

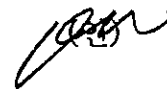
연차 보고서(2차)

사업명	KAIST Grand Challenge 30 Project		
과제명	(국문) 자기조립 연성물질의 결함 이해 및 이용		
	(영문) Understanding and application of defects in self-assembled soft matters		
연구책임자	윤동기	소 속	나노과학기술대학원
총수행기간 (1단계)	2017. 01. 01. ~ 2021. 12. 31. (5년)		
당해연도 협약기간	2018. 01. 01. ~ 2018. 12. 31. (1년)		
당해년도 사업비(원)	20,000,000		

자체연구협약서(KAIST Grand Challenge 30 Project)제5조에 의거하여
연차보고서 2부를 제출합니다.

2018 년 12 월 18 일

연구책임자: 윤동기



한국과학기술원 총장 귀하

I. 해당 연도 추진 현황

I-1 기술개발 추진 내용

연구 내용	연구 결과
상전이 거동을 통한 결합의 발현 및 소멸 관찰	<ul style="list-style-type: none"> ■ 물 유체기판을 사용하여 물/액정/공기의 환경에서 발현되는 결합의 종류를 분석함. ■ <i>in situ</i> 네마틱-스멕틱A, 스멕틱A-네마틱 상전이를 통한 결합 발현 및 소멸 특성을 분석함.
다양한 결합의 형성원리 및 상관관계 분석	<ul style="list-style-type: none"> ■ 결합 발현 및 소멸 특성을 통해 다양한 결합의 형성원리 및 상관관계를 규명함. ■ 서로 연결되어 있는 결합 배열의 2, 3 차원 모식도를 완성함.
나노 구조분석법을 이용한 결합 전이과정 분석	<ul style="list-style-type: none"> ■ 이론 기반의 시뮬레이션을 도입하여 연속적인 결합 발현 및 소멸 과정의 메커니즘을 규명함.

상전이 거동을 통한 결합의 발현 및 소멸 관찰

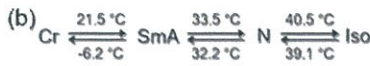
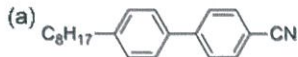


그림 1. (a) 8CB 액정 분자의 모식도. (b) 상전이 온도.

기존 유기 단분자들의 열적 상전이 거동을 이용한 자기조립성 결합구조체의 발현 및 소멸 과정에 대한 연구의 부재는 상전이 과정동안 분자들의 배향변형에 있어서 자유도가 제한되는 환경에서 실험을 했기 때문이다. 본 연구진은 연구수행 초년에 이 문제를 해결하고자 물이라는 유체를 기판으로써 사용하는 시스템을

개발 하였다. 유체기판을 사용하면, 분자들이 자발적인 변형을 이룰 때 변화의 방해힘을 최소화할 수 있기 때문에 점진적인 구조변화를 관찰할 수 있다.

따라서 본 연구에서 상전이 거동을 관찰하기 위해서, 단순 배향 정렬도만 갖는 네마틱 액정상과, 배향 정렬도와 부분 위치 정렬도를 동시에 갖는 스멕틱 A 액정상을 발현 할 수 있는 유기 단분자인 8CB 액정

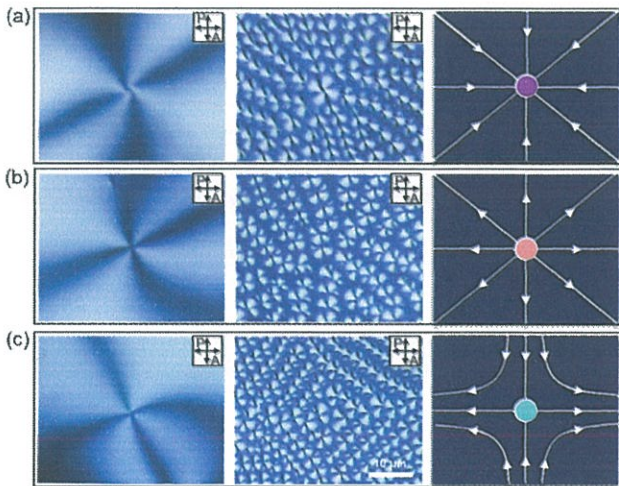


그림 2. (a) +1 수렴 결합. (b) +1 발산 결합. (c) -1 결합.

을 이용하였다 (그림1). 액정이 아래의 물 기판과, 위의 공기 사이에서 균일한 액정

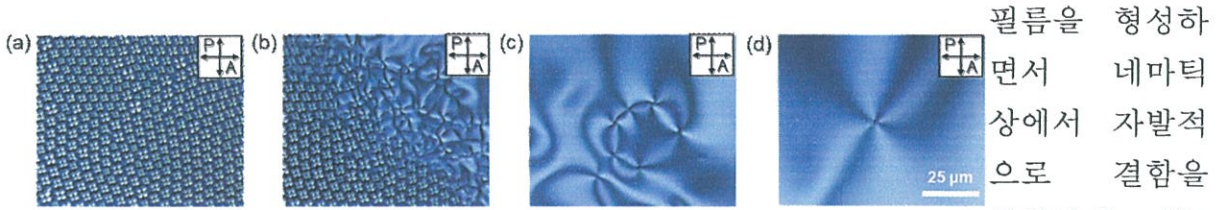
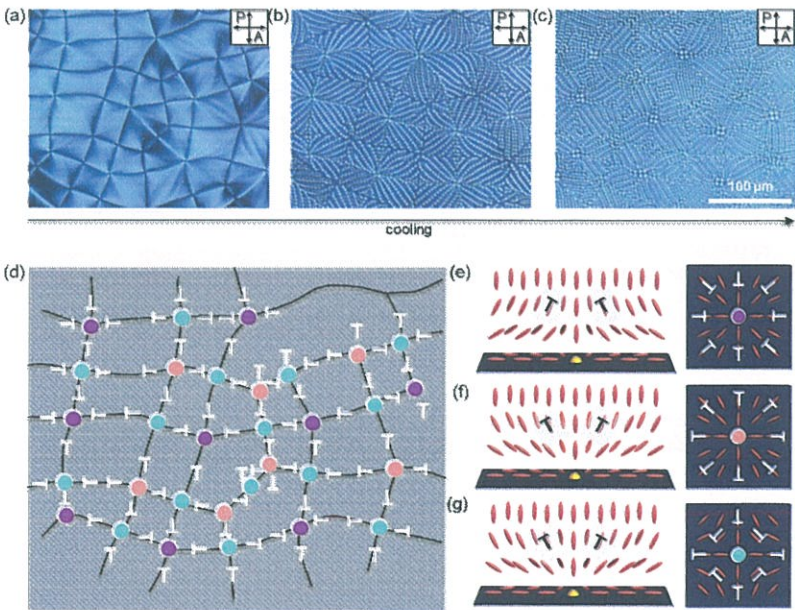


그림 3. (a) 육각 배열된 원뿔형 결함 구조. (b) 스멕틱A-네마틱 상전이 과정. (c) 형성하게 되는 발현된 결함 구조들. (d) 결함의 소멸.

으로 상전이를 시키게 되면 서로 다른 원뿔형 결함 구조의 배향을 가진다는 것을 편광현미경을 통해 알 수 있었다 (그림2(a-c)). 네마틱 상에서 발현된 각 결함 구조가 상전이가 일어나면서 이심률이 0이 아닌 원뿔형 결함 구조를 형성 했을 때 부채꼴 모양의 꼭지점이 바라보고 있는 방향 (하얀색 화살표의 방향) 에 따라 초기 결함구조가 세 종류의 (a: +1 수렴, b: +1 발산, c: -1) 결함 구조가 발현이 된다는 것을 규명하였다. 이 원뿔형 결함 구조가 형성된 뒤 온도를 더 하강시키면 이심률이 0인 육각 배열된 원뿔형 결함 구조가 형성 된다 (그림3(a)). 다시 역으로 상전이 (스멕틱A-네마틱) 를 일으키면 원뿔형 결함 구조가 네마틱 상에서 +1 수렴 결함 구조로 변이가 일어나고, +1 수렴 결함 구조들 간의 충돌로 인해 결함을 해소하고자 다른 결함 구조들 (+1 발산, -1) 이 일정한 격자를 이루면서 형성이 되는 것을 분석하였다 (그림3(b,c)). 시간이 지나게 되면 자발적으로 결함을 해소하고자 결함들이 합쳐지면서 소멸되는 것을 관찰하였다 (그림3(d)). 상전이 거동을 통해 그동안 관찰 할 수 없었던 결함 구조의 발현과 소멸 과정을 규명할 수 있었다.

다양한 결함의 형성원리 및 상관관계 분석

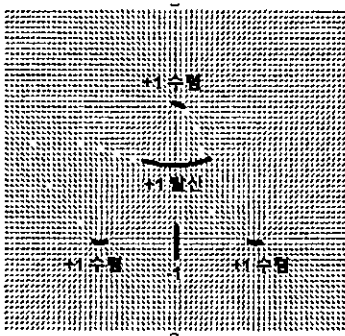


네마틱 상에서 발현된 다양한 결함의 상전이 과정을 통해 형성원리 및 상관관계를 분석하였다 (그림4(a-c)). 다양한 결함으로 이루어진 환경에서 네마틱 상에서 스멕틱A로 상전이를 일으키면 +1 수렴 결함 구조가 결함들이 이루는 일정한 격자에서 중심에 위치하며 이심률이 0인 원뿔형 결함 구조로 바로 형태 전이가 일어

그림 4. (a-c) 다양한 결함 구조의 상전이 과정. (d) 서로 연결되어 있는 결함 구조들의 2차원 모식도. (e-g) 3차원 모식도.

틱 상의 +1 수렴 결함 구조가 스펙트럼A 상의 이심률이 0인 원뿔형 결함 구조가 형성되는 원인이라는 것을 밝혔으며, +1 수렴 결함 구조가 격자의 중심에 위치하므로 +1 수렴 도메인간의 충돌로 인해 결함을 해소하고자 격자의 변에는 -1 결함 구조가, 꼭지점에는 +1 발산 결함 구조가 형성된다는 것을 밝혔다. 이를 바탕으로 서로 연결되어 있는 결함 배열의 2, 3차원 모식도를 규명하였다 (그림4(d-g)). 상전이 거동과 다양한 결함 구조들의 배열을 통해서 최초로 결함들 간의 상관관계를 분석하였다.

나노 구조분석법을 이용한 결함 전이과정 분석



결함들 간의 상관관계를 자세히 규명하기 위해 이론기반의 시뮬레이션을 사용하여 증명하였다 (그림5). 이심률이 0인 원뿔형 결함 구조를 육각 배열한 스펙트럼A 상에서 네마틱 상으로 전이되는 과정을 시뮬레이션을 통해 관찰하였을 때, 원뿔형 결함 구조는 +1 수렴 결함구조로 변이가 일어나는 것을 증명하였으며, 결함을 해소하고자 격자 사이의 변에 -1 결함 구조가 형성되고, 꼭지점에는 +1 발

그림 5. 스펙트럼A-네마틱 전이시 결함 구조가 형성되는 것을 증명하였다. 거시적인 편광현미경 관찰과 이론 기반의 시뮬레이션을 통해 연속적인 결함 구조의 발현과 소멸 과정의 메커니즘을 규명하였다.

1-2 해당 연도 추진 실적

가. 연차별 개발 목표 및 내용 대비 성과

목 표	성 과
상전이 거동을 통한 결함의 발현 및 소멸 관찰	<ul style="list-style-type: none"> ■ 물 유체기판을 사용하여 물/액정/공기의 환경에서 발현되는 결함의 종류를 분석함. ■ <i>in situ</i> 네마틱-스펙트럼A, 스펙트럼A-네마틱 상전이를 통한 결함 발현 및 소멸 특성을 완벽하게 기술함. ■ 자기조립 특성과 결함의 구조분석을 통해 위상기하학분야 연구의 이해 토대 마련.
다양한 결함의 형성원리 및 상관관계 분석	<ul style="list-style-type: none"> ■ 결함 발현 및 소멸 특성을 통해 다양한 결함의 형성원리 및 상관관계를 규명함. ■ 서로 연결되어 있는 결함 배열의 2, 3 차원 모식도를 완성함.
나노 구조분석법을 이용한 결함 전이과정 분석	<ul style="list-style-type: none"> ■ 연속적인 결함 발현 및 소멸 과정의 메커니즘을 규명하고, 이론 기반의 시뮬레이션을 통해 증명함.

2019	유무기 물질을 이용한 결함의 발현 제어와 계면에서의 분자 배향특성 관찰																			
	다양한 계면 조건에서의 결함의 상전이 거동 분석																			
	나노 구조분석법을 이용한 제어된 결함 구조의 전이 과정 분석																			
	결함 제어에 대한 새로운 이론 정립																			
																			20,000	

다. 연구평가의 착안점 및 척도

구분	년도	세부연구목표	가중치	평가의 착안점 및 척도
3차년도	2019	유무기 물질을 이용한 결함의 발현 제어와 계면에서의 분자 배향 특성 관찰	60 %	결함 발현 제어기술을 제시하고 계면에서의 분자 배향을 완벽하게 기술할 수 있는가?
		다양한 계면 조건에서의 결함의 상전이 거동 분석	40 %	제어된 결함의 연속적인 구조적 변이과정을 자세히 기술할 수 있는가?
최종평가	2027	결함의 형태전이 현상 메커니즘 규명	40 %	각 결함간의 연속적인 구조적 변이과정을 자세히 기술
		결함에 대한 새로운 이론 정립	60 %	미시적, 거시적 실험결과 바탕으로 결함의 형성원리 및 분자들의 자기조립 과정 기술

III. 기타

- 변경사항 없음.