

【S-12】

Si(100) 표면에서 아세틸렌 유도체의 반응구조

김기여, 강 현*

포항공과대학교 화학과, *서울대학교 화학과

주사터널링현미경, Cs^+ 반응성 이온 산란법과 이론 계산을 통하여 Si(100) 표면에서의 아세틸렌 유도체의 일종인 2-butyne과 phenylacetylene의 흡착구조를 연구하였다. Cs^+ 반응성 이온 산란법으로부터 2-butyne과 phenylacetylene이 해리 되지 않고 표면에 흡착된다는 것을 알아냈다. 주사터널링현미경 실험을 통하여 2-butyne은 한가지 반응구조를 보이며, 실리콘의 이합체 바로 위에 흡착된다는 것을 관측했다. phenylacetylene은 두가지 반응구조를 나타낸다. 첫 번째 구조는 phenylacetylene의 삼중결합이 실리콘의 이합체 위에 흡착되는 구조다. 두 번째는 phenylacetylene의 삼중결합이 실리콘의 두 이합체 사이에서 공유결합을 하며 삼중결합의 축이 이합체의 축과 평행하게 흡착되는 구조다. 2-butyne과 phenylacetylene의 흡착에너지를 이론적으로 계산하였고, 그 계산 결과는 위 실험 결과를 뒷받침해 주었다. 실리콘 표면에서 아세틸렌은 세 가지의 결합구조를 보인다. 결과적으로, 아세틸렌 유도체는 그 작용기에 따라서 실리콘 표면과 다양한 결합구조를 나타낸다는 것을 알 수 있었다.