

【SS-06】

아세틸렌 유도체들의 Si(100)-(2×1) 위의 흡착 구조

강 현, 김기여*, 정석민**

서울대학교 화학부, *포항공과대학교 화학과, **진북대학교 물리학과

아세틸렌 분자는 상온에서 Si(100)-(2×1) 표면 위에 흡착할 경우 3-4 가지의 다양한 구조들을 갖는 것으로 알려져 있다. 본 연구에서는 아세틸렌 유도체인 2-butyne ($\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CCH}_3$), phenylacetylene ($\text{HC}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_5$), 1-phenyl-1-propyne ($\text{H}_3\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}_6\text{H}_5$)가 Si(100)-(2×1) 표면에 흡착하는 구조를 연구하였다. 주사터널링 현미경(STM)과 Cs^+ 반응성 이온산란(RIS) 실험을 통하여 분자의 흡착구조를 조사하고, 밀도함수이론(DFT) 계산을 사용하여 예상되는 흡착 구조 및 흡착 에너지를 구하였다. 2-Butyne의 경우 분자의 $\text{C}\equiv\text{C}$ 작용기와 표면의 Si dimer가 결합하는 소위 di- σ 흡착구조만이 관측되었다. Phenylacetylene과 1-phenyl-1-propyne은 $\text{C}\equiv\text{C}$ 작용기 이외에 페닐 작용기를 추가로 가지고 있는 bifunctional 분자의 예이다. 이 분자들은 두 가지 흡착구조를 갖는 것으로 나타나며, 하나는 2-butyne 경우와 유사한 di- σ 흡착구조이고 다른 하나는 "valley-bridge" 구조이다. 후자의 경우 $\text{C}\equiv\text{C}$ 작용기와 페닐 작용기가 표면의 두 Si dimer row에 걸쳐서 결합되어 있는 독특한 구조를 보인다.