

Monte Carlo study on the structure of simple and transition small metal clusters

맹계열, 이영주, 김세훈
한국과학기술원 화학과

금속 클러스터의 원자구조는 클러스터의 물리적, 화학적 성질을 결정하는 중요한 요소이다. 특히 작은 크기의 금속 클러스터(3-100)들은 크기에 따라 서로 다른 성질들을 보이는 데, 클러스터의 원자구조로 이러한 현상들을 설명하려는 시도가 진행되어 왔다.

불행히도, 작은 크기의 금속 클러스터(3-100)들은 일반적인 분광학적인 방법으로 구조를 결정하기에는 너무 크고, 전자 현미경 같은 macroscopic method로 결정하기에는 너무 작다는 결점을 가지고 있다. 따라서, 적당한 포텐셜을 도입하여 분자모의실험을 통해 구조를 밝히려는 시도가 계속되고 있다.

구조적 최적화는 simulated quenching을 통해 수행하였고, fcc bulk 구조를 가지는 5-25개까지의 금속 클러스터(Ag, Au, Cu, Ni, Pd, Pt, Al, Pb)에 대해 모의실험 하였다. 각 크기별로 여러 개의 isomer를 얻을 수 있었는데, energy와 symmetry를 고려하여 가장 안정한 원자구조를 결정하였다.

실제로 크기에 따른 물리적, 화학적 성질들의 차이는 이러한 isomer의 존재에 의존하는 요인이 클 것이라 예상되며, 그에 따른 전자 구조의 변화에도 원인이 있을 것이다.