【S-05】

니켈 표면 및 (110) 면과 (100) 면이 만나는 부분에서 탄소의 퍼짐에 대한 이론적 연구

신영한, 홍석륜*
성균관대학교 CNNC, *세종대학교 물리학과

탄소나노튜브의 성장에 많이 사용되고 있는 화학증기증착 방법에서 니켈 촉매 입자의 크기가 튜브의 직경과 비슷하다는 사실과 탄소나노튜브의 활성화에너지가 니켈 내에서 탄소의 확산에너지와 비슷하다는 사실은, 탄소나노튜브의 성장메커니즘의 이해를 위해 니켈 촉매 입자에서의 탄소의 흡착 및 퍼짐 연구가 중요하다는 것을 말해준다. 니켈 결정을 이루는 표면 및 면과 면이 만나는 부분에서 탄소 원자의 흡착과 퍼짐에 대한 연구를 통하여 탄소나노튜브 성장메커니즘을 설명해보고자 한다.

제일원리적 유사퍼텐셜(*ab initio pseudopotential*) 계산을 이용하여 니켈의 (100), (110), (111) 표면 부근에서 탄소 원자의 흡착과 퍼짐을 살펴본 결과, (110) 표면 위에서는 탄소 원자의 이동이 활발히 일어날 수 있고, (100)에서는 표면 퍼짐이 일어나기 힘든 반면 표면 밑으로의 퍼짐은 다른 표면들에 비하여 상대적으로 일어나기 쉽다는 것을 알았다. (110) 면에서 퍼짐 장벽이 낮은 쪽으로 퍼지는 탄소 원자는 (100) 면과 만나게 되는데, 이 때 (110) 면과 (100) 면이 만나는 부분은 표면 위와 밑에서 탄소 원자가 퍼짐을 통해 모이는 영역임을 계산을 통해 알 수 있었다. 이로부터 니켈 입자의 끝머리(edge) 영역이 탄소나노튜브가 성장하는데 필요한 탄소를 공급하는 역할을 한다고 생각할 수 있다.