

# 메모리함수에 의한 단일 벽 탄소 나노튜브의 열전도도

박정일<sup>a</sup> · 정해두<sup>b\*</sup>

<sup>a</sup>경북대학교 물리학과 나노물리 연구실, 대구 702-701,

<sup>b</sup>한밭대학교 교양학부, 대전 305-719

(2013년 2월 10일 받음, 2013년 4월 14일 수정, 2013년 4월 26일 확정)

단일 벽 탄소 나노튜브(SWNT)의 열전도도를 구하기 위해서 메모리함수에 Kubo 등식을 사용하였다. 계산 과정에서 나타나는 발산의 문제를 해결하기 위해 전파인자는 연속 분수과정으로 전개하였다. 이러한 계산에서 메모리함수는 지금까지 제시된 다른 이론들 보다 많은 상호작용의 효과를 고려할 수 있다. SWNT에서 20 K 이하의 저온 영역은 온도의 증가에 따라 열전도도가 증가하며, (9,0) 보다 (10,0)이 다소 큰 값을 가지는데 이는 포논의 평균자유행로  $l_{ph}$ 가 직경의 크기와 관계 있음을 알 수 있다. 그리고 20 K 이상의 고온 영역에서는 비열이 거의 일정한 값을 가지므로 Umklapp 과정에 의해 열전도도는 감소하면서 최대값을 보이고, SWNT의 직경이 증가할수록 최대값의 위치도 고온 쪽으로 이동하는 것으로 조사되었다.

**주제어** : 메모리함수, 단일 벽 탄소나노튜브, 열전도도, 평균자유행로, Umklapp과정, 선폭

## I. 서 론

반도체 공정 기술의 눈부신 발전으로 전자 소자의 성능은 향상되고 그 크기는 점점 소형화 되어가고 있다. 특히 전기적, 열역학적 특성을 포함하는 여러 가지 특이한 물성들이 알려지면서 우수한 탄소나노튜브(carbon nanotube, CNT) 복합재료를 만들기 위한 노력이 이루어져 왔다 [1,2]. CNT는 합성 방법에 따라 단일 벽(single-walled: SW), 이중 벽(double-walled: DW), 얇은 다중 벽(thin multi-walled: t-MW), 다중 벽 탄소 나노튜브(multi-walled carbon nanotube: MWNT)로 분류한다. CNT는 영률이 1.35 TPa에 달하며 잘 구부러지는 성질이 있고 벽이 늘어날수록 더욱 더 강해진다 [3]. 일반적인 경우 원자당 상호작용 에너지는 수십 meV이지만  $\mu\text{m}$ 당의 결합에너지는 수천 eV이므로 튜브 사이의 강한 van der Waals 상호작용은 실제시료를 거의 다발의 형태로 존재하게 만든다. 더군다나 CNT는 열전도도(thermal conductivity)가  $600 \text{ WK}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$ 이상의 매우 큰 값을 가지므로 복합재료의 열역학적 특성을 조절하기 위한 용도로 사용하기 위한 연구가 많이 이루어졌다 [4-8].

CNT는 탄소의  $sp^2$  혼성결합으로 이루어진 흑연판이 둥글게 말린 관의 형태를 하고 있으며, 흑연판이 말린 각도

및 구조에 따라서 금속 또는 반도체의 특성을 나타낸다. 또한 말린 직경에 따라 에너지 간격이 달라지며 준 일차원적 구조를 가지고 있어 특이한 양자효과를 나타낸다. 이러한 특성과 효과에 CNT 복합재료의 가공 및 기반물질 계면의 최적화 등에 대한 보다 정밀한 분석과 이해가 수반 됨으로써 강화된 고분자 복합재료를 얻을 수 있을 것이다. 일반적으로 열전도도를 측정하는 방법에는 시편 위에 가늘고 얇은 금속 박막을 입혀서 열선과 온도 센서를 동시에 사용하면서 덩어리와 막을 측정하는  $3\omega$ 법과 주로 박막 등에 이용하는 광음향법 등이 있다. 전자스핀공명에 의한 분석 방법은 CNT의 성질을 연구하는데 많이 이용되어 왔다 [9]. 또한 CNT의 일차원적 특성으로 시료의 양이 적음에도 불구하고 전자의 스핀과 관련된 공명현상에 의해 강한 신호를 검출할 수 있다 [10,11]. 일 차원 CNT에 대한 스펙트럼의 메모리함수와 선폭(line-width)은  $p_z$  전자의 스핀-궤도 상호작용에 의해 퍼짐이 발생하며 여기서 선폭은 스핀이완시간의 역수가 된다.

본 연구에서는 Kubo [12-14]의 선형 응답 이론에 밀도함수를 사용하여 메모리함수를 구하고, 이를 이용하여 zigzag SWNT (9,0)과 (10,0)에 대하여 열전도도를 각각 계산하였다. 더군다나 여러 종류의 SWNT 중에서 (9,0)과 (10,0)은 Fermi면 근처에서 상태밀도가 달라 각기 다른 특

\* [전자우편] hdcheong@hanbat.ac.kr

성을 보여주는 것으로 알려져 있다. 한편으로, 공명흡수 정점에서 메모리함수의 발산문제 [15]를 해결하기 위하여 계산 과정이 다소 번거롭긴 하지만 전파인자는 연속 분수 형식으로 전개하였으며, 이번 연구에서는 이론적인 고찰로 제한하기로 한다 [16-19].

## II. SWNT의 띠 구조와 해밀토니언

SWNT는 육각형 흑연의 반복으로 이루어지며 탄소원자가 0.142 nm거리에서 벌집모양으로 육각형을 이룬 탄소면이 감긴 구조로 되어있다. 탄소원자의 전자구조는  $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$  네 개의 전자들이  $sp^2$  혼성결합을 이루고 있으면서 이웃의 탄소원자와 결합하고 있다. 바깥궤도의 3개의 전자는  $\sigma$ 궤도로 이웃원자와 결합되어있고 네 번째  $2p_z$  전자가 이웃원자를 향하는 방향으로 전기전도에 관여한다 [20]. SWNT는 튜브의 축 방향으로 일 차원 주기성을 가지면서 SWNT의 원주방향과 가장 가까운 zigzag 축과의 사이 각인 chiral 각  $\theta$ 에 따른 전기전도도가 도핑이나 결합에 무관하게 금속 또는 반도체의 성질을 나타낸다 [21,22]. 따라서 흑연 판 내에서는 Fermi 준위 근처에 Dirac형 분산으로 나타나는 서로 다른 두 개의 에너지 띠를 가지게 된다. 이는 제일 Brillouin 영역의 모서리에  $K=(1, \sqrt{3})2\pi/3L$ ,  $K'=(-1, \sqrt{3})2\pi/3L$  위치하며, 각각  $\lambda=1$ 과  $\lambda=-1$ 이다. 이와 같은 에너지 띠 구조에서 외부 정 자기장  $B$ 를 가한 계의 해밀토니언은 [20]

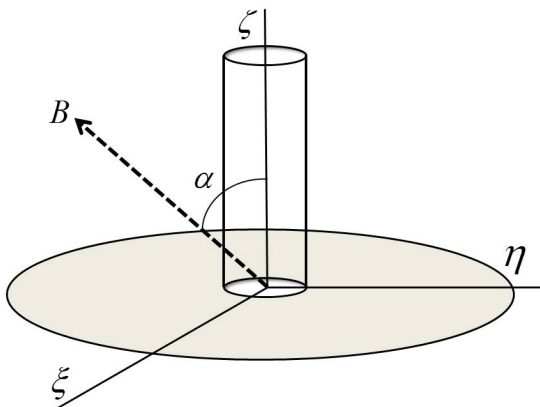


Figure 1. Reciprocal positions of SWNT and coordinate systems.

$$H_\lambda = \hbar v_F (\lambda \kappa_m \sigma_1 + k \sigma_2) + \hbar \omega_z (\sin \alpha S_\xi + \cos \alpha S_\zeta), \quad (1)$$

이다. 여기서  $\alpha$ 는 주축방향  $\zeta$ 과 정 자기장과의 사이의 각이며 Fig. 1에 나타내었고,  $v_F$ 는 Fermi 속도이며, 그리고  $\sigma_1$ 과  $\sigma_2$ 는 Pauli의 스핀 행렬 이다. 점  $K(\lambda=1)$ 와  $K'(\lambda=-1)$ 에 관계 있는 전자의 파수 벡터  $\vec{k}$ 는 SWNT의 주축을 향하고 이와 수직인 방향  $\rho$ 로 흑연 판을 돌돌 말며, 원주 방향으로 전자가 가지는 파수는  $\kappa_m=2(m-\lambda\nu/3)/d$ 이고,  $m$ 과  $\nu$ 는 모두 양자 수 이다. SWNT에 가한 외부 정자기장에 의해서 SWNT 단면을 통과하는 Ahronov-Bohm 자속  $\phi_{AB}=B_0 \cos \alpha \pi d^2/4$ 이 다음의 양자화 조건

$$\kappa_{m,\lambda} = \frac{2}{d} \left( m - \frac{1}{3} \lambda \nu + \frac{\phi_{AB}}{\phi_0} \right), \quad (2)$$

을 만족하게 된다. 여기서  $\phi_0=2\pi \hbar c/|e|$ 는 선 다발 양자화,  $|e|$ 는 전자의 전하량, 그리고  $|k, m, \lambda|$ 는 전자에 대한  $H_\lambda$ 의 고유함수이다. 그러면  $\epsilon_{k,m,\lambda} = \pm \hbar v_F \sqrt{\kappa_{m,\lambda}^2 + k^2} + \hbar \omega_\lambda$ 는 계의 고유에너지이며,  $+(-)$ 는 에너지 띠의 전도(가전자)대를 의미한다.  $V=\pm 1$ 은 반도체에서의 스펙트럼을 의미하며, 자기장을 가하지 않았을 때 SWNT의 에너지 간격은  $E_g=4\hbar v_F/3d$ 이 된다. SWNT에 대한 스펙트럼의 선 너비는 전자의 스핀-궤도 상호작용에 의해 발생하며, SWNT 좌표축  $\xi, \eta, \zeta$ 에 대한 변환된 해밀토니언은 [20]

$$H_{so} = \Lambda_0 \lambda \sigma_0 2S_\zeta + \Lambda_1 \lambda \sigma_1 2S_\xi - i \Lambda_2 \sigma_2 (S_+ e^{i\varphi} - S_- e^{-i\varphi}), \quad (3)$$

이다. 상수  $\Lambda$ 는 SWNT의 곡률에 비례하고,  $S_\pm = S_\xi \pm i S_\eta$ ,  $\varphi = 2\rho/d$ ,  $0 < \rho < |\vec{C}_h|$ ,  $\Lambda_0 = (\delta_0/d) \cos 3\theta$ ,  $\Lambda_{1,2} = \delta_{1,2}/d$  이다. SWNT의 나선성에 의존하는  $\Lambda_0$ 는  $\theta=0$ 에서 최대이고,  $\theta=\pi/6$ 에서 최소가 되며, 여기서  $\omega_\lambda$ 는

$$\omega_\lambda = \sqrt{(\omega_z \sin \alpha)^2 + [\omega_z \cos \alpha + 2\lambda(\Lambda_0 + \Lambda_1 \langle \sigma_1 \rangle) / \hbar]^2}, \quad (4)$$

이다.

## III. 메모리함수와 열전도도

SWNT는 독특한 구조적 특성과 강한 결합으로 인하여 일반적으로 관찰되지 않는 열 및 광화학적 성질을 가진다.

그 중에서도 높은 열전도도는 강한 매력적인 특성중의 하나이다. SWNT 내에서 열 전달은 격자의 진동에 의해 지배적인 영향을 받는데 일반적으로  $K = C_v v \cdot l_{ph}/3$ 으로 표현된다. SWNT인 경우에 축 방향 포논의 속력은 탄소의 강한 결합에 의해  $2 \times 10^5$  m/s까지 가능하다. S. Berber 등은 분자 동역학 모의실험으로부터 상온에서 고립상태의 (10,10) SWNT의 열전도도를 계산하였는데 약  $6,600 \text{ WK}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$ 이라는 매우 큰 값을 얻었다. 이와 같은 결과는 단일 흑연판이나 다이아몬드의 이상적인 열전도도보다 높은 값으로서 포논의 평균자유행로  $l_{ph}$ 가 매우 크기 때문인 것으로 알려져 있다. 온도 의존의 열전도도에서 저온 영역에서는 포논의 평균자유행로가 거의 변하지 않기 때문에 비열에 따라 값이 결정되며, 고온 영역에서는 상대적으로 비열이 일정한 값을 가지므로 Umklapp 과정에 의한 포논의 평균자유행로의 감소로 열전도도는 감소하게 된다 [10]. 모든 경우의 열전도도는 고온 영역에서 감소하기 전에 최대값을 보이며, SWNT의 직경이 증가할수록 최대값의 위치도 고온 쪽으로 이동한다. 이는 길이가  $1 \mu\text{m}$ 보다 짧고 포논의 평균자유행로가  $100 \text{ nm} \sim 1 \mu\text{m}$ 인 SWNT에서는 매우 큰 탄성을 가지기 때문이다. P. Kim 등은 MWNT의 열전도도를 측정하였는데 상온에서  $3,000 \text{ WK}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$ 의 높은 값을 나타내었으며, 이전의 실험값에 비해 100배 정도의 수준이었다. 열전도도는 온도가 증가함에 따라 증가하다가 320 K에서 최대값을 형성하고 다시 감소하는 경향으로 나타났었는데 이는 Umklapp 포논 산란에 기인한 것으로 분석되었다. 이와 같이 대부분의 연구들은 CNT에 대하여 이상적이고 독립된 경우를 이론적으로 계산하거나 매우 정밀한 실험적 방법을 통해 측정해왔다. 고전적 이론에서 다 전자계의 열전도도는 [11]

$$K = \frac{1}{V} \sum_{\xi} \sum_{\eta} \sum_{\zeta} k_B v_F M(\xi, \eta, \zeta)^{-1} \quad (5)$$

이다. 여기서  $V$ 는 계의 부피이며,  $M$ 은 메모리함수이다. SWNT를 표현하는 해밀토니언에 대응되는 Liouville 연산자와 밀도함수는 각각  $L = L_{\lambda} + L_{s0}$ ,  $\rho = \rho_{\lambda} + \rho_{s0}$ 이다. 메모리함수를 에너지 시간의 광 전이에 적용하여 Kubo [12] 등식과 다음의 관계식  $L_{\lambda} X \equiv [H_{\lambda}, X]$ ,  $L_{s0} X \equiv [H_{s0}, X]$ 을 사용하면

$$M_{+-}(\omega) \equiv \left\langle k, +m, \lambda \left| \int_0^{\infty} \exp\{-i(\omega - L_{s0})t\} \sigma_{+} dt \right| k, -m, \lambda \right\rangle$$

$$= \lim_{\omega \rightarrow 0} \left\langle k, +m, \lambda \left| \frac{1}{2\pi i} \left( \int \rho_{s0}(\omega) \frac{1}{H_{s0} - \omega - \sigma^{+}} d\omega \right) \right| k, -m, \lambda \right\rangle$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \lim_{\omega \rightarrow 0} \left\langle k, +m, \lambda \left| \int \rho_{s0}(\omega) \frac{1}{H_{s0} - \omega - \sigma^{+}} \frac{1}{H_{s0} - \omega - \sigma^{-}} d\omega \right| k, -m, \lambda \right\rangle \quad (6)$$

으로 되며, 이를 연속 분수 표현으로 다시 정리하면

$$M_{+-}(\omega) = \frac{(\sigma_{+})_{-}}{i\hbar\omega - i\Omega_0 + \frac{\Delta_1}{i\hbar\omega - i\Omega_1 + \frac{\Delta_2}{i\hbar\omega - i\Omega_2 + \dots}}} \quad (7)$$

이며,  $\Omega_k$ 와  $\Delta_k$  ( $=0, 1, 2, \dots$ )는 각각 진동수 인자와 역 감쇄시간을 나타낸다. 계산 과정에서  $\Omega_0$ ,  $\Omega_1$ ,  $\Delta_1$ 이 주요한 항으로 작용하며

$$i\Omega_0 = \frac{(\varphi_0^*, iL\varphi_0)}{(\varphi_0^*, \varphi_0)} = \frac{(X_{+-}, iL\sigma_{+})}{(X_{+-}, \sigma_{+})}$$

$$\Omega_1 = \frac{(\varphi_1^*, L_1\varphi_1)}{(\varphi_1^*, \varphi_1)} = \frac{1}{(\varphi_1^*, \varphi_1)} (\Theta_1 + \Theta_2 + \Theta_3 + \Theta_4), \quad (8)$$

이고, 여기서

$$\Theta_1 = \frac{\hbar}{2} \sum_{n \neq m} (X_{+-})(\sigma_{+})_n$$

$$\times \left[ (1 + f_F(\pm \varepsilon_{k,m,\lambda})) (\sigma_{-})_{-n-m} (\sigma_{+})_{+m+n} (\varepsilon_{k,m,\lambda} - \varepsilon_{-k,m,\lambda} + \hbar\omega) \right. \\ \left. + f_F(\pm \varepsilon_{k,m,\lambda}) (\sigma_{+})_{-n-m} (\sigma_{-})_{+m+n} (\varepsilon_{k,m,\lambda} - \varepsilon_{-k,m,\lambda} - \hbar\omega) \right], \quad (9)$$

$$\Theta_2 = -\frac{\hbar}{2} \sum_{n \neq m} (X_{+-})(\sigma_{+})_m$$

$$\times \left[ (1 + f_F(\pm \varepsilon_{k,m,\lambda})) (\sigma_{-})_{-n-m} (\sigma_{+})_{-m-n} (\varepsilon_{k,m,\lambda} - \varepsilon_{-k,m,\lambda} + \hbar\omega) \right. \\ \left. + f_F(\pm \varepsilon_{-k,m,\lambda}) (\sigma_{+})_{-n-m} (\sigma_{-})_{-m-n} (\varepsilon_{k,m,\lambda} - \varepsilon_{-k,m,\lambda} - \hbar\omega) \right], \quad (10)$$

$$\Theta_3 = -\frac{\hbar}{2} \sum_{n \neq m} (X_{+-})(\sigma_{+})_m$$

$$\times \left[ (1 + f_F(\pm \varepsilon_{-k,m,\lambda})) (\sigma_{-})_{+m+n} (\sigma_{+})_{-n-m} (\varepsilon_{-k,m,\lambda} - \varepsilon_{k,m,\lambda} + \hbar\omega) \right. \\ \left. + f_F(\pm \varepsilon_{-k,m,\lambda}) (\sigma_{+})_{+m+n} (\sigma_{-})_{+n+m} (\varepsilon_{-k,m,\lambda} - \varepsilon_{k,m,\lambda} - \hbar\omega) \right], \quad (11)$$

$$\Theta_4 = \frac{\hbar}{2} \sum_{n \neq m} (X_{+-})(\sigma_{+})_n$$

$$\times \left[ (1 + f_F(\pm \varepsilon_{-k,m,\lambda})) (\sigma_{-})_{+m+n} (\sigma_{+})_{-n-m} (\varepsilon_{-k,m,\lambda} - \varepsilon_{k,m,\lambda} + \hbar\omega) \right. \\ \left. + f_F(\pm \varepsilon_{k,m,\lambda}) (\sigma_{+})_{+m+n} (\sigma_{-})_{-n-m} (\varepsilon_{-k,m,\lambda} - \varepsilon_{k,m,\lambda} - \hbar\omega) \right]. \quad (12)$$

이다. 여기서  $f_F$ 는 Fermi-Dirac의 분포함수이다. 식(7)의

메모리함수는 지금까지 제시된 다른 이론들보다 상호작용의 효과를 보다 많이 고려할 수 있는 결과로 주어진다. 메모리함수의 선폭은 스핀이완시간의 역수에 비례하는 것으로, SWNT의 미시적 구조의 정보와 물리적 특성들은 여기에 포함되어 있다고 지금까지 논의 되어왔다. 에너지 띠 사이의 직접적인 광 전이 현상에 대한 이론적 연구는 실험적 사실을 설명하기에는 에너지 띠 내부의 전이에 대한 연구보다 상대적으로 충분하지 못했다. 따라서 위의 결과는 보다 정확한 현상의 설명에 도움이 될 것으로 기대된다. Zigzag SWNT (9,0)과 (10,0)의 열전도도를 계산하기 위해서 다음의 관계식  $\langle k, m, \lambda | \sigma_0 | k, m, \lambda \rangle = 1$ ,  $\langle k, m, \lambda | \sigma_2 e^{\pm i\varphi} | k, m, \lambda \rangle = 0$ ,  $\langle k, m, \lambda | \sigma_1 | k, m, \lambda \rangle = \pm \lambda k_{m, \lambda} / \sqrt{k^2 + k_m^2}$ , 과 이론적으로 계산된  $V_F = 3 \times 10^5$  m/s,  $\alpha_{cc} = 0.144$  nm,  $\delta_1 = -0.19$  meV·nm,  $\delta_0 / \delta_1 = 4.5$ ,  $\delta_2 / \delta_1 = -1.4$ ,  $\alpha = \pi/2$  값을 사용한다 [20]. Zigzag SWNT의 에너지 띠는 Saito [23]연구진의 띠 묶음 (tight-binding)방법에 의해서 계산되었으며, (9,0)에서는 일반적으로 에너지 간격이 0이 된다. 그러나 SWNT의 곡률에 의한 변형을 고려하면 약간의 유한한 에너지 간격을 가지게 된다. (10,0)의 경우는 Fermi 준위 근방에서 상태밀도가 0 이므로 에너지 간격이 유한한 반도체가 된다. 그리고 SWNT (9,0)과 (10,0)에 대한 직경은 각각 0.715 nm과 0.794 nm이고, Fig. 2에 열전도도를 온도 의존성으로 나타내었다.

SWNT의 저온 영역( $T < 20$  K)에서는 온도가 증가함에

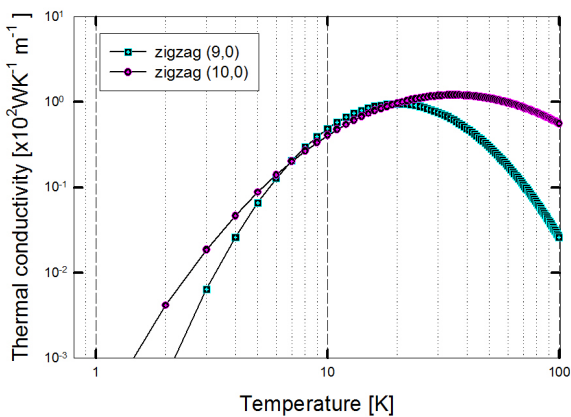


Figure 2. The temperature dependence of thermal conductivity in SWNT. The squares linked by the solid line denote the theoretical results when (9,0) and the circles linked by the solid line denote the theoretical results when (10,0).

따라 열전도도는 단조롭게 증가하는 모습을 보이며, (9,0)보다 (10,0)이 다소 큰 값을 가진다. 이는 저온 영역에서 포논의 평균자유행로가 SWNT의 크기와 관계 있음을 알 수 있으며, de Hass와 Biermasz에 의하여 발견되었다. 저온 영역에서 포논의 반전과정은 열전도도를 제한하는데 효과가 거의 없으며 단지 크기효과가 지배적임을 알 수 있다. 고온 영역( $T < 20$  K)에서는 온도가 증가함에 따라 열전도도는 감소하는 경향을 보이는데 이는 Umklapp 과정에 의한 포논의 평균자유행로의 감소에 기인하는 것으로 보인다. (9,0)은 약 18 K에서 그리고 (10,0)은 약 25 K에서 최대값을 보이며 열전도도는 약  $10^2$ 의 차수를 가지는 것으로 조사되었으며, 양쪽 모두 고온 영역에서 감소하기 전에 최대값을 보인다. (10,0)인 경우에는 고온영역에서 온도의 증가에 따라 열전도도가 감소하고 있지만 그 감소하는 폭의 정도가 (9,0)에 비해서 적은 것으로 나타나는데, 이는 SWNT의 직경이 증가함으로써 열전도의 그레이디언트(gradient)가 증가하기 때문인 것으로 보인다. 또한 SWNT의 직경이 증가할수록 최대값의 위치가 저온에서 고온 쪽으로 이동하는 것으로 조사되었다. 일반적으로 각각 다른 직경과 길이를 가지는 zigzag SWNT의 열전도 값은 포논의 평균자유행로의 길이가 대략 10 nm~1  $\mu$ m 정도이고, 1  $\mu$ m보다 짧은 SWNT에서는 열 전도가 탄동(ballistic)의 거동을 보인다 [24]. 따라서 최대값의 위치가 고온 쪽으로 이동하는 이유는 직경에 따라 SWNT의 탄성이 달라지기 때문인 것으로 생각된다.

#### IV. 결 론

Zigzag SWNT (9,0)과 (10,0)의 열전도도를 구하기 위해서 메모리함수에 Kubo 등식을 사용하였다. 계산 과정에서 발생하는 발산의 문제를 피하기 위해 전파인자는 연속 분수과정으로 전개하였다. 이러한 계산에서 메모리함수는 지금까지 제시된 다른 이론들 보다 많은 상호작용의 효과를 고려할 수 있는 식으로 지금까지의 실험적 연구를 보다 잘 설명 할 수 있을 것으로 기대된다. 이번 연구에서는 이론적 고찰로 제한 하였고 다음과 같은 결론으로 정리하였다.

1. 20 K 이하의 저온 영역에서는 온도의 증가에 따라 열전도도가 단조롭게 증가하며, (9,0)보다 (10,0)이 다소 큰 값을 가지는데 이는 포논의 평균자유행로  $l_{ph}$ 가 직경의 크

기와 관계 있음을 보여준다.

2. 저온 영역에서는 일반적으로  $I_{ph}$ 가 일정한 값을 가지므로 포논의 반전과정은 열전도도를 제한하는데 효과가 거의 없었으며 단지 SWNT의 크기가 영향을 준다.

3. 20 K 이상의 고온 영역에서는 상대적으로 비열이 일정한 값을 가지므로 Umklapp 과정에 의한  $I_{ph}$ 의 감소로 열전도도는 감소하게 되며, 직전에 최대값을 보이면서 SWNT의 직경이 증가할수록 최대값의 위치도 저온에서 고온 쪽으로 이동함을 알 수 있다.

위와 같은 열역학적 특성을 좀 더 이해하여 멀티미디어 제품을 구성하는 핵심 반도체 부품들의 패키지 기술을 더욱 한정된 공간에서 제작할 것으로 기대한다. 그리고 본 연구의 이론적 고찰은 zigzag SWNT의 연구로 한정하였으며, armchair나 chiral 등과 같은 SWNT의 열전도도 연구는 다음의 과제로 남겨두기로 한다.

## 감사의 글

이 논문은 경북대학교의 연구비 지원으로 수행되었으며 이에 감사 드린다.

## 참고문헌

- [1] E. Pop, Nano Research **3**, 147 (2010).
- [2] S. Hasan, M. A. Alam, and M. S. Lundstrom, IEEE Trans. Electron Devices **54**, 2352 (2007).
- [3] A. Bachtold, P. Hadley, T. Nakanishi, and C. Dekker, Science **294**, 1317 (2001).
- [4] O. Chauvet, L. Forro, W. Bacsá, D. Ugarte, B. Doudin, and Walt A. de Heer, Phys. Rev. B **52**, R6963 (1995).
- [5] G. Zhang and B. Li, Journal of Chemical Physics **123**, 114714 (2005).
- [6] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Review of Modern Physics **81**, 109 (2009).
- [7] M. Mccklenburg and B. C. Regan, Phys. Rev. Lett. **106**, 116803 (2011).
- [8] F. Schierz, Nature Nanotechnology **5**, 487 (2010).
- [9] A. Abragam and B. Bleaney, *Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions*, (Clarendon, Oxford, 1970).
- [10] L. Forro et al., *Science and Application of Nanotubes*, (Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 2000).
- [11] M. S. Dresselhouse, G. Dresselhouse, and P. C. Eklund, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, (Academic Press, California, 1996), Chapter 19.
- [12] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570 (1957).
- [13] H. Mori, Progr. Theor. Phys. **34**, 399 (1965).
- [14] A. Kawabata, J. Phys. Soc. Jpn. **29**, 902 (1970).
- [15] P. N. Argyres and J. L. Sigel, Phys. Rev. Lett. **31**, 1397 (1973).
- [16] J. I. Park, H. K. Lee, and H. R. Lee, J. Magnetism **16**, 108 (2011).
- [17] J. I. Park, H. R. Lee, and K. C. Bae, J. Kor. Phys. Soc. **58**, 1644 (2011).
- [18] J. I. Park, H. R. Lee, and S. H. Lee, Jpn. J. Appl. Phys. **51**, 052402 (2012).
- [19] J. I. Park, J. Magnetism **17**, 255 (2012).
- [20] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 777 (2005).
- [21] A. Fert, IEEE Trans. Electron Dev. **54**, 921 (2007).
- [22] H. O. H. Churchill, Phys. Rev. Lett. **102**, 166802 (2009).
- [23] T. Saito, K. Matsushige, and K. Tanaka, Physica B **323**, 280 (2002).
- [24] M. A. Osman and D. Srivastava, Nanotechnology, **12**, 21 (2001).
- [25] H. K. Lee, H. C. Jang, and J. I. Park, J. Korean Vac. Soc. **21**, 171 (2012).

## **Thermal Conductivity of Single-Walled Carbon Nanotube by Using Memory Function**

Jung-II Park<sup>a</sup> and Hai-Du Cheong<sup>b\*</sup>

<sup>a</sup>*Nano-Physics and Technology Laboratory, Department of Physics, Kyungpook National University, Daegu 702-701*

<sup>b</sup>*Division of Liberal Arts, Hanbat National University, Daejeon 305-719*

(Received February 10, 2013, Revised April 14, 2013, Accepted April 26, 2013)

We use Memory function to examine the thermal conductivity as a function of the temperature in single-walled carbon nanotube (SWNT). We determine the Umklapp, normal and SWNT-substrate phonon scattering rate from the computed inverse spin relaxation time. Thermal conductivity increased as the diameter increased when we assumed that the zigzag (10,0) transition was a more dominant phonon scattering than the (9,0) transition.

**Keywords :** Memory function, Single-walled carbon nanotube, Thermal conductivity, Mean free path, Umklapp process, Line-width

\* [E-mail] hdcheong@hanbat.ac.kr