

# 水面上 單分子 脂質膜에서 쌍극자 모멘트의 시뮬레이션

## A Simulation of the Dipole Moments in Monolayer of Lipids on a Water Surface

이원재\*, 최명규\*\*, 김상걸\*\*\*, 이호식\*\*\*\*, 김태완\*\*\*\*\*, 강도열\*\*\*\*  
경원전문대학 전자과\*, 경원전문대학 전기과\*\*, 광운대학교 전기공학과\*\*\*,  
홍익대학교 전기공학과\*\*\*\*, 홍익대학교 물리학과\*\*\*\*\*

Won-Jae Lee\*, Myung-Ku Choi\*\*, Sang-Keol Kim\*\*\*, Ho-Sik Lee\*\*\*\*, Tae-Wan Kim\*\*\*\*\*, Dou-Yol Kang\*\*\*  
Dept. of Electronics, Kyungwon College\*, Dept. of Electrocitcy, Kyungwon College\*\*, Dept. of Electrical  
Eng., Kwangwoon University\*\*\*, Dept. of Electrical Eng., Hongik University\*\*\*\*,  
Dept. of Physics, Hongik University\*\*\*\*\*

### Abstract

Monolayers of lipids on a water surface have attracted much interest as models of biological membranes, but also as precursors of multilayer systems promising many technical applications. They exhibit very interesting physico-chemical properties as two-dimensional and interfacial systems. Until now, many potential methodologies have been developed in order to gain a better understanding of the relationship between the structure and function of the monolayers.

**Key Words(중요용어) :** Langmuir-Blodgett(LB), DLPE, DMPE,

### 1장 서론

현재 널리 사용되고 있는 무기 재료에 의한 반도체나 메모리 소자 등의 연구는 상당한 발전을 거듭해 왔으나 최근 '분자 레벨의 소자'라는 새로운 개념의 소자가 주목받고 있다. 이러한 분자 소자는 분자 단위 또는 분자 집합체 단위로서, 有機 단분자막에 외부로부터 입력되는 자극 즉, 열, 압력, 전계, 광등을 인가할 경우 구성 분자의 動的 거동이나 단분자 膜內의 전자 이동 등에 의해 분자막의 구조나 상태가 변화되며, 이러한 정보를 외부 출력으로 전기적으로 검출하는 것이 분자 단위의 전자 소자를 실현시킬 수 있는 기본 기술이라 할 수 있다.<sup>1)~8)</sup>

최근에는 분자 소자, 바이오 칩 등을 위한 소자 구축기술의 하나로서 Langmuir-Blodgett(LB)막이 각광 받고 있다. LB막이란 수면 위에 유기 단분자를 배열, 配向시켜, 이를 기판 위에 한층씩 누적시킨 超薄膜을 말한다. 이러한 LB의 제작 기법은 배열과 배향을 자유롭게 할 수 있으며, 막의 두께를 단분자 단위(A)로 쉽게 제어할 수 있다는 장점 때문에 많은 연구가 시도되고 있다.<sup>5)~7)</sup>

또한, 공기/수면의 계면상 단분자막 또는 LB막에

의해 고체 기판상에 누적된 LB막의 물성을 측정하는 것은 분자 단위의 물성을 파악하는 것이며, 이러한 물성 연구를 통하여 분자 레벨의 기능성을 발견하는 것은 앞으로 분자 전자 소자를 실현하는데 대단히 중요한 의미를 갖는다.

특히, 수면상 분자 배열의 변화 과정을 확인하는 것은 매우 중요한 기초 연구가 된다.

### 2장 사용 물질과 실험장치

본 실험에서 사용한 LB 성막 물질은 L- $\alpha$ -dilaurylphosphatidyl ethanolamine(DLPE), L- $\alpha$ -dimyristoylphatidyl ethanolamine( DMPE )인 疏水基로서 알킬기를 갖는 지질막이며, 그림 1과 같은 구조를 갖는다. DLPE와 DMPE는 각각 CH<sub>2</sub> 를 11개, 13개 2분의 알킬(Alkyl)기를 갖는 2중 지질막으로 구성된다. DLPE와 DMPE를 CHCl<sub>3</sub> 와 Ethanol 을 9:1(부피비)로 한 용매에 녹여 3×10<sup>-3</sup> mol/l 의 농도로 하여 사용하였다.

또한 그림 2는 본 실험에 이용된 측정 장치의 개략도이다. 여기서 하부 전극은 수면안에 설치하였으며, 상부 전극은 수면 위에 약 1mm 정도 거리를

두고 성막 물질 위에 설치하여 변위 전류를 측정하였다. 그리고,  $\pi$ -A 측정시  $\pi$  값은 필름 balance meter를 이용하였고, 측정시 콘트롤값과 실험 데이터값은 모두 컴퓨터를 통해 실시하였다.

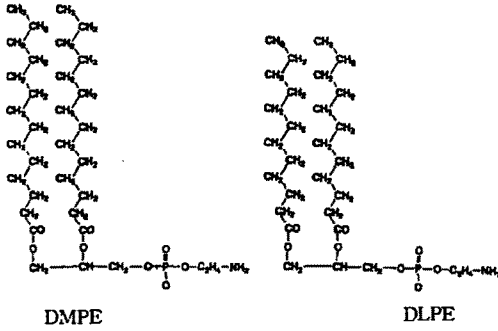
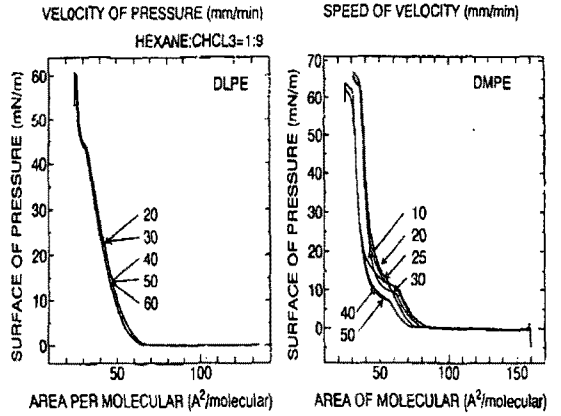


그림 1. DMPE 와 DLPE 의 물질 구조.

되리라고 추정되며, 추후 더욱 연구되어야 할 것이다.



(a) DLPE

(b) DMPE

그림 3. 압축속도를 변화 시켰을 때의  $\pi$ -A 관계.

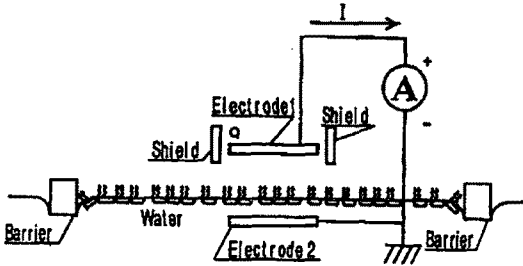


그림 2. 실험 장치의 개략적인 구조.

### 3장 실험 결과 및 검토

#### 3-1. 압축 속도에 대한 $\pi$ -A의 변화

그림 3의 (a), (b)는 DLPE와 DMPE의 물질을 이용하여 배리어(barrier)의 여러 압축 속도에서 측정 한  $\pi$ -A 등온선이다. DLPE의 경우, 압축속도를 20, 30, 40, 50, 60mm/min으로 변화시켰을 때  $\pi$ -A 등온선 변화를 측정 한 결과이다. DLPE는  $\pi$ -A 등온선의 측정 곡선이 속도의 변화에도 불구하고 일치하고 있어, 이 결과는 배리어의 압축 속도가  $\pi$ -A 등온선 측정시 영향을 주지 않는다고 생각된다. 또한 DMPE의 경우는 相轉移 위치와  $\pi$ -A 등온선 곡선의 속도 변화에 대한 결과가 약간의 차이가 있다. 이러한 차이는 측정시 성막 물질을 수면 상에 전개 할때, 수면 상에 물질을 뿌릴 때, 매우 적은량인  $\mu$  정도로 조절하기 때문에, 물질량의 부정확성에 기인

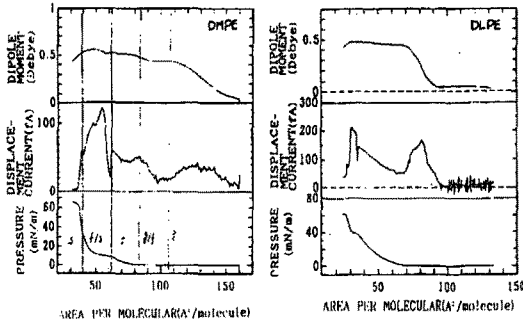
#### 3-2. $\pi$ -A, $\pi$ -I, $\pi$ -D의 관계

그림 4에 (a),(b)는 barrier를 일정하게 일정속도로 압축할 때, 표면압, 변위 전류를 관측한 결과이며, 변위 전류에 의해 쌍극자 모멘트(Dipole Moments)를 구하여 그린 것이다. DMPE, DLPE에 관해 살펴보면,  $\pi$ -A와 변위 전류의 변화에 대해 그림 4의 (a)와 같이 나누어 생각할 수 있다. 즉, gas(g) : 기체 상태, gas/fluid(g/f) : 기체와 액체의 혼합 상태, fluid(f) : 액체 상태, fluid/solid(f/s) : 액체와 고체의 혼합상태, solid(s) : 고체 상태로 추정된다.

이때, 그림 4의 (a)에서  $\pi$ -I (표면압-변위전류) 결과는  $160\text{\AA}^2$ 에서 부터  $30\text{\AA}^2$  까지 50mm/min의 일정 배리어 속도로서 압축하는 동안 DMPE 분자막으로 부터 발생된 변위 전류를 나타낸 것이다. 변위 전류 측정 결과를 보면 각각의 상전이 위치가  $\pi$ -A 측정보다 세밀하게 보여진다.

즉, g/f  $\rightarrow$  f (약  $83\text{\AA}^2$ ), s/f  $\rightarrow$  s (약  $45\text{\AA}^2$ )의 상전이가  $\pi$ -A 특성에서는 보이지 않지만, 변위 전류 측정에서는 명확하게 보이고 있다. 또한, 그림 4 (b)의 DLPE에서도 같은 결과를 볼 수 있다.

이와 같은 결과로 볼 때,  $\pi$ -I의 주요한 특성 중에 하나는  $\pi$ -A에서의 변화는 매우 적게 보이지만  $\pi$ -I에서는 변화가 뚜렷하게 보인다는 것이다. 따라서,  $\pi$ -I의 측정 즉, 변위 전류의 측정은 상변이 현상을 매우 효과적으로 판단할 수 있다.



(a) DMPE (b) DLPE

그림 4. 수면상 성막 물질의  $\pi$ -A,  $\pi$ -I,  $\pi$ -D의 관계.

3-3. 실험 결과와 시뮬레이션

압축 배리어를 등속도로 압축하는 경우, 분자 운동에 의해 상부 전극에 유도되는 전하는

$$Q = -NS\mu/d \quad (1)$$

여기서,  $N$ 은 분자밀도,  $S$ 는 전극면적,  $d$ 는 상부전극과 분자 사이의 거리이고,  $A$ 는 단분자 점유면적,  $\mu$ 는 쌍극자 모멘트이며, 상부 전극에 흐르는 변위 전류는

$$I = -dQ/dt = S/d(\mu \cdot dN/dt + N \cdot d\mu/dt) = (S/d) \cdot (a/A)(-\mu/A + d\mu/dA) \quad (2)$$

여기서,  $a(=dA/dt)$ 는 배리어 속도이다. 식 (2)의 첫째 항은 분자가 집합되면서 나타나는 것이며, 두 번째 항은 쌍극자 모멘트의 변화에 의한 항이다.

그림 4 (a), (b)에 나타낸  $\pi$ -D(표면압-쌍극자 모멘트)는 식 (1)을 변형하여 쌍극자 모멘트를 계산하면 쌍극자 모멘트가 g/s 상태에서부터 상승하여 f와 f/s 상태에서 DMPE는 40 A<sup>2</sup>에서 0.55D, DLPE는 0.5D로 측정 된다. 한편, f 상태와 s 상태에서 구한 쌍극자 모멘트값은 M. MOHWALD가 구한 값과 비교하면 아래와 같이 나타난다.

본 실험에서 측정된 결과에서 고체 상태의 쌍극자 모멘트 값은 MOHWALD의 결과와 거의 일치하고 있으며, 액체 상태의 결과는 약간의 차이를 나타내고 있다.

표 1. 고상과 액상에서의 쌍극자 모멘트

	고상 (solid ; s)		액상 (fluid ; f)	
	DMPE	DLPE	DMPE	DLPE
MOHWALD	0.55D	0.5D	0.35D	0.37D
본 실험	0.5D	0.5D	0.5-0.4D	0.5-0.4D

그림 5는 각각 쌍극자 모멘트의 상태를 가정하여 그린 것이다. 이러한 가정 하에 액체 상태의 쌍극자 모멘트를  $\mu_2$ , 고체 상태의 쌍극자 모멘트를  $\mu_1$ 이라 할 때, f/s공존시 즉, 액체(fluid) 상태와 고체(solid) 상태가 공존하는 경우를 생각해본다. f/s 공존시에 초기에는 fluid 상태가 100% 이어서, 분자수  $N_2 = S/A_2$ ,  $\mu = \mu_2$ 가 되고, f/s 공존시의 끝에서는 즉, solid 상태 초기는  $N_1 = S/A_1$ ,  $\mu = \mu_1$ 이다. 단, f/s 상태가 fluid 상태에서 solid 상태로 직선 변화한다고 본다.

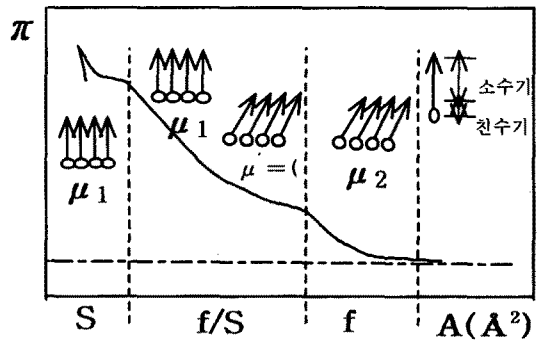


그림 5. 고체상태, 액체/고체 혼재 상태, 액체 상태의 단분자 상태와 쌍극자 모멘트의 가정.

이때, f/s 상태의 쌍극자 모멘트는

$$A_1 N_1 + A_2 N_2 = N_0 A \quad (3)$$

그리고, A와 N사이에는

$$N_1 + N_2 = N_0 \quad (4)$$

$$N_1 + N_2 = N_0 \quad (5)$$

$$(A_1 N_1 + A_2 N_2)/(N_1 + N_2) = A \quad (6)$$

또한,

$$f_2 = (A - A_1)/(A_2 - A_1) \quad (7)$$

이 된다. 따라서 정리하면 식(3)은

$$\mu = (\mu_2 - \mu_1)A/(A_2 - A_1) + (A_2\mu_1 - A_1\mu_2)/(A_2 - A_1) \quad (8)$$

이다. 결국 식 (2)에 식 (4)에 대입하면

$$I = (S/d) \cdot (a/A^2) \cdot (A_1\mu_2 - A_2\mu_1)/(A_2 - A_1) \quad (9)$$

이 성립된다.

윗 식에 고체 상태의 쌍극자 모멘트  $\mu_1$  값은 그림 4의 (b)에서 구해진 값 즉, 0.5D를 이용하고,  $\mu_2$ 를 각각 0.4D, 0.5D, 0.6D를 넣어 시뮬레이션 시켜 본다.

그림 6의 DLPE에서 액체 상태의 쌍극자 모멘트 값을 여러 가지로 넣어 시뮬레이션 할 때,  $\mu_2$ 를 0.5D로 할 때가 관측된 변위 전류와 가장 잘 일치하고 있다. 이는 앞의 그림 4에서 측정된 쌍극자 모멘트와 일치하는 것으로 보아, 식 (9)는  $f/s$  공존시에 이용할 수 있는 식으로 판단된다.

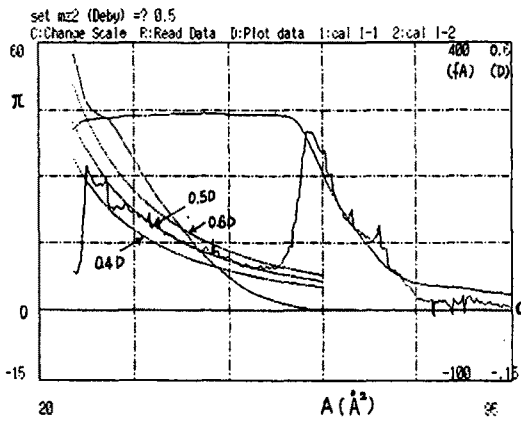


그림 6. 쌍극자 모멘트를 변화시켰을 때의 시뮬레이션 결과.

## 5장 결론

본 연구에서 맥스웰 변위 전류 기술과 필름 균형 기술(film balance technique)에 의해 공기/수면상의 지질막 상변위 거동을 관측했다. 측정할 수 없는 낮은 표면 압력 범위인 기체 상태의 변화과정은 변위 전류의 측정으로서 검출할 수 있다. 즉, 액체 상태와 고체 상태가 혼합된 곳에서의 극성 질서는 변위 전류의 발생으로부터 확실히 구분된다. 또한, 보다 더 fluid/solid 상태전이를 압축하면, 고체 상태의 도메인(domains)이 형성된다.

결국, 변위 전류로부터 지질막의 상전이 변화를 명확하게 구분할 수 있다는 것을 확인할 수 있었다.

그리고, 시뮬레이션을 통하여 fluid/solid 상태전이 할 때의 변위 전류를 예측할 수 있는 시뮬레이션 식을 유도하여 검토하였다.

## Reference

1. G. M. Bell, L. L. Combs and L. J. Dunne, *Chem. Rev.* **81**, 15, 1981.
2. H. Mohawald, *Thin solid Films*, **159**, 1, 1988.
3. O. albrecht, H. Gruler and E. Sackmann, *J. Physique*, **30**, 302, 1978.
4. A. Ulman, *Ultrathin Organic Films*, 1991.
5. M. Iwamoto and Y. Majima, *J. Chem. Phys.*, **94**, 5135, 1991.
6. Y. Majima and M. Iwamoto, *Rev. Sci. Instrum.*, **62**, 2228, 1991.
7. Y. Majima and M. Iwamoto, H. Naruse, T. Noguchi and H. Fuwa, *Nature*, **353**, 745, 1991.
8. M. Iwamoto and Y. Majima, H. Naruse, T. Noguchi and H. Fuwa, *J. Chem. Phys.*, **95**, 8561, 1991.