

기능성 분자재료의 발전 방향

신 동 명¹, 강 도 열²
 홍익대학교 화학공학과¹, 홍익대학교 전기제어공학과²

A Scope of Functional Molecular Materials

Dong-Myung Shin,¹ Dou Yol Kang²
 Department of Chemical Engineering,¹ Department of Electrical and Control
 Hong Ik University

Abstract

In developing microscopic scale electrical and electronic devices, molecular level insulators and functional electric conductors are fundamental. The properties of the electrical-insulating thin film materials are very much dependent on defects and electron transfer rate. There are number of companies which try to reduce defects and control electrical conductivity. Functional electrical conductors are more demanding subject in electrical fields. Reorganization energy around the sites that generate the electrons and holes are very important for the electron transfer in the organic thin layers.

1. 서론

전기전도도 특성에 따른 기능성 분자재료는 절연성 재료와 도전성 재료로 나눌 수 있다. 이들은 각각의 용도에 맞게 그 재료의 특성을 발전시켜 왔다. 현재 전기 전자 산업에서 가장 필요로 하고 있는 재료는 고밀도화 되고 기능성이 많이 부여된 박막이다.

2. 절연재료

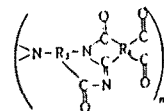
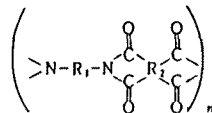
전기 절연재료는 고전압에서 필요한 고순도의 절연 물질과 첨단 전자 소자에서 요구되는 절연 물질로 나누어 볼 수 있다. 이들의 용도는 여러가지 들을 수 있으나 송전 절연재나 레지스터재가 특히 분자 단위의 개발을 필요로 하고 있

다. 이러한 절연 물질을 분자막으로 사용할 경우 그 두께가 수 Å에서부터 수 μm까지 다양하나 점차 소자의 두께는 얇아지리라 예상된다. 절연재료가 얇아짐에 따라서 기계적으로나 화학적으로 변형이 되기 쉽다. 따라서 절연 특성이 좋아지게 하기 위하여는 열에서 잘 견디어야 하고, 막 전하 밀도를 적게 만들어야 한다. 이와 같은 특성을 갖추면서 유전율이 적은 고절연성의 초박막을 제작할 수 있어야 한다. 실질적으로 절연막이나 기능성막들을 분자 단위까지 가공한다는 것은 매우 어렵고, 그에 필요한 기술도 한정되어 있다. Langmuir-Blodgett(L-B)법을 이용한 전기절연 초박막이 이중 한가지 방법이다.

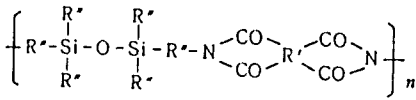
L-B법을 이용한 박막은 대부분 내열성이 좋지 않다. (200°C) 이것은 L-B법에 필요한 알길기가 탄화수소로 되어 있어서, 이들이 열에 비교적 쉽게 변형되기 때문이다. 따라서 내열성이 좋은 절연재료로 polyimide 수지를 많이 사용하고 있다. polyimide는 전자가 분자내에 비편재되어 있어 매우 안정하다. 현재 쓰이고 있는 절연 물질은 아래와 같다.

절연성 물질의 화학 구조

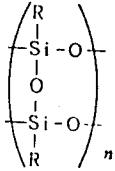
a) 고순도 polyimide계 수지



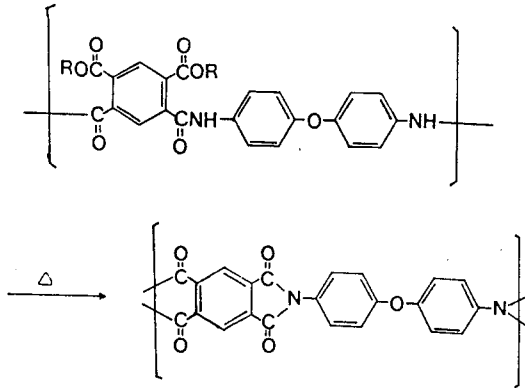
b) polyimidosilicone



c) Ladder silicone polymer



d) 내열성 절연초박막



3. 전자 전달 이론

전기 전도도가 좋은 유기 박막은 소자의 용량이 증가할수록, 소자의 크기가 작아질수록 필요하게 된다. 전기전도도를 좋게 하기 위해서는 자유전자가 발생되거나, 전자가 움직이기 시작할때 전자 자체와 주위의 energy를 높여 줌으로써 전자가 잘 밀려나갈 수 있게 해 주는 것이 중요하다. 다음 (1)식에서 보는 바와 같이 전자가 움직이는 속도

$$k_{et} = \frac{2\pi}{h} H_{DA}^2 \left[\frac{1}{(4\pi \lambda R)^{1/2}} \right] \exp[-(\Delta G^0 + \lambda)^2 / 4\lambda RT] \quad (1)$$

(k_{et})는 분자 level에서 분자의 구조적 변화 및 자유에너지의 변화량에 의존하는 하는 것을 알 수 있다. 위식에서 H_{DA} 는 distance dependence of electronic coupling matrix element이고 λ 는 전체적인 핵 reorganization energy이다.

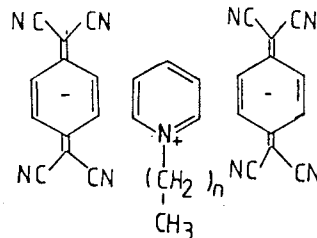
λ 는 주위의 용매들에 의한 것과 분자 자체의 구조 변화에 의한 것이다. 현재까지 분자들 자체의 overlap에 의하여 conduction band가 늘어나고 band gap이 줄어들음에 의하여 전자전달을 효율적으로 하는 것만을 생각해 왔는데, 전자가 발생하여서 이들 전자와 주위의 분자들이 얼마만큼 reorganized 되어야 하는가도 전자의 움직임에 상당히 중요하기 때문에 이들도 고려하여야 한다.

4. 전자 전달 거리

고정된 매질에서 전자 주계와 받게 사이에서의 전자 이동을 약 15Å 정도 가능하다. 이 거리는 상당히 큰 것으로 전자는 환경이 잘 주어지면 매질의 종류에 상관없이 위 정도의 거리는 통과할 수 있다는 것을 뜻한다. 그렇다면 어떻게 해서 어떤 매질에서는 쉽게 또 빨리 전자가 이동하고 어떤 매질에서는 잘 이동하지 않는가 하는 문제가 있다. 같은 조건하에서 전자의 이동은 전자가 발생한 주위에 극성인 분자들이 모여 있게 되면 재정돈하는데 많은 energy가 필요하게 되고, 따라서 전자의 이동은 매우 늦다. 그 대신 monolayer에서와 같은 매질의 중간에서 전자를 발생시키면, 전자를 주는 부위가 대부분 수소성이고 organization에 필요한 에너지가 적게 들기 때문에 비교적 빠르게 탄화수소 chain을 따라서 10~12Å 정도를 통과할 수 있게 된다.

5. L-B막에서의 전도도

(N-dodecyl pyridinium)-TCNQ(1:2) 착체의 경우 L-B막의 수직 방향의 도전율이 10^{-14} (s/cm)의 절연성을 갖고 있고 수평방향은 10^{-7} (s/cm)로 반도체적인 성질을 갖고 있다. 이



러한 L-B막의 수평방향에서의 도전율을 결정하는데는 착체 domain내의 분자 overlap이 중요하지만, L-B막 수직 방향의 도전율은 거리가 중요하다. 따라서 수직방향의 도전율도 알 길이의 길이를 탄소수가 8 이하로 줄이게 되면 도전율은 상당히 증가할 것으로 예상된다.

<참고문헌>

1. Masakazu Uebita, 고분자 36, 286 (1987)
2. Hiroyuki Anzai, 화학공학 48, 212 (1984)
3. E. Sacher, IEEE Trans Electr. Insul, EI-14 85 (1979)
4. 손병청, 정순옥, 손태원, 강훈, 강도열,
전기전자재료학회지, 1, 303 (1988)
5. Michio Sugi, Molecular Electronic Devices
F.L. Caster, R.C. Siatkowski, H. Wohltjen (eds)
Elsevier p441. 1988