과 실시예가 본 발명의 동일 목적을 수행하기 위하여 다른 구조로 수정하거나 설계하기 위한 기초로서 당해 기술 분야의 숙련된 사람들에 의해 사용될 수 있을 것이다. 또한, 당해 기술 분야의 숙련된 사람에 의한 그와 같은 수정 또는 변경된 등가 구조는 특허 청구 범위에서 기술한 발명의 사상이나 범위를 벗어나지 않는 한도 내에서 다양한 변화, 치환 및 변경이 가능하다.

발명의 효과

- <26> 이상에서 설명한 바와 같이, 본 발명에 따른 peapod 구조 나노튜브를 이용하여 플러렌 왕복 메모리 소자를 연구하는 것으로, 소자의 다양한 특성들과 관련된 학술적 가치의 중요성 및 나노과학기술의 한 단계 진보를 이루는 계시가 될 것으로 사료된다. 또한 본 발명을 통하여 얻어진 결과를 더욱 발전시켜 실생활에 이용될 수 있는 나노전자소자로 개발되어 산업적, 경제적 가치를 창출할 수 있는 중요한 발명이라 사료된다.

도면의 간단한 설명

- <1> 도1은 본 발명에 따라 (10, 10) 나노튜브 내부에 9개 C_{60} 플러렌 분자가 삽입되어 있는 구조를 나타내는 도면.
- <2> 도2는 본 발명에 따라 MD 시간에 따른 C_{60} 플러렌 분자의 구조변화를 나타내는 도면.
- <3> 도3a는 본 발명에 따라 외부 전계 $0.18 \text{ V/\AA}$ 이 0.5 ps 이후 작용 되었을 때, C_{60} 플러렌 분자 위치 변화를 나타내는 도면.
- <4> 도3b는 본 발명에 따라 외부 전계 $0.1 \text{ V/\AA}$ 이 0.5 ps 이후 작용 되었을 때 C_{60} 플러렌 분자의 위치변화를 보여주는 도면.
- <5> 도4는 본 발명에 따라 C_{60} 플러렌의 이동 거리에 따른 구조 변화를 나타내는 도면.
- <6> 도5a는 본 발명에 따라 나노 peapod를 사용한 나노메모리의 모델 설계시 SiO_2 박막 위에 게이트 전극 제작과 이

때 나노 peapod가 SiO_2 박막 위에 증착된 모습을 보여주는 도면.

<7> 도5b는 본 발명에 따라 기판 위에 SiO_2 박막이 성장된 모습을 나타내는 도면,

<8> 도5c는 본 발명에 따라 나노 peapod의 일부분이 SiO_2 제거 공정을 통하여 제거되고 있는 모습을 보여주는 도면.

<9> 도5d는 본 발명에 따라 노출된 나노 peapod 부분이 에칭 공정을 통하여 제거되는 모습을 나타내는 도면.

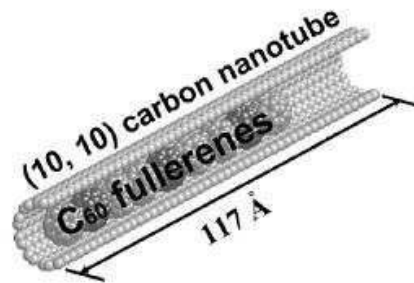
<10> 도5e 본 발명에 따라 엔도-풀러렌의 전기이동 및 전기방출 공정을 통하여, 일부 엔도-풀러렌을 나노튜브로부터 빼내는 과정을 보여주는 도면.

<11> 도5f는 본 발명에 따라 SiO_2 박막이 에칭된 부분에 전극을 증착하는 모습을 보여주는 도면.

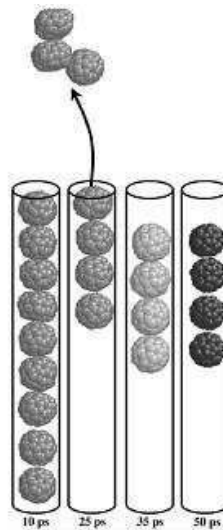
<12> 도5g는 본 발명에 따라 최종적인 나노 peapod 기반 엔도-풀러렌 위치 제어 나노전자소자 구조를 나타낸 도면.

도면

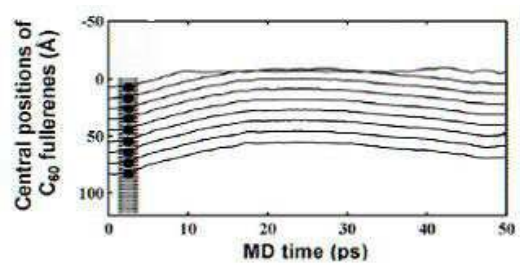
도면1



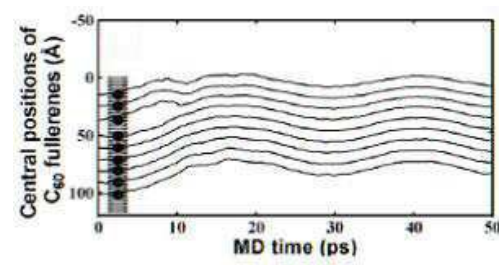
도면2



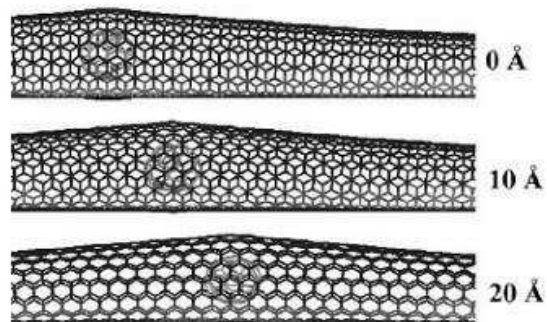
도면3a



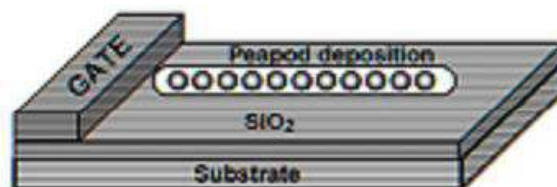
도면3b



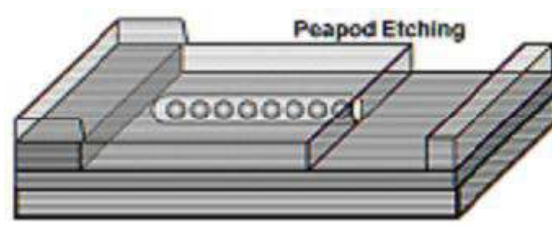
도면4



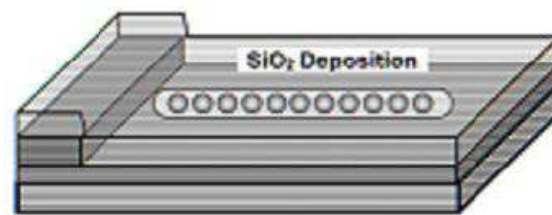
도면5a



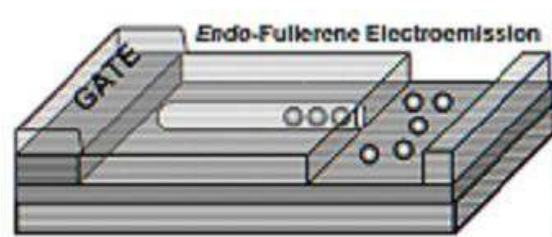
도면5b



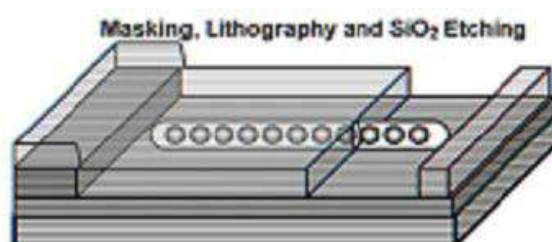
도면5c



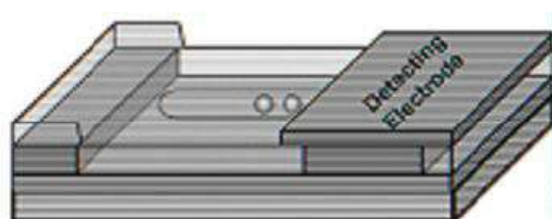
도면5d



도면5e



도면5f



도면5g

