Surface chemistry study of ethanol on WO_3 nanowires and ZnO nanowires

곽근재, 용기중*
포항공과대학교 화공과
(kyong@postech.ac.kr*)

1차원 구조의 나노물질의 센서소자로써 응용성에 앞서 특정분자가 1차원 구조의 나노물질의 표면에서 어떠한 반응 메커니즘을 가지게 되어 전기적, 화학적, 광학적 성질이 변화하는가를 연구하는 것은 큰 의미가 있다. 에탄올의 WO_3와 ZnO 1차원 구조에서 표면 반응에는 ethoxy와 hydrogen으로 분해 흡착하는 금속산화물의 공통점과 산소결함의 다소, 산소결함과 ethoxy의 결합세기에 의해 탈착물의 양과 탈착온도가 달라지는 구조적 차이가 존재한다.
WO_3의 1차원 구조에서 ethoxy는 C(2X2) 구조에 의해 생성되는 1.말단의 산소가 없는 W양이온과 2. 말단의 산소가 제거된 W양이온 두가지 형태에 흡착된다. 1의 경우 흡착된 ethoxy는 다시 hydrogen과 결합하여 245K~ 280K에서 에탄올이, 흡착된 hydroxyl이 결합하여 243K~280K에서 물이 탈착된다. 2의 경우 흡착된 ethoxy가 상대적으로 강한 흡착에너지에 의해 ß-hydride elimination에 의해 C-O결합이 해리되면서 650K에서 에틸렌이 탈착되었다.
ZnO의 1차원 구조에서 양이온(Zn)와 결합한 ethoxy는 WO_3와 마찬가지로 hydrogen과 결합, 250K~278K에서 에탄올이 탈착되었고, 물은 탈착되지 않았다. 산소결함에 결합한 ethoxy는 ß-hydride elimination에 의해 C-O결합이 해리되면서 517K에서 에틸렌이 탈착되었으며, ß-hydride elimination에 의해 생성된 표면 수소원자들이 결합하여 517K에서 수소가 탈착하였다.