

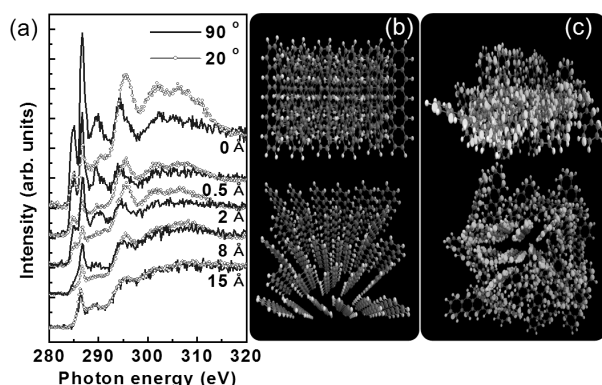
## 자기조립단층막 분자의 입체적 구조에 의한 유기 반도체의 결정화 제어

박지용

광주과학기술원, 신소재공학과

표면을 구성하는 유기 분자의 입체적 구조가 그 위에서 일어나는 다른 분자의 결정화 메커니즘에 미치는 영향에 관한 연구에 대해 발표할 것이다. 연구에서는 고체 표면에 비틀린 구조를 가진 방향족 화합물의 자기조립단층막(Self-assembled monolayer, SAM)을 제조하였다. 이 SAM의 특징은 그것을 구성하는 분자의 입체적 배향이 표면의 흡착한 분자들이 결정핵을 형성하고 또 큰 결정으로 성장하는 메커니즘에 영향을 미치도록 디자인되었다는 점이다. SAM 분자는 2-바이나프톨(BN)을 이용하여 합성되었는데, 두 개의 나프탈렌 분자가 1 및 1' 탄소간의 결합을 통해 비틀린 채로 붙어 있고 분자들의 2,2' 위치 하이드록시 그룹의 실란화 반응을 통해 실리카 표면에 SAM을 형성할 수 있었다. 유기 반도체 분자인 평면형 방향족 아센(aromatic acenes) 분자를 BN SAM 표면에 증착시킬 때, 반도체 분자들은 BN 과의 파이-파이 상호작용에 의해 흡착이 촉진되지만, SAM을 구성하는 나프탈렌 분자들이 서로 불규칙적인 방향 및 각도로 존재하므로 거기에 흡착된 서로 이웃한 반도체 분자들은 상호 평행한 배열을 가진 집합체를 형성하기 힘들고 단량체로 존재하며 결정핵을 쉬이 생성하지 못한다. 실제적으로 펜타센을 매우 느린 속도로 증착한 실험에서 결정핵 형성 밀도가 현저히 감소하였음을 보았고, 생성된 결정들의 크기는 다른 표면에서보다 매우 큰 결과를 얻었다. 표면에 잘 흡착되면서도 단량체로 존재하는 분자들은 흡착 탈착이 용이하여 확산이 잘 됨으로써 생성된 결정핵이 빠르게 성장하는 조건을 제공한다.(본 연구는 광주과학기술원 분자레벨집적화기초연구사업의 지원을 받았음)

## Initiation of Collapsing Pentacene Crystal by Au

임규욱<sup>1,2</sup>, 강태희<sup>2</sup>, 정석민<sup>1</sup><sup>1</sup>포스텍 물리학과, <sup>2</sup>포항가속기연구소

The early stage of the Au adsorption on the pentacene crystal has been studied by photoemission and x-ray absorption spectroscopy. Metal contacts with gold on organics are an essential factor in organic electronics. The significant feature on these interfaces is deterioration of the organic crystals during the formation of the Au layer on it. Phenomenological findings have shown that this degradation is related with the Au diffusion. The unveiled key challenge is to probe dynamic details of the microscopic evolution of the organic crystal when the atomic Au is introduced. Here, we report how the collapse of the pentacene crystal is initiated even by a few Au atoms. Our results indicate that the gentle decoupling of intra and inter-molecular  $\pi-\pi$  interactions causes the localization of the lowest unoccupied molecular orbital as well as the removal of cohesive forces between molecules, leading to the subsequent crystal collapse.