

실리콘 나노튜브 구조의 원자단위 시뮬레이션

이준하[†] · 이흥주*

[†]*상명대학교 컴퓨터시스템공학 정보디스플레이연구소

Atomistic Simulation of Silicon Nanotube Structure

Jun Ha Lee[†] and Hoong Joo Lee*

[†]*Sangmyung Univerisity, Computer Systems Engineering, Information Display Center

ABSTRACT

The responses of hypothetical silicon nanotubes under torsion have been investigated using an atomistic simulation based on the Tersoff potential. A torque, proportional to the deformation within Hooke's law, resulted in the ribbon-like flattened shapes and eventually led to a breaking of hypothetical silicon nanotubes. Each shape change of hypothetical silicon nanotubes corresponded to an abrupt energy change and a singularity in the strain energy curve as a function of the external tangential force, torque, or twisted angle. The dynamics of silicon nanotubes under torsion can be modelled in the continuum elasticity theory.

Key Words : Nanotube, Atomistic, Simulation, Torsion, Dynamics

1. 서 론

탄소 나노튜브(Carbon Nanotube, CNT)는 뛰어난 특성과 잠재력 때문에 지난 10여년 간 여러 연구 분야에서 가장 관심을 많이 가지는 물질이 되었다[1, 2]. 최근에는 다른 화학적 조성을 가지는 나노튜브의 합성이 많은 연구자들에 의해 보고되어왔다. 나노 기술분야에서, 최근에 초미세 실리콘 나노와이어가 나노 전자 소자 제작의 중요한 요소로 나노 과학 기술에서 점점 흥미를 자극하고 있는데, 이는 실리콘에 기초를 둔 물질의 기술적인 중요성과, 안정된 나노 구조의 실리콘의 새로운 형태가 현재의 실리콘 기반 기술과의 연관성 때문이다. 예를 들어 CNT와 실리콘 나노와이어 이중 접합(hetero junction)이 실현될 수 있었으며[3] 초미세 실리콘 나노와이어에 관한 많은 이론적인 연구가 원자단위 시뮬레이션을 이용하여 행해져 왔다. SiC 나노튜브가 기상 SiO와 CNT 사이에서의 기체-고체(gas-solid) 반응에 기초를 둔 형상 메모리 합성법에 의해 합성되었다[4]. 최근에는 두꺼운 벽을 가진 실리콘 나노

튜브가 화학 기상 증착[5] 및 Molecular Beam Epitaxy(MBE) 와 다공성(porous) Al₂O₃ 기판을 사용하여 합성되어졌다. 제조된 SiNT의 구조적 특성은 CNT의 그것과 다르다. SiNT의 벽 두께는 수 나노미터 이상이 있으며, 벽은 결정 및 비결정 구조이었다.

본 논문에서는 개선된 경험적 전위식을 제시하고 molecular dynamics를 이용한 원자수준의 시뮬레이션을 이용하여 탄소나노튜브의 특성을 분석코자 한다. 특별히 탄소나노튜브가 특정한 외부 힘에 의해 비틀려진 형태로 존재하게 될 경우의 전기적 및 기계적 특성을 분석하여 이의 응용처등을 분석한다.

2. 본 론

2.1. 경험적 전위식

경험적 전위식은 다이아몬드 구조의 탄성(elastic) 상수와 결공(vacancy) 형성 에너지(formation energy) 뿐만 아니라 실리콘 격자의 결합 에너지(binding energy)와 격자 상수에 맞추어져 있다. 이 전위식은 Robertson 등[6]이 CNT의 에너지와 탄성 성질의 연구에 사용하였으며, Hamada 등[7]은 튜브 구조 생성 및 부가적으

[†]E-mail : junha@smu.ac.kr

로 tight-binding 전자 구조 계산에 사용하였다. 최대 경사법(Steepest Descent)방법에 의한 가상의 zigzag (10, 0) SiNT의 최적화된 구조인 경우, 최적화된 지름은 12.0 Å이다. 이것은 Tersoff 전위식에 기반을 둔 것으로 DFT에 의한 결과인 12.41 Å과 잘 일치한다. Tersoff 전위식을 적용한 경우, 최적의 Si-Si 결합 길이와 원자당 에너지는 각각 2.305 Å, -3.899 eV/atom으로 알려져 있다. DFT 결과에 따르면, Si-Si 결합 길이와 원자당 에너지는 각각 2.245 Å과 -3.83 eV/atom이다. 다이아몬드 구조에 대한 Tersoff 전위식으로 부터 얻어진 원자당 에너지의 값은 흑연판 구조의 값보다 0.731 eV/atom 만큼 크다. 다이아몬드 구조에서 Si 벌크에 대한 원자당 응집 에너지가 -4.63 eV/atom 임을 고려하면, 여기서 논의된 나노튜브에 대한 원자당 응집 에너지는 Si 벌크의 84.21%에 해당하며, 이는 DFT 결과에서 얻어진 82%와 유사한 수치이다.

2.2. 시뮬레이션 절차 및 방법

비틀림 하에서의 본 시뮬레이션은 다음과 같은 순서로 이루어졌다. (1) SiNT의 이완된(relaxed) 구조는 압력이 0인 상태에서 SD 시뮬레이션에서 구해졌다. (2) 외부의 비틀림 힘은 약간씩 증가한다. (3) 최적 구조는 회전력 하에서 SD 시뮬레이션으로부터 구해진다. SiNT가 파괴될 때까지 (2)와 (3) 과정을 반복한다. 본 시뮬레이션에서, 튜브 양쪽 끝에 위치한 원자들의 반경은 고정되어있도록 하고, 그 원자들은 회전력(torque) 하에서 이완된 위치까지 회전한다. 튜브 양쪽 끝에 위치한 원자에 가해진 힘들은 접선(tangential) 방향이다. 판 구조에서 원통 구조로의 전이에 필요한 구부림 변형(bending strain) 에너지는 고전적인 탄성 이론을 따른다. 이는 변형 에너지가 튜브 지름의 제곱에 반비례함을 말한다. SiNT의 판-원통 전이의 구부림 변형 에너지는 탄소, BN, BC3 등[8]에서와 같은 나노튜브와 같이 이러한 연속체 탄성 이론을 따른다. 우리는 본 논문에서 토오크와 원자당 회전력의 함수인 뒤틀린 각도와 변형 에너지와 같은 역학적 및 구조적 특성을 보여 주었다.

2.3. 시뮬레이션 결과 및 고찰

Fig. 1은 (5, 5) SiNT에 대해 유도된 인장력과 원자당 응집 에너지의 변동을 보여주었는데, 이는 원자당 회전력의 함수이다. 임계점 A 이하 탄성 영역에서는 SiNT의 구조는 일정하게 유지되고, SiNT의 변형에 의한 인장력(tension)은 없다. A점 이후에는, 원자당 응집 에너지와 인장력 모두가 B점까지 급격히 증가한다. 임

계점을 지난 다음에는, 원통형 SiNT는 점진적으로, 나선형의 축을 따라서 리본 모양의 평평한 모양(ribbon-like flattened shape)으로 변환되는데, 이것은 비틀림 상태에 있는 CNT에 대한 MD 시뮬레이션에서 얻어진 결과와 유사하다[9].

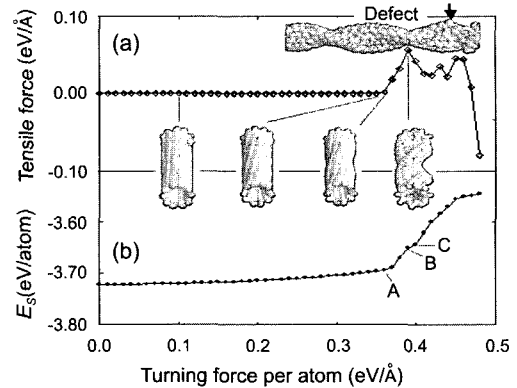


Fig. 1. 인장력과 원자당 응집 에너지의 변동

Fig. 2는 임계점에서, 원자당 회전력과 토오크가 원자당 응집 에너지의 함수임을 보여준다. SiNT의 원자당 임계 회전력은 거의 선형적으로 SiNT의 원자당 응집 에너지에 비례하는 반면에, SiNT의 원자당 응집 에너지가 감소함에 따라, SiNT의 임계 토오크는 증가한다. 에너지 측면에서 볼 때, SiNT의 원자당 응집 에너지가 감소함에 따라, SiNT의 안정성은 증가한다. 그림 3(a)와 3(b)는 (5, 5) SiNT에 대한 비틀림 각도의 함수인 원자당 변형 에너지와 그것의 미분치를 각각 보여 준다. 임계점 이하에서, 원자당 변형 에너지는 비틀림 각도의 이차 함수로 표현된다.

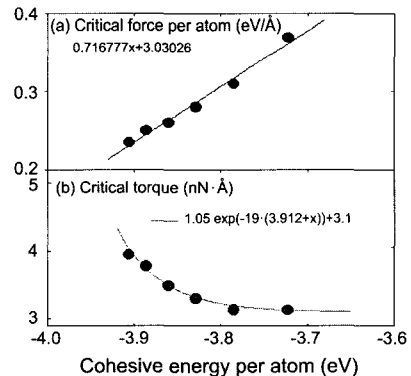


Fig. 2. 임계점에서 원자당 응집 에너지에 따른 (a) 원자당 회전력과 (b) 토오크

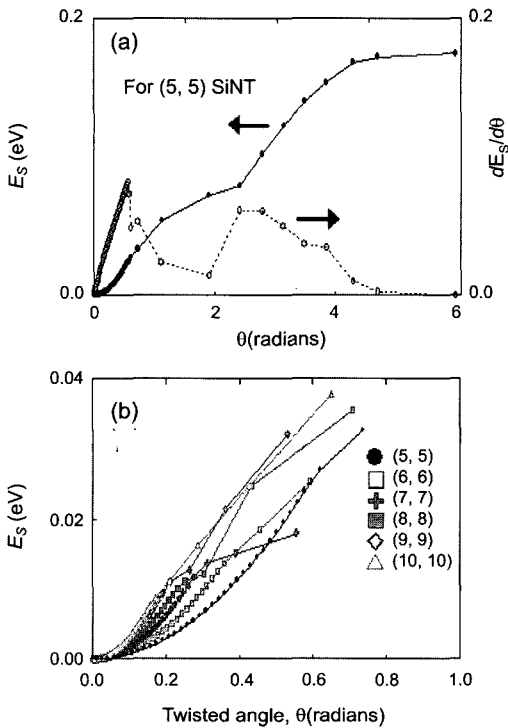


Fig. 3. (a) 비틀림 각도에 따른 원자당 변형 에너지와 1차 미분값의 변동 (b) 비틀림 각도에 따른 원자당 변형 에너지 변동

3. 결 론

본 논문에서는 원자단위 시뮬레이션을 이용한 비틀림 하에서 가상의 실리콘 나노튜브의 응답에 대해 논의하였다. 가상적 실리콘 나노튜브 각각의 형상 변화는 변형 에너지 곡선에서 급격한 에너지 변화와 특이점 등에 해당한다. 이것은 외부 점선 힘, 토크 혹은 비틀림 각도의 함수이다. 응집 에너지 혹은 인장력 곡선으로부터, 비틀림 하에서 탄성 영역, 임계점, 리본 모양 영역과 실리콘 나노튜브의 항복 등을 정의할 수 있었다. 변형 에너지 곡선은 임계 점 이하에서 원자당 회전

력의 함수인 독특한 형태로 표현될 수 있었다. 실리콘 나노튜브의 지름이 증가할수록, 임계 토크는 증가하였다. 실리콘 나노튜브의 원자당 임계 회전력은 거의 실리콘 나노튜브의 원자당 응집 에너지에 선형적으로 비례하고, 실리콘 나노튜브의 원자당 응집 에너지가 감소함에 따라 실리콘 나노튜브의 임계 토크가 증가한다. 그러므로, 무한대의 반지름을 가진 실리콘 나노튜브의 임계 토크는 유한한 값에 접근한다. 변형 에너지 곡선은 비틀림 각도의 이차 방정식 형태이고, 실리콘 나노튜브의 비틀림 각도는, 임계 점 이하에서는 토크에 선형으로 비례하고, 그 이하에서는 급격히 증가한다. 비틀림 하에서 SiNT의 동력학이 CNT 경우에서와 같이 연속체 모델에서 이해되어질 수 있었다. 이로 부터 탄소나노튜브를 기존의 메모리의 역할을 하는 단전자 소자, 에너지 변환을 가져오는 디스플레이 및 태양전지등에 응용하는 것이 가능할 것으로 판단 된다.

참고문헌

- Shenderova, O. A. Zhirnov, V. V. and Brenner, D. W., *Crit. Rev. Solid State Mater. Sci.*, 27, 227 (2002).
- Qian, D. Wagner, G. J. Liu, W. K. Yu, M. F. and Ruoff, R. S., *Appl. Mech. Rev.* 55, 495 (2002).
- Hu, J. Quyang, M. Yang, P. and Lieber, C. M., *Nature (London)* 399, 48 (1999).
- Pham-Huu, C. Keller, N. Ehret, G. and Ledoux, M. J., *J. Catalysis* 200, 400 (2001).
- Sha, J. Niu, J. Ma, X. Xu, J. Zhang, X. Yang, Q. and Yang, D., *Adv. Mater.* 14, 1219 (2002).
- Robertson, D. H. Brenner, D. W. and Mintmire, J. W., *Phys. Rev. B* 45, 12 592 (1992).
- Hamada, N. Sawada, S. and Oshiyama, A., *Phys. Rev. Lett.* 68, 1579 (1992).
- Hernandez, E. Goze, C. Bernier, P. and Rubio, A. *Phys. Rev. Lett.* 80, 4502 (1998).
- Yakobson, B. I. Brabec, C. J. and Bernholc, J., *J. Comp.-Aided Mater. Design* 3, 173 (1996).