

Tuning Surface Chemistry and Intermolecular Interaction to Enhance the Enantiospecificity of Chiral Cu Surfaces

송호성, 한정우*
서울시립대학교
(jwhan@uos.ac.kr*)

High Miller index 방향으로 노출된 금속 표면에서는 카이랄 분자를 분리할 수 있는 카이랄성 구조가 나타난다. 이 때, 다른 종류의 금속 원자를 도핑함으로써 표면의 카이랄 분리성을 더욱 높일 수 있다. 우리는 여러 종류의 아미노산들의 순수 Cu(643)^s 표면과 Pd 또는 Au가 도핑된 Cu(643)^s 표면에서의 카이랄 분리성을 Density functional theory를 이용하여 연구하였다. 알라닌(alanine) 거울상 이성질체 각각의 가장 안정한 상태의 흡착 에너지의 차이는 매우 작았다. 그러나 세린(serine)과 시스틴(cysteine)의 거울상 이성질체 각각의 흡착 에너지는 상당한 차이가 있는 것으로 나타났다. μ_3 흡착 기하학 구조에서 세린과 시스틴은 조사된 표면에서의 카이랄 분리성이 크지 않았지만, μ_4 흡착 기하학 구조에서는 카이랄 분리성이 커짐을 알 수 있었고, 이러한 경향은 Au가 도핑된 표면에서 더 많이 나타났다. 표면에서의 카이랄 분리성에 분자간 수소결합과 흡착 위치간의 반응이 얼마나 영향을 미치는지 살펴보기 위해 Cu(643)^s 표면 이외에 Cu(421)^s 표면과 Cu(531)^s 표면에서도 추가적인 연구를 진행하였다. 이 결과들은 카이랄 표면에서 아미노산의 카이랄 분리성을 증가시켜 카이랄 분자들을 쉽게 분리시킬 수 있는 방법들에 대한 유용한 정보를 제공해 줄 것이다.