

[S-2]

탄소나노튜브의 전계방출 특성에 관한 이론적 연구

한승우, 임지순
서울대학교 물리학과

본 연구에서는 다양한 끝 모양을 지닌 (n,n) 나노튜브에 대한 전자구조를 외부 전기장이 걸려있을 때와 없을 때에 대해 제일 원리적(ab-initio) 방법을 써서 연구하였다. 계산한 모델들 중 비스듬히 잘린 지그재그 형태의 끝 모양을 가진 나노튜브가 가장 좋은 전계 방출 효과가 있음을 알아냈다. 이것은 페르미 레벨 근처에 존재하는 짝지어지지 못한 전자들로 인한 것이다. 다음으로 유리한 구조는 캡모양의 끝을 가진 나노튜브로써 이것은 캡에 국소적으로 존재하는 파이 상태의 전자가 전기장 방향으로 향하고 있기 때문이다. 이외에 유도된 전기장이 튜브의 중형비에 비례하는 법칙이 있음을 발견하였다.