

Si(001)2×1 표면 위 대칭적 전하분포 원자쌍과 1,3-butadiene의 고리화첨가 반응(cycloaddition reaction)

백재윤, 박종윤

성균관대학교 물리학과

본 연구는 STM을 이용한 불포화탄화수소 분자와 실리콘 표면 원자의 고리화첨가(cycloaddition) 반응에 대한 것이다. 현재까지 보고된 Si(001)2×1 표면 위 BD(1,3-butadiene)의 다양한 분자흡착구조 중 intra-dimer bridge구조는 최근에 보고되었으며 그 흡착과정은 stepwise 반응으로 보고되어왔다. 이는 BD분자와 전자가 풍부한 그리고 부족한 실리콘원자 쌍(비대칭 전하분포 원자쌍)의 고리화첨가 반응을 고려한 결과라 할 수 있다. 그러나 실제 실리콘 dimer는 실온에서 ~THz의 진동수를 가지고 flip-flop 운동을 하고 있기 때문에 그 분자 흡착과정 중 실리콘 표면원자의 전하분포를 명확히 설명하기에 어려움이 있어왔다. 따라서 본 연구에서는 소량의 BD분자를 흡착시킨 후 흡착 주위에 국소적 c(4×2)를 형성시켜 그 flip-flop 운동을 정지시킨 후 첨가된 BD분자의 흡착 선택성을 연구하였다. 결과적으로 intra-dimer bridge구조의 고리화첨가 반응은 전자가 부족한 두 개의 down-dimer 쌍과 이뤄지는 것을 관찰하였다. 따라서 본 연구는 BD분자와 Si(001)2×1 표면의 intra-dimer bridge 구조의 고리화 첨가반응은 기존의 이론적 접근에 의한 stepwise 반응과정이 아닌 concerted 반응으로 설명되어짐이 더욱 타당함을 제안한다.