C(001)표면에 acrylonitrile분자 흡착에 관한 이론적 연구

이정엽, 조준형*
한양대학교 물리학과
* E-maiil : chojh@hanyang.ac.kr

C(001)표면에 흡착되는 acrylonitrile(C_3H_3N)분자에 대한 결합에너지, 흡착구조 그리고 흡착 반응과정 등을 제일 원리적 전자구조 계산을 이용하여 연구하였다. acrylonitrile 분자의 vinyl group과 C(001)표면을 구성하는 이합체(dimer)가 [2+2] cycloaddition 반응하여 형성된 구조가 acrylonitrile 분자의 nitrile group과 이합체가 반응하여 형성된 구조보다 에너지적으로 안정할 뿐 아니라 반응경로에 따른 흡착 에너지barrier도 작았다. C(001)표면에서 acrylonitrile분자의 흡착 에너지 barrier는 0.4eV로 계산되어 ethylene분자의 흡착 에너지 barrier 0.9eV에 비해 작았다. 이는 C(001)표면에서 acrylonitrile분자가 ethylene분자보다 sticking coefficient가 크다는 실험결과를 설명할 수 있다.