Journal of the Korean Vacuum Society
Vol.11, No.1, 2002, pp.59～67

구리 나노와이어의 구조적 특성에 관한 연구

강정원† · 권오근* · 황호정

중앙대학교 전자공학과
*세명대학교 인터넷정보학부
(논문접수일 : 2002년 2월 20일)

A study on structural properties of copper nanowires

Jeong Won Kang†, Oh Kuen Kwon*, and Ho Jung Hwang

Department of Electronic Engineering, Chung-Ang University
**School of Internet Information, Semyung University*
(Received February 20, 2002)

요 약

본 연구에서는 분자동력학 시뮬레이션을 이용하여 구리 나노와이어의 구조적 특성에 관하여 연구하였다. 매우 가는 구리 나노와이어의 구조는 면심입방격자 구조와는 다른 원통형 다중 껍질 구조를 가지며 상온에서 안정한 구조를 유지하였다. 원통형 다중껍질 나노기둥 및 나노와이어 확장 변형에 따른 장력의 변화에 관한 연구에서 오각형 NLC(needle-like crystal) 구조가 관찰되었다. 오각형 NLC 나노와이어 구조의 특성은 기본구성단위가 면심입방격자 구조이므로 안정된 구조라는 것을 연구하였다.

Abstract

The structures and properties of Cu nanowires have been investigated using molecular dynamics simulations. Cylindrical multi-shell Cu nanowires maintain their structures at room temperature and their structural properties are different from the structural properties of nanowires with face-centered-cubic structure. The results from nanopillar and tensile testing of cylindrical multi-shell Cu nanowire showed structures rerlated to pentagonal needle-like crystal structures. Since the subunits of pentagonal nanowire with needle-like crystal are face-centered-cubic structure, pentagonal multi-shell nanowires are stable one-dimensional structures in nanostructured materials.

1. 서 론

나노 소자 개발에 관한 연구들이 활발하게 이루어짐에 따라 일차원적인 나노구조의 물리적 특성에 관한 연구들이 지난 10여년 동안 방대하게 연구되어져 왔다 [1-34]. 많은 연구들이 탄소 나노 튜브에 집중되어져 왔으나 최근 금속 나노와이어에 관한 많은 연구들이 수행되어 수 나노미터 직경을 가지는 나노와이어들이 제작되었다 [5-10]. 특별히 금 나노와이어에 관한 연구에서는 나선형 다중껍질(Helical multi-shell) 구조가 관찰되었으며 [5-8], 이에 관한 이론적인 연구들도 더불어 수행되어왔다 [11-16]. 다중 껍질 나노와이어들은 WS_2, MoS_2, $NiCl_2$와 같은 무기물에서도 발견되었다 [17-19]. MD(molecular dynamics) 시뮬레이션을 사용하여 납 및 알루미늄 나노와이어 [20, 21, 22], 백금 및 은 나노와이어 [23], 티타늄 나노와이어 [24], 구리 나노와이어 [25], 실리콘 나노와이어 [26]들 이 연구되어져 왔다. 알루

† E-mail : kok@semilab3.ee.cau.ac.kr

미늄 전극들과 연결된 실리콘 나노와이어의 특성이 연구되었다 [27]. 이러한 연구들을 통하여 금속성의 나노와이어들은 원통형 다중껍질(Cylindrical multi-shell, CMS)을 가지는 경우들이 자주 발견되어왔다.

그러나 금속성 나노와이어의 구조적 특성들에 관한 정보는 아직 부족한 상태이다. 원통형 다중껍질 구조에 관하여서도 역학적 특성 및 구조적 변화에 관한 연구는 수행되어지지 않았다. 그러므로 본 논문에서는 나노와이어 구조에 관한 연구를 MD 시뮬레이션을 사용하여 수행하였다. 원통형 다중껍질 구리 나노와이어를 사용하여 면심입방격자와는 다른 구조적 특성을 살펴보고 역학적 변형에 따른 장력 변화의 특성을 연구하고, 특별히 원통형 다중껍질구조 뿐만 아니라 오각형 다중껍질 구조에 관한 결과를 보여줄 것이다.

2. 연구 방법

본 연구에서 구리 원자간 상호작용은 나노덩어리(nanocluster) [28-32] 및 나노와이어 [24,25,33,34]에 관한 이전 연구들에서 많이 사용되어진 SMA-TB(the second moment approximation of the tight binding) 방법 [35]을 사용하여 계산되었다. 이 전위식은 다른 원자간 전위식 및 실험값들과 잘 일치한다 [25,34].

본 연구에 사용된 MD 방법은 저자들의 이전 연구들에서 사용된 방법과 동일하다 [25,33,34]. 원자들의 위치 및 속도 계산은 velocity Verlet 알고리즘을 사용하였고, 일정 온도 유지를 위하여서는 Gunsteren-Berendsen thermostate 방법을 사용하였으며, 계산속도 향상을 위해 근접원자목록(neighbor list) 방법이 사용되었다 [36]. 무한히 긴 나노와이어 조건에 관한 시뮬레이션에서는 주기적인 경계조건(periodic boundary condition)이 적용되었다.

원통형 다중껍질 나노와이어 하나의 껍질은 삼각형 네트워크을 원통으로 마는 방법으로 만들어질 수 있으므로 [25] 본 연구에서 사용되어지는 원통형 나노와이어들은 이러한 방법으로 초기 구조를 만들었다. 초기 구조들은 SD(steepest descent) 방법으로 이완된 원자구조를 얻고 이를 사용하여 다양한 특성들에 관하여 시뮬레이션 되었다.

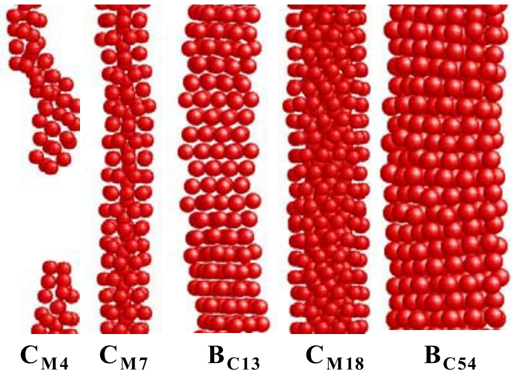
3. 결과 및 토의

3.1 주기적인 경계조건이 적용된 나노와이어의 특성

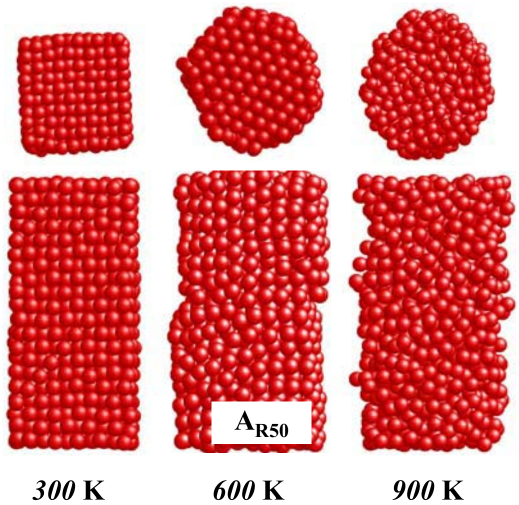
시뮬레이션된 나노와이어 구조들은 표 1에 나타나 있다. 연구된 나노와이어들은 면심입방격자 구조와 원통형 다중껍질 구조들이다. 표 1에서 원통형 다중껍질 구조는 CMS로 표시되었다. CMS 구조 나노와이어들의 각 껍질은 {111} 면 구조를 가지며 {111} 면 원자층을 원형으로 말아서 만들 수 있다 [25]. {111} 면 구조를 가지는 하나의 원자층은 안정된 구조가 아니기 때문에, 탄소나노튜브 경우의 흑연구조의 하나의 원자층을 말아서 경계조건을 사용하는 것과는 차이가 있다. 그러나 CMS 구조 나노와이어의 각 껍질을 펼치면 {111} 면 원자층 구조를 가진다 [25]. CMS 구조 나노와이어들은 서로 다른 반경을 가지며, 이전 연구 [25] 에서 발견된 구조를 선택하였다. 면심입방격자구조를 가지는 나노와이어들은 원자층당 서로 다른 원자수를 가지는 경우들과 나노와이어의 단면이 사각형인 경우와 원형에 가까운 구조를 가지는 경우를 선택하였다. 표 1의 구리 나노와이어들에 대하여 온도에 따른 MD 시뮬레이션을 수행하였다. 그림 1(a)는 300 K에서 몇 가지 나노와이어의 구조를 보여주고 있다. 300 K에서 C_{M4} 경우 구리 나노와이어는 끊어졌으나 다른 나노와이어들은

표 1. 시뮬레이션된 나노와이어 구조.

	Structure	Atoms/ layer	Cross-section shape
A_{R18}	{100}	18	Rectangle
A_{R50}	{100}	50	Rectangle
A_{R169}	{100}	169	Rectangle
A_{C18}	{100}	18	Quasi-circle
A_{C49}	{100}	49	Quasi-circle
B_{C13}	{111}	13	Quasi-circle
B_{C54}	{111}	54	Quasi-circle
C_{M4}	CMS-type 4	4	Circle
C_{M6}	CMS-type 5-1	6	Circle
C_{M7}	CMS-type 6-1	7	Circle
C_{M18}	CMS-type 11-6-1	18	Circle
C_{M34}	CMS-type 16-11-6-1	34	Circle



(a) 300 K에서 구조



(b) AR50 경우 온도에 따른 구조

그림 1.

끊어지지 않았고, 나머지 나노와이어는 초기 구조를 유지하였다. 단지 {111} 구조의 B_{C13}의 경우는 전단응력으로 인하여 결정 방향을 따라서 약간씩 변형된 구조들로 연결되어 있다. 그림 1(b)의 경우는 온도에 따른 A_{R50} 나노와이어의 구조 변화를 보여주고 있다. 300 K에서는 {100} 구조를 유지하고 있으나 600 K에서는 단면 구조가 {111} 구조로 변화된 것을 볼 수 있다. 또한 단면이 300 K에서는 사각형이었으나 600 K에서는 육각형으로, 900 K에서는 원형으로 변화되었다. 온도가 상승됨에 따라서 표면 응력을 최소로 하는 방향으로 구조적 변화가 이루어지는 것을 알 수 있다. 표 2는 각 온도에서 표 1의 나노와이어들의 끊어지는 경향을 보여주고 있다.

표 2. 시뮬레이션된 나노와이어의 끝어짐. X는 끊어진 경우를 나타내며 O는 끊어지지 않은 경우를 나타낸다.

	300 K	600 K	900 K
A_{R18}	O	O	X
A_{R50}	O	O	O
A_{C18}	O	O	X
A_{C49}	O	O	O
B_{C13}	O	X	-
B_{C54}	O	O	O
C_{M4}	X	-	-
C_{M6}	O	X	-
C_{M7}	O	X	-
C_{M18}	O	O	X
C_{M34}	O	O	X

직경이 작을수록 낮은 온도에서 나노와이어가 끊어지는 것을 알 수 있다. 그러나 그림 1(b)에서와 같이 온도에 따른 구조적 변형이 일어나지만 상온에서는 나노와이어들이 잘 정의된 구조들을 가질 수 있다는 것을 알 수 있다.

상온에서 구조적 특성을 살펴보기 위하여 각 나노와이어의 RDF(radial distribution function)과 ACF (angular correlation function)을 비교하였다.

그림 2는 표 1의 나노와이어들의 RDF를 보여준다. 그림 2에서 C_{M34} 경우 그림에 포함된 점선은 300 K에서 벌크의 RDF를 보여준다. 구리 나노와이어의 초기 구조가 면심입방격자 구조인 경우 300 K에서 나노와이어들의 RDF는 벌크의 RDF와 거의 유사한 것을 알 수 있다. 그러나 원통형 다중껍질 나노와이어의 경우는 벌크 RDF의 두 번째 피크에서 차이를 보인다. 벌크 RDF의 두 번째 피크는 면심입방격자의 격자상수이므로, 원통형 다중 껍질 나노와이어의 구조가 면심입방격자 구조와 크게 다르다는 것과 일치한다. 원통형 다중 껍질 나노와이어 RDF의 두 번째 피트는 벌크 RDF의 두 번째 피크와 세 번째 피크 사이에서 나타난다. 그림 3은 표 1의 나노와이어의 ACF를 보여준다. C_{M34}경우 그림에 포함된 점선은 300 K 벌크의 ACF를 보여준다. 초기 구조가 면심입방격자 구조인 나노와이어들은 벌크와 유사한 ACF를 보여주지만, 원통형 다중껍질

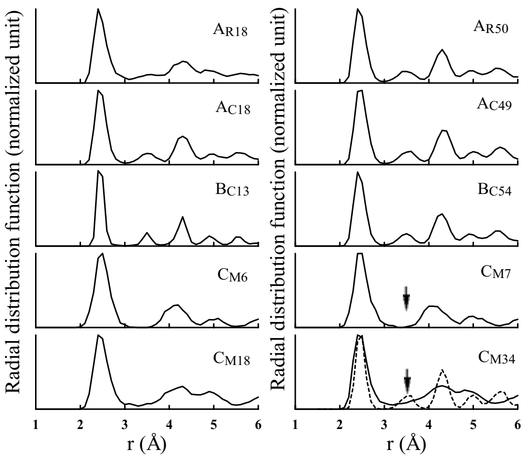


그림 2. 300 K에서 표 1의 나노와이어의 RDF.

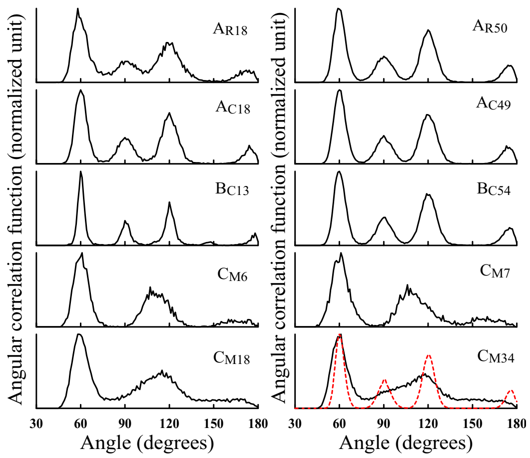


그림 3. 300 K에서 표 1의 나노와이어의 ACF.

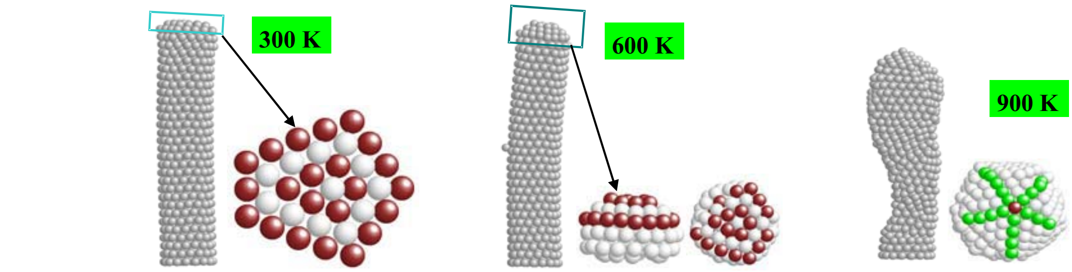
나노와이어 경우의 ACF들은 60°피크를 제외하고는 서로 다르다. 면심입방격자의 경우 4개의 피크가 나타나지만, 원통형 다중껍질 나노와이어 경우는 두 개의 피크가 나타난다. 원통형 다중껍질 나노와이어의 반경이 커질수록 두 번째 피크가 120°피크에 접근하는 것을 볼 수 있으며 첫 번째 피크와 두 번째 피크사이의 각도 분포가 점점 증가하는 것을 볼 수 있다.

이와 같이 새로운 구조적 특성을 보이는 원통형의 다중껍질 나노와이어는 나노영역에서 합성될 수 있고, 상온에서도 안정적인 구조를 가지는 것을 살펴보았다. 이것은 다른 면심입방격자 원소인 알루미늄 [20,21], 금 [11] 등이 원통형 다중껍질을 가지는 것과 잘 일치하는 결과이다.

3.2 한쪽 끝이 고정된 다중껍질 나노기둥

주기적인 경계조건이 적용된 경우인 거의 무한히 긴 원통형 다중껍질 나노와이어와는 달리 원통형 다중껍질 나노기둥의 한쪽 끝의 구조는 어떠한 구조를 가지는지를 살펴보았다. 그림 4(a)와 같은 16-11-6-1 구리 나노와이어를 사용하였으며, 한쪽 끝 원자층은 MD 시뮬레이션동안 고정되었으며, 이러한 조건은 나노기둥으로 여겨질 수 있다. 그림 4(b, c, d)는 온도 300 K, 600 K, 900 K에서 100 ps 동안 MD 시뮬레이션한 결과이다. 300 K와 600 K에서 나노기둥은 초기 구조적 특성을 유지하고 있으나 600 K에서는 표면에 점결함이 나타난 것을 볼 수 있다. 900 K인 경우는 원통형 나노기둥이 거의 녹아 흘러내리는 상태가 되었다. 원통형 다중껍질 나노기둥의 끝부분의 구조는 300 K, 600 K, 900 K에서 모두 오각형 구조를 이루고 있다. 특히 그림 4(d)에서 나노 기둥의 끝은 10면체의 한쪽과 유사하다(그림 8(a) 참조). 오각형으로 이루어진 끝을 가지는 결정에 대하여서는 참고문헌 45에서 심도 있게 설명되어 있으며, 이에 관하여서는 3.3와 3.4 절에서 토의 될 것이다.

그림 4로부터 원통형 다중껍질 나노기둥의 표면은 항상 {111}과 유사한 표면을 형성하는 것을 알 수 있다. 원통형 다중껍질 나노와이어의 한 껍질은 삼각형 네트워크, 즉 {111}면 원자층으로부터 얻어질 수 있기 때문에, 원통형 다중껍질 나노와이어는 {111}면과 관련되어 있다. 그러므로 {111}면위에 놓여있는 원통형 다중껍질 나노기둥을 500 ps 동안 MD 시뮬레이션하였다. {111} 기판 바닥의 원자들은 고정되었으며 나머지 영역의 원자들은 자유롭게 운동하도록 하였다. 그림 5는 시뮬레이션 후 {111} 면과 원통형 다중껍질 나노기둥의 경계를 서로 다른 각도에서 보여주는 그림이다. 경계영역에서 원통형 다중껍질 나노기둥은 2개의 원자층이 {111}구조로 변화되었으나 나머지 영역은 원통형 구조를 유지하였다. 이러한 결과는 원통형 다중껍질 나노기둥이 면심입방격자 구조와 연결되어 존재할 수 있다는 것을 보여준다.



(a) (b) (c) (d)

그림 4. (a) 16-11-6-1 구리 나노기둥. (b) 300 K에서 나노기둥 모양. (c) 600 K에서 나노기둥 모양. (d) 900 K에서 나노기둥 모양. 각 경우는 나노기둥의 끝점의 구조와 함께 보여진다.

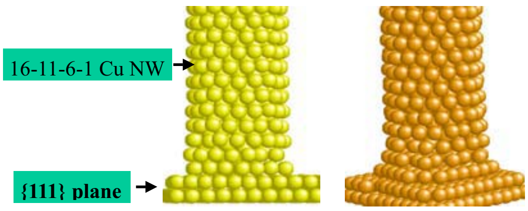


그림 5. 300 K에서 {111} 면위에 서있는 16-11-6-1 구리 나노기둥에 대한 서로 다른 각도에서 바라본 구조.

3.3 다중 껍질 나노와이어 장력 모의실험

지금까지 원통형 다중껍질 나노와이어의 구조적 특성에 관하여 연구하였다. 이번 절에서는 역학적 특성에 관하여 연구하였다. 원통형 다중껍질 구리 나노와이어의 장력 모의실험을 이전 사각형 구리 나노와이어 역학적 변형 특성에 관한 연구 [27,33]에서 사용된 방법을 사용하여 시뮬레이션하였다. SD 방법과 MD방법을 사용하여 연구하였다. SD 방법의 경우, 먼저 원통형 다중껍질 나노와이어의 양쪽 끝 원자층은 0.01 Å 확장되고 나머지 영역의 원자들은 SD 방법으로 이완된다. 충분히 이완된 구조를 사용하여 다시 나노와이어의 양쪽 끝은 0.01 Å 확장되고 다시 SD 방법으로 이완된다. 이러한 과정을 반복하여 각 변형에 따라 나노와이어의 양쪽 끝에 작용되는 장력을 계산하였다. SD 방법을 사용한 경우에는 온도에 따른 열적 특성을 포함할 수 없기 때문에, 300 K에서 MD 방법으로 나노와이어 확장을 시뮬레이션 하였다. 나노와이어의 확장 속도는 0.1 m/s가 되도록 하고 MD timestep을 10^{-5} fs로 하여 각 MD step마다 10^{-11} Å 확장되도록 하였다. MD 시뮬레이션에서 확장속도는 STM(scanning tunneling microscope) 실험에서 수행되는 10^{-8} m/s 보다 매우 빠르다. 현재의 컴퓨터 속도를 고려할 때 STM실험과 일치하는 조건으로 시뮬레이션하는 것은 어려운 현실이다. 그러나 Mehrez와 Ciraci [35]는 STM 실험과 MD 시뮬레이션 사이의 확장 속도의 현격한 차이에도 불구하고 MD 시뮬레이션은 STM 실험결과와 유사한 결과를 얻을 수 있다는 것을 보여주었으며, 본 저자의 이전 구리 나노와이어의 역학적 변형에 관한 연구 [27,33]에서도 이러한 관계는 보여졌다.

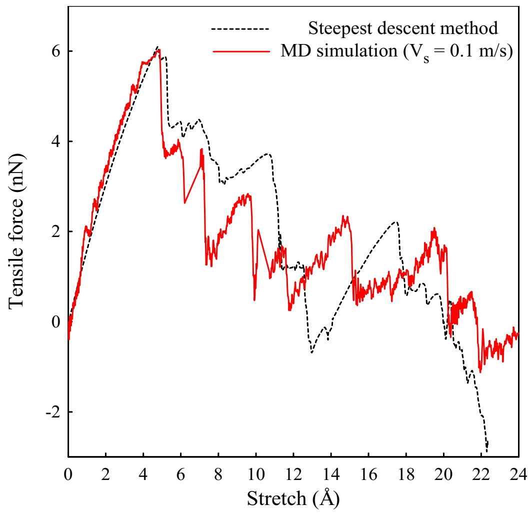


그림 6. 16-11-6-1 구리 나노와이어의 확장에 따른 장력의 변화.

그림 6은 확장거리에 따른 장력의 변화를 보여주고 있다. 장력은 첫 번째 항복(yielding)이 일어나기 전에 거의 선형적으로 증가하고 최고점에 도달한 다음에 급격히 감소한다. MD 시뮬레이션의 경우는

탄성 영역에서 작은 파문들이 존재한다. 이전 STM 실험에서도 탄성 영역에서 작은 파문들이 나타나는 결과들을 보여주었다. 첫 번째 항복 이후, 의사 탄성 영역(quasi-elastic region)과 부분 항복(sub-yielding)들이 번갈아 나타나다 결국 끊어진다. 항복후 나타나는 장력의 급격한 감소는 이전 결과들과 잘 일치한다 [33,34,37-41]. 첫 번째 항복에서는 원자층의 급격한 미끄러짐(slip)은 나타나지 않으나 나노와이어의 중앙부분의 원자들이 다각형 구조로 변형되었다. 확장이 계속됨에 따라 확장방향에 수직인 원자층의 수직 미끄러짐과 축방향에 대하여 대각방향으로 원자층 미끄러짐이 반복적으로 나타났으며, 이러한 과정을 통하여 나노와이어의 원자층은 증가하고 나노와이어의 직경은 감소하였다. 면심입방격자의 경우, 외부의 압력으로 일어나는 원자층 미끄러짐은 {111} 면위에서 <110> 방향과 Burger vectors (1/6)<211>를 가지는 부분 단층(partial dislocations) 안에서 (1/2)<110>{111} 방향들로 일어난다 [42]. 그러나 이전 면심입방격자 나노와이어들의 역학적 변형에 관한 연구에서 [33,34,37-41], 나노와이어는 다양한 단층 미끄러짐 현상들을 포함하며, 최소한 두 가지 메커니즘이 주요하다. 첫 번째는 {111} 면위에서의 단층 미끄러짐 현상이며 다른 하나는 확장 방향에 대하여 수직인 면의 원자층들 사이에서 평행한 동종 미끄러짐(homogeneous slip)이다. 이들 두 미끄러짐 현상이 번갈아 나타나며 나노와이어 중심부분의 반경이 감소된다. 본 연구에서 사용된 원통형 다중껍질 나노와이어 확장 변형에 따라 나타나는 미끄러짐 현상들도 이와 거의 동일한 메커니즘을 보였다. 그러나 확장이 진행됨에 따라서 {100} 표면들이 나타났으며, 이들 영역의 단면은 오각형이 되었다. 이전 {100} 표면을 가지는 나노와이어의 확장과정에서 {111} 표면을 가지는 나노와이어 영역이 나타난 것과는 다른 결과이다 [33,34,38]. 그러나 오각형 구조는 {100} 구조가 아니다. 그림 7(a)은 10 Å 확장된 경우의 나노와이어 구조를 보여준다. 그림 7(b)는 오각형 영역으로 변화된 나노와이어의 기본셀을 보여준다. 서로 다른 색은 다른 원자층을 가리키며 다섯 번 접힌 다중껍질 구조이다. 오각형 구조로 변형된 영역에서는 이어지는 원자층 미끄러짐 현상과 같은 구조적 변화는 일어나지 않

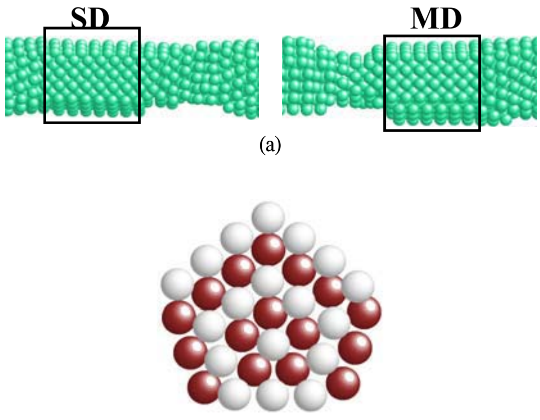


그림 7. (a) SD 방법 및 MD 방법을 적용하여 10 Å 확장된 경우의 나노와이어 구조. 사각형은 오각형 구조로 변화된 영역이다. (b) 그림 7 (a)의 오각형 구조의 기본 셀.

았다. 그러므로 오각형 나노와이어는 안정된 구조로 여겨질 수 있다. 시뮬레이션 동안 나노와이어의 양쪽 끝 원자층이 고정되어 있으므로 원통형 영역과 오각형 영역이 같이 존재하였으며, 나노와이어가 끊어진 후에도 오각형 나노와이어 영역은 구조를 유지하였다. 최근 Lisiecki 등은 [43] 콜로이드 용액을 사용한 방법으로 10면체 모델로 설명되어지는 구리 오각형 나노와이어를 합성하였으며, Hofmeister [44] 등도 오각형은(Ag) 나노와이어를 합성하였다. Gryaznov 등은 [45] 나노구조 물질에서 오각형적으로 대칭인 나노 입자들과 오각형적인 NLC(needle-like crystals)의 최근 연구결과들을 살펴보았다. 또한 최근에는 Ding 등이 [46] MTB(multiple twin boundaries)를 가지는 오각형 나노와이어의 탄성 변형력을 계산하였다. 이러한 오각형 나노와이어의 구조는 10면체 및 20면체 나노 입자의 확장으로 설명될 수 있다.

3.4 오각형 나노와이어 및 나노로드

3.2와 3.3절의 결과들을 사용하여 오각형 NLC 나노로드(Nanorod)를 시뮬레이션 하였다. 그림 8(a)는 3.2와 3.3절로부터 얻어진 결과로 구성된 평균 직경이 33 Å인 오각형 NLC이다. 그림 8(b)는 300 K에서 500 ps MD 시뮬레이션 이후 구조를 보여주고

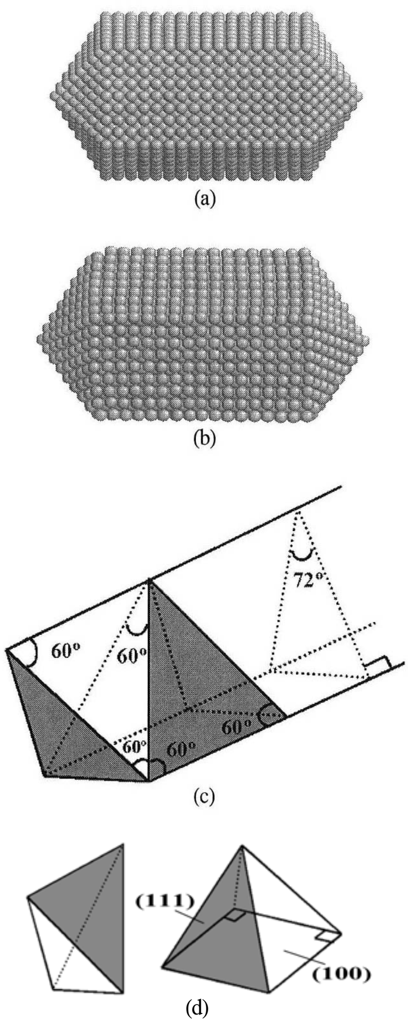


그림 8. (a) 그림 4와 그림 7의 결과로부터 구성된 오각형 NLC (needle-like crystal) 구조. (b) 그림 8(a)를 300 K에서 500 ps동안 MD 시뮬레이션한 결과. (c) 그림 8(a)의 부분구조인 삼각형 나노로드. (d) 그림 8(c)를 구성하는 사면체와 사각뿔.

있다. 충분히 긴 시간의 MD 시뮬레이션 후에도 오각형 NLC는 초기 구조를 유지하고 있다. 그림 8(c)는 그림 8(a)의 구조의 양쪽 끝점을 연결한 중심선을 중심으로 5개의 면으로 쪼갤 때 나타나는 삼각형 나노로드를 보여준다. 그림 8(c)의 삼각형 나노로드는 그림 8(d)에 보여지는 사면체 (삼각뿔)와 사각뿔로 구성되어있다. 그림 8(b)의 삼각형 나노로드의 양쪽 끝은 항상 사면체로 이루어지며 이 사면체의 한 면은 사각뿔의 한 빗면이 된다. 그러므로 사면체와 사각뿔의 연속적인 배열은 삼각형 나노로드를 형성하고, 이들 삼각형 나노로드는 오각형 NLC의 한 부분을 구성한다. 그림 8(d)에서 사면체와 사각뿔의 삼각형 면들은 모두 정삼각형인 것을 알 수 있다. 이는 그림 4(d)의 꼭지점의 면들이 {111} 면이며 그림 8(a,b)의 양쪽 끝 삼각형 면들이 모두 {111}면 인것과 일치한다. 참고문헌 [44]의 HRTEM (High-resolution transmission electron microscopy)결과들도 양쪽 끝 면들은 {111}면을 보여주었다. 또한 그림 8(d)의 사각뿔의 경우, 밑면이 {100} 면이므로, 원자들이 {100} 면위에 피라미드 형태로 쌓여있는 사각뿔로서 면심입방격자인 것을 알 수 있다. 결국 오각형 NLC 구조 나노로드의 부분 구조는 면심입방격자로 구성되어져 있으며, 나노로드의 축을 중심으로 5번 반복된 경계(fivetime multiple twin-boundary)를 가지는 구조이다.

4. 결　　론

나노와이어는 향후 전자소자, 광자소자, 양자소자등의 응용이 기대되어 많은 관심을 받고 있는 물질이다. 이전 나노와이어 구조에 관한 이론적인 연구들은 새로운 나노구조로써 원통형 다중껍질 구조를 집중적으로 연구하여왔지만, 원통형 다중껍질 구조의 경우는 대부분 직경이 수 나노미터 이하로 진공에서 실험되어졌으며, 진공 조건에 대한 MD시뮬레이션이 수행되어져 왔다. 본 연구에서는 원통형 나노와이어의 끝 부분이 오각형 NLC 구조의 끝부분과 동일한 구조를 가지며, 역학적 변형과정에서 구조적으로 안정적인 오각형 NLC 구조로 변형되는 것을 살펴보았다. 실질적으로 진공 밖에서도 존재하는 수 나노미터 이상의 나노와이어의 구조는 오각형 구조로 합성되었으며 [43,44], 이러한 오각형 NLC의 기본구조는 면심입방격자 벌크 물질에서의 구조와 잘 일치하였다. 그러므로 본 논문은 안정적인 오각형 NLC형의 나노와이어가 실제 소자 및 공학적 응용에 가능성을 가지는 것을 MD 시뮬레이션을 통하여 보여주었다.

후 기

본 연구는 한국과학재단 목적기초연구(R01-2001-00308)지원으로 수행되었음.

참 고 문 헌

[1] N. Agrait, J. G. Rodrigo, and S. Vieira, Phys. Rev. B **47**, 12345 (1993).
[2] J. I. Pascual , J. Mendez, J. Gomez-Herrero, A. M. Baro, N. Garcia, and V. T. Binh, Phys. Rev. Lett. **71**, 1852 (1993).
[3] L. Olesen, E. Laegsgaard, I. Stensgaard, F. Besenbacher, J. Schiotz, P. Stoltze, K. W. Hacobsen, and J. K. Norskov, Phys. Rev. Lett. **72**, 2251 (1994).
[4] J. M. Kran, J. M. van Ruitenbeek, V. V. Fisun, J. K. Yan, and L. J. de Jongh, Nature **375**, 767 (1995).
[5] Y. Kondo and K. Takayanagi, Phys. Rev. Lett. **79**, 3455 (1997).
[6] H. Ohnishi, Y. Kondo, and K. Takayanagi, Nature **395**, 780 (1998).
[7] Y. Kondo and K. Takayanagi, Science **289**, 606 (2000).
[8] V. Rodrigues, T. Fuhrer, and D. Ugarte, Phys. Rev. Lett. **85**, 4124 (2000).
[9] J. W. Kang and H. J. Hwang, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 2629 (2002).
[10] W. S. Yun, J. Kim, K. H. Park, J. S. Ha, Y. J, Ko, K. Park, S. K. Kim, Y. J. Doh, H. J. Lee, J. P. Salvetat, and László Forró, J. Vac. Sci. Tehcnol. A **18**, 1329 (2000).
[11] B. Wang, S. Yin, G. Wang, A. Buldum, and J. Zhao, Phys. Rev. Lett. **86**, 2046 (2001).
[12] G. Bilalbegoviæ, Phys. Rev. B **58**, 15412 (1998).
[13] E. Tosatti, S. Prestipino, S. Kostlmeier, A. Dal Corso, and F. D. Di Tolla, Science **291**, 288 (2001).
[14] G. Bilalbegoviæ, Solid State Comm. **115**, 73 (2000).
[15] J. A. Torres, E. Tosatti, A. Dal Corso, F. Ercolessi, J. J. Kohanoff, F. D. Di Tolla, and J. M. Soler, Surf. Sci. **426**, L441 (1999).
[16] G. Bilalbegoviæ, Comp. Mater. Sci. **18**, 333 (2000).
[17] R. Tenne, L. Margulis, M. Genut, and G. Hodes, Nature **360**, 444 (1992).
[18] L. Margulis, G. Salitra, R. Tenne, and M. Tallenker, Nature **365**, 113 (1993).
[19] Y. R. Hacohen, E. Grunbaum, R. Tenne, and M. Tallenker, Nature **395**, 336 (1998).
[20] O. Gülseren, F. Erolessi, and E. Tosatti, Phys. Rev. Lett. **80**, 3775 (1998).
[21] F. Di Tolla, A. Dal Corse, J. A. Torres, and E. Tosatti, Surf. Sci. **456**, 947 (2000).
[22] O. Gülseren, F. Erolessi, and E. Tosatti, Phys. Rev. B **51**, 7377 (1995).
[23] G. M. Finbow, R. M. Lynden-Bell, and I. R. McDonald, Mol. Phys. **92**, 705 (1997).
[24] B. Wang, S. Yin, G. Wang, and J. Zhao, J. Phys.: Condens. Matter **13**, L403 (2001).
[25] H. J. Hwang and J. W. Kang, J. Korean Phys. Soc. **40**, 283 (2002).
[26] M. Menon and E. Richter, Phys. Rev. Lett. **83**, 792 (1999).
[27] U. Landman, R. N. Barnett, A. G. Scherbakov, and P. Avouris, Phys. Rev. Lett. **85**, 1958 (2000).
[28] K. Michaclian, N. Rendon, and I. L. Garzon, Phys. Rev. B **60**, 2000 (1999).
[29] F. J. Palacios, M. P. Iniguez, M. J. Lopez, and J. A. Alonso, Phys. Rev. B **60**, 2908 (1999).
[30] L. Rongwu, P. Ahengying, and H. Yukun, Phys. Rev. B **53**, 4156 (1996).
[31] T. X. Li, S. Y. Yin, Y. L. Ji, B. L. Wang, G. H. Wang, and J. J. Zhao, Phys. Lett. A **267**, 403 (2000).
[32] H. Lei, J. Phys.: Condens. Matter **13**, 3023 (2001).
[33] J. W. Kang and H. J. Hwang, J. Korean Phys. Soc. **38**, 695 (2001).
[34] J. W. Kang and H. J. Hwang, Nanotechnology **12**, 295 (2001).
[35] F. Cleri and V. Rosato, Phys. Rev. B **48**, 22

(1993).
[36] M. P. Allen and D. J. Tildesley, "*Computer simulation of liquids*" (Oxford: Clarendon, 1987).
[37] H. Ikeda, Y. Qi, T. Cagin, K. Samwer, W. L. Johnson, and W. A. Goddard, Phys. Rev. Lett. **82**, 2900 (1999).
[38] H. Mehrez and S. Ciraci, Phys. Rev. B **56**, 12632 (1997).
[39] U. Landman, Solid State Commu. **107**, 693 (1998).
[40] M. R. Sorensen, K. W. Jacobsen, and P. Stoltze, Phys. Rev. B **53**, 2101 (1996).
[41] R. Komanduri, N. Chandrasekaran, and L. M. Raff, Inter. J. Mech. Sci. **43**, 2237 (2001).
[42] V. B. Shenoy, R. V. Kukta, and R. Phillips, Phys. Rev. Lett. **84**, 1491 (2000).
[43] I. Lisiecki, A. Filankembo, H. Sack-Kongehl, K. Weiss, M.-P. Pileni, and J. Urban, Phys. Rev. B **61**, 4968 (2000).
[44] H. Hofmeister, S. A. Nepijiko, D. N. Ievlev, and W. Schulze, G. Ertl, J. Cryst. Growth **234**, 773 (2002).
[45] V. G. Gryaznov, H. Heydenreich, A. M. Kaprelov, S. A. Nepijko, A. E. Romanov, and J. Urban, Cryst. Res. Technol. **34**, 1091 (1999).
[46] F. Ding, H. Li, J. Wang, W. Shen, and G. Wang, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 113 (2002).