

동향/분석

▶ 글로벌동향브리핑(GTB)

- 최신 브리핑

- 주제별 보기

▶ 기술혁신.과학기술정책... (22719건)

▶ 정보(16106건)

▶ 통신(5530건)

▶ 전기.전자(8037건)

▶ 생명과학(10261건)

▶ 보건.의료(23157건)

▶ 환경(9086건)

▶ 기계(10943건)

▶ 재료(8692건)

▶ 화학공정(6524건)

▶ 화학(7403건)

▶ 에너지.자원(6936건)

▶ 원자력(5800건)

▶ 우주.항공.천문.해양...(6312건)

▶ 건설.교통(5164건)

▶ 농림.수산(7341건)

▶ 물리학(8001건)

▶ 지구과학(5026건)

▶ 수학(124건)

- 인기 브리핑

- GTB 연계 사이트

▶ 과학기술정책동향(S&T GPS)

▶ 분석리포트 (ReSEAT)

▶ 미래정보

GTB



기사 상세보기

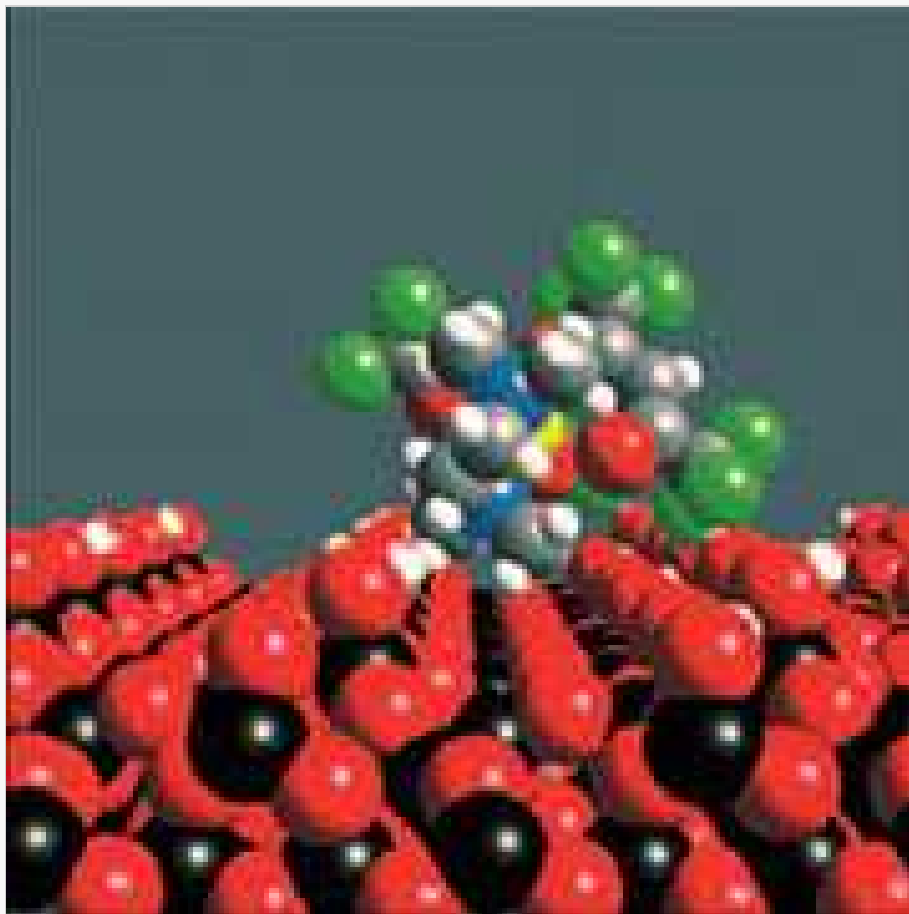


글로벌 동향 브리핑(GTB) Global Trends Briefing

해외 과학기술동향을 전하는 최고의 일일정보 서비스

뜨거운 표면 위에서 분자들의 움직임에 관한 연구

KISTI 『글로벌동향브리핑(GTB)』 2010-02-2



뜨거운 표면 위에서 분자들의 움직임이 분자 동역학 기술(molecular dynamics)을 이용하여 연구되었으며 그 결과 이들의 빠른 움직임과 진동여기(vibrational excitation)를 보여줄 수 있었다는 연구 결과가 최근 발표되었다. 고체 표면에서 일어날 수 있는 화학반응들은 일반적으로 그것의 구조나 이들의 배열 등에 의해 규정된다. 그러나, 높은 온도와 같은 극한 조건에서의 영향은 화학기상증착(chemical vapour deposition, CVD)과 같은 처리 과정이 반드시 고려되어야 한다. 이제 이탈리아의 인수브리아대(University of Insubria)의 Gloria Tabacchi는 파두아대(University of Padua)의 동료 연구진들과 함께 표면 위에서 화학기상증착(chemical vapour deposition, CVD) 전구 분자들의 활성화를 이해하기 위해 수학적 계산법을 이용했다[Fois, E., Tabacchi, G., Barreca, D., Gasparotto, A. & Tondello, E. "Hot" surface activation of molecular complexes: insight from modeling studies. Angew. Chem. Int. Ed. doi:10.1002/anie.200907312 (2010)].

그들은 높은 온도에서 수산화(hydroxylated)를 가진 실리카 표면 위에 8면체 구조를 지닌 구리 복합체의 움직임을 시뮬레이션했다. 이 복합체는 두 개의 펜타네디오네이트 리간드(pentanedionate ligands)와 에틸렌디아민 리간드(ethylenediamine ligand)를 가지고 있으며 실리카 표면 위에 증착되었을 때, CuxO 나노구조로부터 만들어지는 것으로 알려져 있다. 분자 동역학의 제 1원리를 이용하여 Tabacchi와 동료 연구자들은 3개의 서로 다른 형태의 움직임을 발견할 수 있었다. 이들 복합체들은 처음에는 수 피코초(picoseconds) 동안 표면 위에서 느린 전후방 확산을 겪게 된다고 그들은 설명했다. 그 다음에 이 복합체들은 그것들이 표면 위의 아주 작은 영역에 국한되어 존재하고 있을 경우, 대략 16피코초동안 매우 제한된 움직임을 보여주었다. 계속해서 이들 복합체들의 움직임은 급격하게 변화하게 되는데, 큰 구조적인 변화가 일어나는 동안 표면을 가로질러 매우 빠르게 굴러가는 등의 움직임을 보이게 된다.

Tabacchi와 동료 연구자들은 구리-리간드의 결합 길이에 따른 변화를 연구함으로써, 어떻게 이들 복잡한 복합체들이 굽혀지고 탄력을 받을 수 있는지를 조사했다. 그들은 이를 수행하기 위해 뜨거운 표면 위에서 입자가 빠르게 움직이는 동안 발생하는 큰 분자들의 진동과 그 복합체를 활성화시키는 내부 리간드들의 상호작용 등을 조사했다.

그림: 뜨거운 표면 위에서 분자들의 움직임

출처 : <http://www.nature.com/nchem/reshigh/2010/0210/full/nchem.612.html>

qkrwidms1.jpg



프린트



북마크

