

이중벽탄소나노관들의 분류를 위한 보충적인 기하학적제한조건

김 광 일

탄소나노관들의 전자상태는 탄소나노관의 기하학적구조에 대단히 민감하게 의존한다.[1] 그러므로 선행연구들[2, 3]에서는 기하학적제한조건에 의한 탄소나노관의 분류에 대하여 논의하였다.

우리는 선행연구에서 제기된 기하학적제한조건외에 이중벽탄소나노관들의 분류를 위한 기하학적제한조건으로 탄소나노관의 원주를 따르는 공간적반복주기성조건을 더 부여할수 있다는데 대하여 논의하였다.

1. 공간적반복주기성에 의한 기하학적제한조건

드레셀하우스의 침수표시에서 탄소나노관 (n, m) 의 반경은 다음과 같다.

$$R = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} a_{c-c} \sqrt{n^2 + nm + m^2} \quad (1)$$

여기서 $a_{c-c} = 0.142 \text{ nm}$ 는 탄소원자사이의 최소결합길이, n, m 은 정의용근수이다.

《지그자그형》탄소나노관과 《안락의자형》탄소나노관에서 탄소원자들의 배치는 그림과 같다.

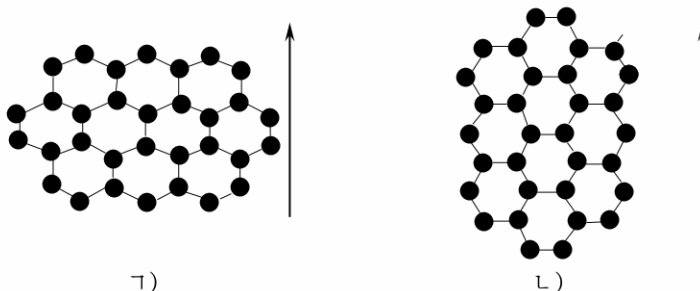


그림. 《지그자그형》탄소나노관(Г)과 《안락의자형》탄소나노관(Л)에서
탄소원자들의 배치
화살표는 탄소나노관축방향을 나타낸다.

탄소나노관의 원주를 따르는 공간적반복주기길이는 《지그자그형》탄소나노관의 경우에 $l_z = 0.246 \text{ nm}$ 이고 《안락의자형》탄소나노관의 경우에 $l_{\text{안}} = 0.426 \text{ nm}$ 이다.

《지그자그형》탄소나노관과 《안락의자형》탄소나노관의 경우에 탄소나노관의 반경은 각각 다음과 같다.

$$R_{\text{지}} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} a_{\text{c-c}} n, \quad (2)$$

$$R_{\text{안}} = \frac{3}{2\pi} a_{\text{c-c}} n$$

그러므로 이중벽《지그자그형》탄소나노관과 이중벽《안락의자형》탄소나노관에서 두 나노관벽들사이의 거리는 각각 다음과 같다.

$$d_{\text{지}} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} a_{\text{c-c}} (n''_{\text{지}} - n'_{\text{지}}), \quad (3)$$

$$d_{\text{안}} = \frac{3}{2\pi} a_{\text{c-c}} (n''_{\text{안}} - n'_{\text{안}})$$

여기서 $n'_{\text{지}}$, $n''_{\text{지}}$ 와 $n'_{\text{안}}$, $n''_{\text{안}}$ 들은 각각 이중벽《지그자그형》탄소나노관과 이중벽《안락의자형》탄소나노관의 안과 바깥벽에 해당하는 드레셀하우스첨수이다. 이때 이중벽탄소나노관에서 두 나노관벽들사이의 거리를 d_0 이라고 하면 다음의 기하학적제한조건을 부여할 수 있다.

$$d_{\text{지}} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} a_{\text{c-c}} (n''_{\text{지}} - n'_{\text{지}}) \geq d_0, \quad (4)$$

$$d_{\text{안}} = \frac{3}{2\pi} a_{\text{c-c}} (n''_{\text{안}} - n'_{\text{안}}) \geq d_0$$

이중벽《지그자그형》탄소나노관과 이중벽《안락의자형》탄소나노관에서 내부벽의 원주길이에 비한 외부벽의 원주길이의 증가는 각각 다음과 같다.

$$\Delta l_{\text{지}} = \sqrt{3} a_{\text{c-c}} (n''_{\text{지}} - n'_{\text{지}}), \quad (5)$$

$$\Delta l_{\text{안}} = 3 a_{\text{c-c}} (n''_{\text{안}} - n'_{\text{안}})$$

이중벽탄소나노관인 경우에 《지그자그형》탄소나노관과 《안락의자형》탄소나노관들에서 원주길이의 증가량은 다같이 $2\pi d_0$ 으로 된다. 따라서 다음의 식이 성립한다.

$$\frac{2\pi d_0}{l_{\text{지}}} = N_{\text{지}}, \quad (6)$$

$$\frac{2\pi d_0}{l_{\text{안}}} = N_{\text{안}}$$

여기서 $N_{\text{지}}$, $N_{\text{안}}$ 들은 기하학적제한조건 (4)를 만족시키는 령이 아닌 정의용근수들이다.

따라서 식 (6)으로부터

$$\frac{l_{\text{안}}}{l_{\text{지}}} = \frac{N_{\text{지}}}{N_{\text{안}}}. \quad (7)$$

식 (7)은 이중벽탄소나노관벽의 원주길이증가에 대한 공간적반복주기성으로부터 나타나는 다른 하나의 기하학적제한조건으로 된다.

2. 공간적반복주기성을 고려한 이중벽탄소나노관의 분류

기하학적제한조건에 의한 이중벽탄소나노관들의 분류는 우선 식 (4)에 기초하여 진행할 수 있다.

이중벽탄소나노관들에서 $d_0 = 0.339\text{nm}$ 라고 할 때 식 (4)에 기초한 몇가지 가능한 $(n_1, 0)@(n_2, 0)$ 형이중벽탄소나노관들의 분류[2]를 표에 보여주었다.

표. 몇가지 가능한 $(n_1, 0)@(n_2, 0)$ 형이중벽탄소나노관들의 분류

n_1	R_1 / nm	n_2	R_2 / nm	$d(= R_2 - R_1) / \text{nm}$	표시
8	0.312 8	16	0.625 6	0.312 8	(8, 0)@(16, 0)
8	0.312 8	17	0.664 7	0.351 9	(8, 0)@(17, 0)
9	0.351 9	17	0.664 7	0.312 8	(9, 0)@(17, 0)
9	0.351 9	18	0.703 8	0.351 9	(9, 0)@(18, 0)
10	0.391 0	18	0.703 8	0.312 8	(10, 0)@(18, 0)
10	0.391 0	19	0.742 9	0.351 9	(10, 0)@(19, 0)
11	0.430 1	19	0.742 9	0.312 8	(11, 0)@(19, 0)
11	0.430 1	20	0.782 0	0.351 9	(11, 0)@(20, 0)
12	0.469 2	20	0.782 0	0.312 8	(12, 0)@(20, 0)
12	0.469 2	21	0.821 1	0.351 9	(12, 0)@(21, 0)

표에서는 기하학적제한조건 (4)로부터 이중벽《지그자그형》탄소나노관들에서 $n_2 - n_1$ 이 8 또는 9라는 사실이 리용되었다.[2] 이중벽《안락의자형》탄소나노관의 경우에도 마찬가지로 논의할수 있다. 이 경우에는 $n_2 - n_1$ 이 5 또는 6이라는 결과를 얻는다.

한편 탄소나노관벽의 원주길이증가의 공간적주기성을 고려한 제한조건 (7)로부터

$$\frac{N_{\text{지}}}{N_{\text{안}}} \approx 1.73 \quad (8)$$

이다. 식 (8)을 고려하면 《지그자그형》@《지그자그형》이중벽탄소나노관들에서는 $n_2 - n_1$ 이 8 또는 9로 될수 있으나 《안락의자형》@《안락의자형》이중벽탄소나노관들에서는 $n_2 - n_1$ 이 5만 허용된다는것을 알수 있다.

맺 는 말

이중벽탄소나노관의 분류를 위해서는 탄소나노관벽들사이의 거리에 관한 기하학적제한조건과 함께 탄소나노관벽의 원주길이증가에 대한 공간적주기성을 고려하여야 한다.

참 고 문 헌

- [1] Ahmed Shaikjee et al.; J. Advanced Research, 3, 195, 2012.
- [2] A. Charlier et al.; Carbon, 37, 1779, 1999.
- [3] V. N. Satyanarayana et al.; Progress in Materials Science, 52, 699, 2007.

주체105(2016)년 3월 5일 원고접수

Additional Geometric Constraint for the Classification of Double-Walled Carbon Nanotubes

Kim Kwang Il

In this paper is shown one additional geometric constraint for the classification of double-walled carbon nanotubes.

Here is proposed that periodic condition of spatial iteration according to circumference of carbon nanotube could be supplemented as geometric constraint of double-walled carbon nanotube.

Key words: double-walled carbon nanotube, spatial iteration, periodic condition