

## GaN 나노선의 구조와 열적 특성에 관한 원자단위 연구

문원하, 최창환

삼성전기 중앙연구소

육각 형태를 갖는 GaN 나노선의 구조적 안정성과 열적 특성이 분자 동역학 해석을 통하여 연구되었다. 우선 [0001] 성장 방향의 나노선 중 (10-10)과 (11-20)의 측면을 갖는 GaN 나노선의 최적화된 구조를 계산하였다. (10-10) 측면을 갖는 GaN 나노선 구조가 (11-20) 측면을 갖는 구조보다 안정함을 알 수 있었다. 이 결과는 벌크 GaN의 각각의 면에 대한 표면 에너지 계산 결과와도 잘 일치한다.

그리고 (10-10) 측면을 갖는 각기 다른 직경의 GaN 나노선의 온도에 따른 구조 변화도 계산하였다. 온도에 따른 구조적 변화를 통해 GaN 나노선의 녹는점이 벌크 GaN보다 낮음을 알 수 있었다. 또한 직경이 줄어들수록 GaN 나노선의 녹는 점은 점차 감소하였다. 이는 직경이 감소함에 따라 나노선의 표면에너지가 증가함에 기인한다. 일반적으로 나노구조는 벌크 구조와 열적 특성이 다르게 나타난다. 이는 나노구조의 불안정한 표면으로 인해 녹는점이 감소함을 알 수 있다. 이러한 GaN 나노선의 녹는점에 대한 직경의 효과는 다른 나노 구조에서도 잘 나타난다.