

공액계 사슬을 갖는 이 핵 금 착체의 합성과 광학적 특성에 관한 연구

김동환, 김화선, 안호근, 광지훈, 이지훈*, 정민철
 순천대학교, 충주대학교*

Synthesis and photoproperties of digold conjugated chain

Dong-Hwan Kim, Hwa-sun Kim, Ho-Geun Ahn, Ji-Hoon Kwak, Ji-Hoon Lee*, Min-Chung Jung
 Suncheon National Univ. Chung-Ju Univ.*

Abstract

최근 많은 학자들에 의해서 차세대 디스플레이로 각광 받고 있는 유기EL에 대한 연구가 활발하게 진행되고 있다. 그 중에서 본 연구에서 수행하고자 하는 분야는 유기EL의 발광재료의 개발에 대한 연구이다. 그 분야중 하나가 세계적으로 많은 학자들에 의해서 연구되고 있는 전이금속을 이용한 발광재료의 개발이다. 그 중 본 연구에서는 양 말단 금속을 가교체로 연결한 이 핵 금 착체에 관한 연구를 수행하였다. 이러한 가교체들은 유기물의 결합 상태에서 나타나는 전자전이외에 금속과 유기물사이의 결합에 의해 나타날 수 있는 전자전이 또 한 가지고 있다. 이러한 전자전리로 인해 발광재료로서의 특징을 가질 수 있다. 이러한 착체를 합성하기위해 가교체 H-C≡C-C≡C-C-H 와 (Cis)H-C≡C-CH=CH-C≡C-H를 이용하여 금과N-Heterocyclic-Carbene가 배위결합된 양말단의 금속 그룹을 연결하여 합성하였다. 합성된 착체는 FT-IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR, UV/VIS/NIRspectrophotometer, Emission spectrometer를 사용하여 분석하였다.

Key Word : Gold, luminescence

1. 서 론

유기EL발광재료의 연구에 있어서 그 중에서도 우리는 전이금속을 이용한 재료의 합성에 대하여 연구하고 분석하였다. 이러한 착체를 합성하기 위해서 우리는 공액계가교체로 전이금속인 금과 유기물이 배위결합된 양 말단의 금속그룹을 연결하는 이 핵 금착체의 합성에 대하여 연구하였다. 이러한 이 핵 구조를 갖는 착체의 연구는 여러학자들에 의해서 연구 되어졌다. 이렇게 가교체로 연결되어진 착체들은 금속과 배위자사이의 전자이동과 가교체의 π결합을 통한 전자이동이 활발하게 진행될 수 있기 때문에 발광재료로서의 좋은 특성을 갖는다. 본 연구에서는 분자의 광학적인 특성을 살펴볼 수 있는 방법 중에서 빛의 흡수에 따른 분자의 흡수와 발광에 대하여 집중적으로 분석하여 발광재료로서의 특성에 대하여 알아보았다.

2. 실험

(IMe)Au-C≡C-C≡C-Au(IMe)의 합성(착체 1.)

50cc 취랭크 튜브 안에 1,4-Bis(trimethylsilyl) 1,3-butadiyne(0.14mmol, 27mg)을 넣고 MeOH(15ml)

를 넣고 교반시킨다. 이 용매에 NaOH(20eq, 2.8mmol 112mg)을 넣고 30분동안 교반시켜준다.(A) 다른취랭크튜브에 [Au(IMe)Cl]^[7](0.28 mmol)을 넣고 THF를 15ml넣는다.(B) 30분 뒤에 (B)를 (A)에 주사기를 사용해서 넣는다. 이 때 하얀색 침전물이 생기는 것을 관찰 할 수 있다. 그리고 1시간 동안 반응 시킨다. 1시간이 지나면 상온에 방치하여 상등액과 침전물을 분리하고 filtering을 통해 상등액과 침전물을 분리시킨다. 상등액을 vaccum dry 시키고 product를 얻어 낸다.

FT-IR : 2008.7Cm⁻¹(C≡C), 1630Cm⁻¹(C=C)

¹H-NMR : 2.09ppm(C-CH₃, s), 3.42ppm(N-CH₃, s)

cis-(IMe)Au-C≡C-CH-CH-C≡C-Au(IMe)의 합성(착체 2,3,4)

착체 1.과 같은 방법으로 합성하여 product를 얻을 수 있다

FT-IR : 2094Cm⁻¹, 2065Cm⁻¹(C≡C), 1635Cm⁻¹(C=C)

¹H-NMR : 2.04ppm(C-CH₃, s), 3.25ppm(N-CH₃, s),

5.59(-CH=CH-, s)

(IPr)Au-C≡C-C≡C-Au(IPr) 의 합성(착체 3.)

FT-IR : 2094Cm⁻¹, 2065Cm⁻¹(C≡C)

¹H-NMR: 1.55ppm(C-CH₃), 2.09ppm(N-CH₃), 4.6ppm(CH-CH₃, m)

cis-(IPr)Au-C≡C-CH-CH-C≡C-Au(IPr) 의 합성(착체 4.)

FT-IR : 2098Cm⁻¹, 2066Cm⁻¹(C≡C)

¹H-NMR : 1.68ppm(C-CH₃), 2.22ppm(N-CH₃), 4.8ppm(CH-CH₃, m), 5.71 (-CH=CH-, s)

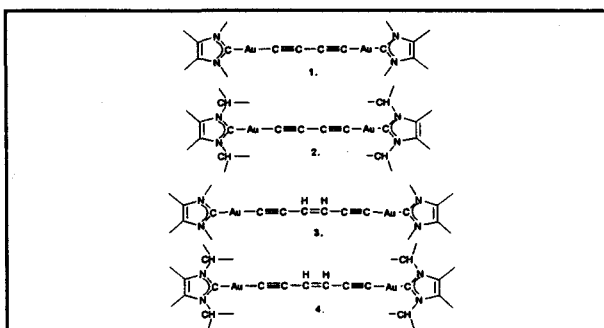


Figure. 1 예상되는 분자구조

3. 결과 및 검토

착체 1. 2. 3. 4. 의 착체의 흡수 파장은 Visible 영역에서의 흡수 파장을 볼 수 있었는데 이는 CH₃-C≡C-C≡C-CH₃ 이 227nm, 236nm, 249nm에서 π→π* 흡수 파장을 보이는 것을 비교해 볼 때 금속그룹과 또 다른 전이가 있음을 확인 할 수 있다. 착체 1. 2. 의 Emission 파장은 고르고 날카롭게 나온 반면 착체 3. 4. 의 파장은 넓은 영역에서 동틀게 나왔다. 이는 금속그룹을 연결하는 가교체가 다르기 때문인 것으로 생각되며 착체 1. 과 2. 의 파장을 보면 모양은 비슷하지만 착체 1.이 약간 장파장에서 나오는 것을 볼 수 있다. 이 약간의 차이는 금속에 배워된 리간드의 다른 구조에 의한 것으로 생각할 수 있다. 이렇게 분석된 광학적인 특성을 볼 때 이 착체들은 Electroluminescence의 특성 또한 보일 수 있는 것으로 생각해 볼 수 있다. Table 1. 은 이 착체들의 흡수

와 Emission 파장을 정리하여 나타내었다.

Table 1. 착체 1. 2. 3. 4. Absorption & Emission spectra

Complex	Medium(T/K)	λ ^{abs} /nm (ε _{max} /dm ³ mol ⁻¹ cm ⁻¹)	λ ^{em} /nm
1.	MeOH(278)	222(11387), 248(12156), 294(20939), 342(3248), 372(2438), 424(1909), 682(1579)	322, 423, 464, 514, 643
2.	MeOH(278)	266(27632), 342(6093), 372(3410), 422(2078), 682(1383)	421, 462, 511
3.	MeOH(278)	200(27879), 248(20503), 278(32617), 342(4255), 372(3055), 422(2156), 682(1538)	289, 394, 551
4.	MeOH(278)	202(61890), 238(37096), 268(40692), 306(36935), 372(3675), 422(2314), 682(1488)	337, 340, 375

4. 결론

본 연구에서는 유기 EL의 발광재료로 쓰일 수 있는 전이금속착체의 합성과 특성을 분석하였다. 금속으로는 금을 사용하였고 합성된 착체의 빛에 의한 흡수와 발광의 특성을 분석하였고 유기 EL의 재료로 쓰일 수 있는 가능성을 분석하였다.

※ 감사의 글 : 본 연구는 순천대학교 차세대 퓨전 그린 테크놀로지(RRC)와 순천대학교 환경친화형 물질 기술 혁신센터(TIC)의 지원으로 이루어졌으며, 이에 감사 드립니다.

참고 문헌

[1] Chi-Ming Che, *J. Am. Chem. Soc.* 2001, 123, 4985-4991
 [2] Michael I Bruce, *Journal of Organometallic Chemistry* 690 (2005) 3268-3277
 [3] Chi-Ming Che, *Organometallics*. 2002, 21, 2343-2346
 [4] Maria Agostina Cinellu, Giovanni Minghetti, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 1999, 2823-2831
 [5] Sanjay Sindh, Herber W. Roeky, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2005, 3057