



연세대학교  
YONSEI UNIVERSITY

기능성 파이전자 시스템 분광학 연구실

Spectroscopy Laboratory for Functional  $\pi$ -Electronic Systems

<http://www.FPIESlab.com>

# FPIES NEWSLETTER

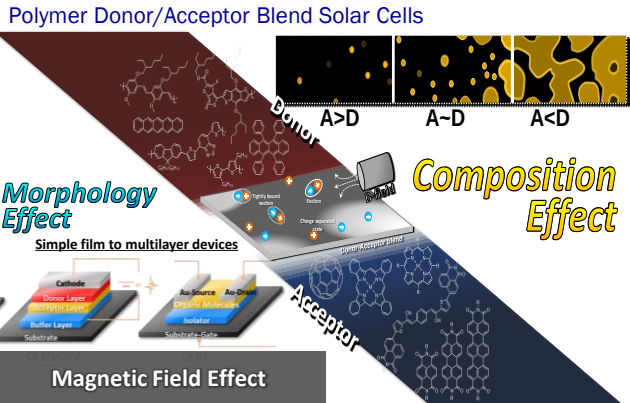
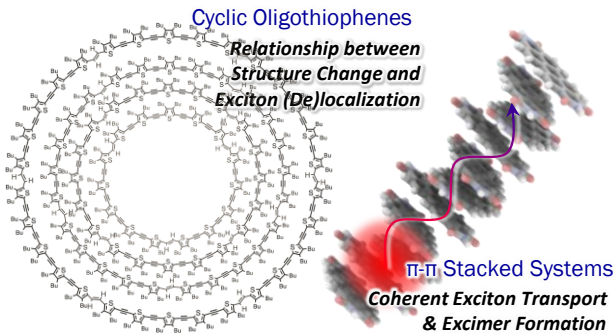
Vol. 21, October, 2018



Spectroscopy Laboratory for  
Functional  $\pi$ -Electronic Systems

# Strategies for Investigation of Functional Nanostructures

## Exciton Dynamics in Functional Nanostructures



Molecular Arrays/Assemblies

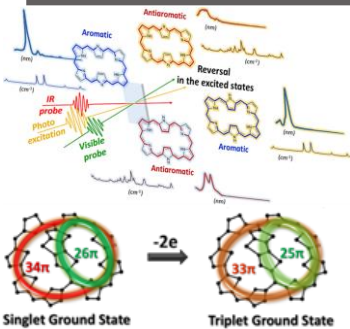
Magnetic Field Effect

Aromaticity

Perovskites

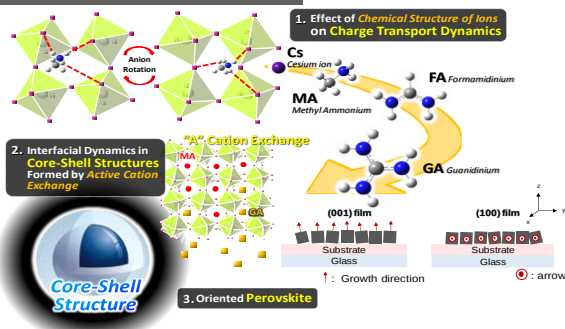
Aromaticity Reversal in the excited state

Electronic & Vibrational Analysis



Bicyclic Aromaticity

Triplet ground state: Baird-type Aromaticity



## Time-Resolved Spectroscopy

- fs-Broadband Transient Absorption Spectroscopy
- fs-Broadband Fluorescence Upconversion Spectroscopy
- fs-Impulsive Stimulated Raman Spectroscopy

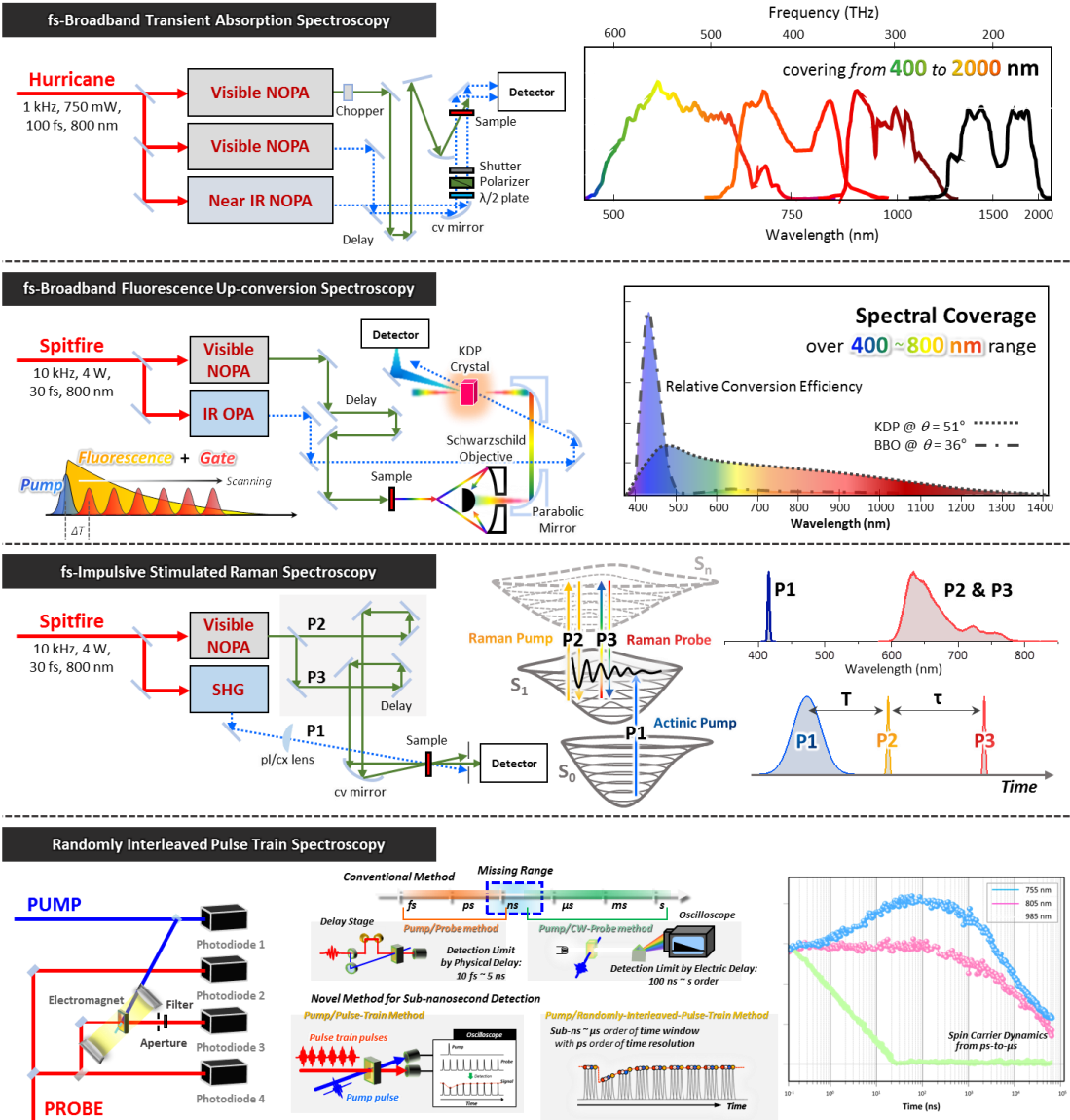
## Space-Resolved Spectroscopy

- Wide-field Excitation Polarization Spectroscopy
- Cryogenic Single Molecule Spectroscopy
- Confocal Microscopy / Coincidence Measurement

분광학은 물질과 빛의 상호작용, 즉 물질에 의한 빛의 흡수 또는 방출 현상을 밝히는 학문으로서, 매우 빠른 시간 내에 일어나는 광현상과 관련된 스펙트럼의 시간적 변화를 포착하여 분석하는 시간 분해 분광학 (time-resolved spectroscopy), 그리고 독립된 개개의 시스템들을 구분해내어 그것들의 광학 특성을 분석하는 공간 분해 분광학 (space-resolved spectroscopy)의 두 종류로 나눌 수 있다. 초극단의 시간적 정보와 초미세의 공간적 정보를 동시에 정확히 얻는 것은 상당히 어렵기 때문에, 시간 그리고 공간 분해 분광학은 서로 독립적으로 발전됨과 동시에 상호 보완적인 관계로 위치해왔다. 즉, 두 분광학 중 한 가지만으로는 물질에 대한 모든 정보를 얻어낼 수 없음을 뜻한다. 이에 본 연구진은 우수한 성능을 지닌 다양한 시간 및 공간 분해 분광학 장비들을 도입하여 기능성 분자 소자에 대한 심도 깊은 연구를 수행 중에 있다.

기능성 분자 소자를 이루는 기본 단위 중 유기물질에 속하는 파이 전자 분자체 및 집합체, 무기물질인 양자점 그리고 유기-무기하이브리드 물질인 페로브스카이트들은 이를 이루고 있는 단위체의 종류뿐만 아니라 개수 및 결합 형태에 따라 그 구조가 크게 달라지고, 이에 따라 다양한 광물리/광화학적 특성들이 발현된다. 이를 본 연구진이 도입한 시간 그리고 공간 분해 분광학을 이용하여 다양한 유기 및 무기 시스템의 근본적인 물성 발현 메커니즘을 밝힐 수 있을 뿐 아니라 결과적으로 원자 및 분자 수준에서 물질의 미시적 성질을 규명하고, 이러한 성질들을 제어하여 재료, 전자, 기기 등의 거시적 시스템에서 응용하는 핵심적인 정보를 제공할 수 있을 것으로 기대하는 바이다.

# Time-Resolved Spectroscopy



- 1. 펨토초 광대역 순간 흡수 분광법 (fs-Broadband Transient Absorption Spectroscopy)**  
본 연구실에서는 비선형 광학물질인 PPSLT를 이용한 비선형 광파라메트릭 증폭기로 가측정 파장 영역 1100-1600 nm의 탐침광이 구축되어 있으며, 이는 가시광선 탐침광과 마찬가지로 펄스 압축을 통하여 현재 50-60 펨토초의 시간 분해능으로 최적화 되어 있다. 추후 1 T 까지 가변한 크기의 자기장을 가할 수 있는 전자석을 접목 할 예정이다.
- 2. 펨토초 광대역 형광 상위 전환 분광법 (fs-Broadband Fluorescence Up-conversion Spectroscopy)**  
본 연구실의 광대역 형광 상위 전환 분광법은 넓은 파장 영역 대의 형광을 실시간으로 관측할 수 있는 장점이 있으며 비선형 광파라메트릭 증폭기를 이용해 넓은 범위의 광여기 파장을 선택할 수 있으며 (400 nm, 490-630 nm), 펄스 압축 기술로 최적화된 시간 분해능은 80-120 펨토초 정도이다.
- 3. 펨토초 순간 유도 라만 분광법 (fs-Impulsive Stimulated Raman Spectroscopy)**  
현재 비선형 광파라메트릭 증폭기를 기반 520-670 nm의 파장 범위와 반치전폭 70-80 nm를 지니는 펄스를 생성하여 라만 여기광, 탐침광으로 사용 중이며, 프리즘-회절 격자쌍을 이용한 펄스 압축으로 15-20 펨토초의 시간 분해능 ( $\sim 1500 \text{ cm}^{-1}$ 까지의 진동수 가측정 범위)이 확보되어 있으며, 다른 펄스 압축 기술을 도입하여 10 펨토초 아래의 성능 개선을 계획 중이다.
- 4. 서브 나노초 순간 흡수 분광법 (Randomly Interleaved Pulse Train Spectroscopy)**  
서브 나노초 순간 흡수 분광법은 느린 반복속도의 레이저를 여기광으로, 플래시 램프를 탐침광으로 사용하고 오실로스코프를 이용한 전기적 방식으로 탐침광의 감쇄를 기록하므로 나노초부터에서 밀리초 단위의 느린 동역학을 관측할 수 있는 방법이다. 본 분광장치에 1 T까지 가변한 크기의 자기장을 가할 수 있는 전자석이 접목되어 있다.

# Time-Resolved Impulsive Stimulated Raman Spectroscopy with Yb:KGW Regenerative Amplifier

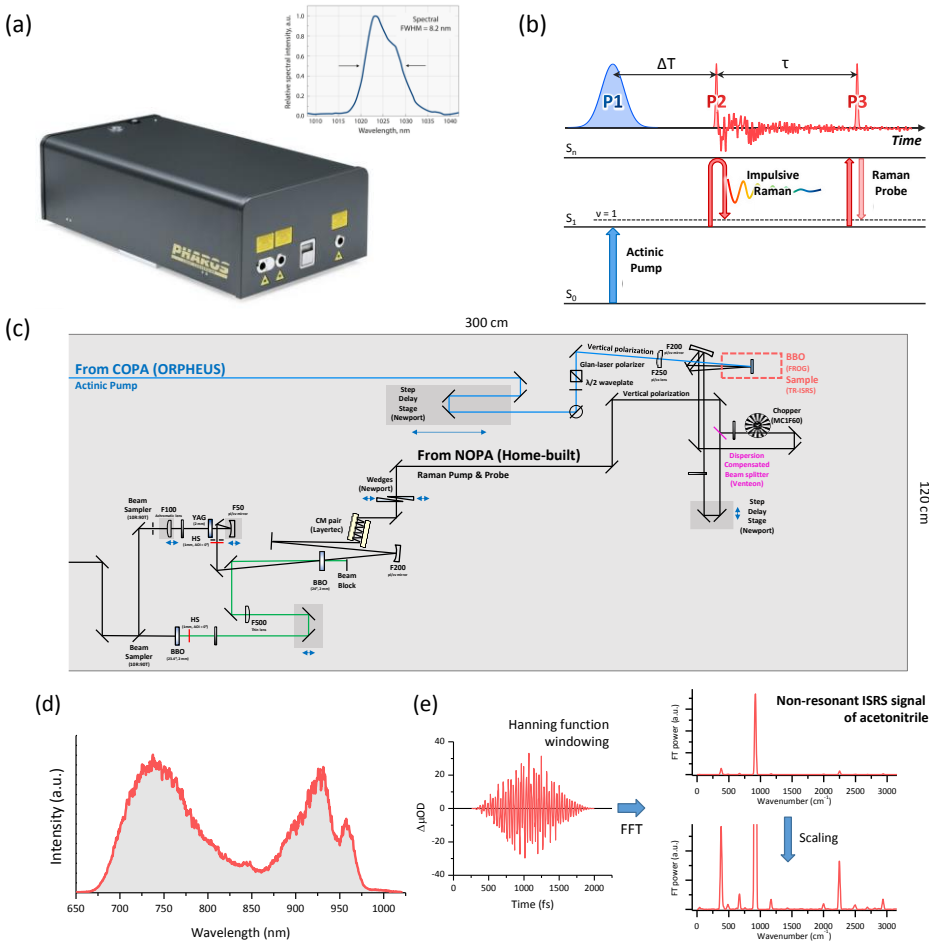
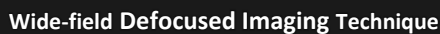


그림 1. (a) 이테르븀 재생 증폭 시스템 PHAROS, (b) 시간 분해 순간 유도 라만 분광법 (TR-ISRS)의 모식도, (c) TR-ISRS의 광학부품배치도, (d) 비선형 광 파라메트릭 증폭 펄스 스펙트럼, (e) 아세토나이트릴 용매의 비공명 라만 스펙트럼

## 이테르븀 재생 증폭 시스템을 이용한 시간 분해 순간 유도 라만 분광 장치 구축

들뜬 상태의 구조 변화 동역학 정보를 직접적으로 관측할 수 있는 시간 분해 순간 유도 라만 분광법(time-resolved impulsive stimulated Raman spectroscopy, TR-ISRS)을 수행하기 위해서는 세 종류의 레이저 펄스가 요구된다. 그 중 두 번째 순서로 시료에 가하게 되는 펄스인 라만 여기광(Raman pump)은 실제로 들뜬 상태 분자체들의 진동 파속 운동을 유도시키는 광원으로서, 라만 여기광의 시간 분해능이 진동모드의 가측 정 범위를 결정하는 가장 중요한 요소이다. 또한 라만 여기광의 파장 범위를 중요하게 고려해야 하는데, 이는 라만 여기광의 스펙트럼이 분자체들의 들뜬 상태 흡수 스펙트럼과만 공명해야 들뜬 상태의 구조 정보만을 선택적으로 추출해낼 수 있기 때문이다. 기존에 본 연구실에 구축된 시간 분해 순간 유도 라만 분광 장치는 800 nm의 광원을 기본 파장으로 가지는 타이타늄:사파이어 재생 증폭레이저를 기반으로 만들어졌다. 하지만 오랜 시간의 테스트 결과 장시간(반나절 이상)의 실험 시 레이저에서 출력되는 펄스의 시간 분해능이 바뀔에 따라, 생성해내는 비선형 광 파라메트릭 증폭 (noncollinear optical parametric amplifier, NOPA) 펄스의 스펙트럼의 모양과 시간 분해능이 바뀌게 되고 결과적으로 측정되는 라만 신호의 세기가 달라지는 것을 확인하였다. 뿐만 아니라 800 nm의 기본 파장으로 만들어내는 NOPA 펄스의 파장 범위가 가시광선 영역으로 한정되어 있기 때문에 실험 가능한 시료의 종류에도 한계가 있었다. 따라서 본 연구진은 최근 고안정성 및 고출력으로 주목 받고 있는 이테르븀 매질을 (Ytterbium, Yb) 기반으로 한 1030 nm의 재생 증폭 레이저인 PHAROS를 구매하였다. 이를 이용하여 라만 여기광 및 탐침광으로 사용할 근적외선 영역의 안정적인 비선형 광 파라메트릭 증폭 펄스를 새로이 구축하고 이를 처프-거울쌍 및 웨지 프리즘을 이용하여 펄스 압축까지 모두 수행하였다. 현재 이를 이용하여 아세토나이트릴 용매의 비공명 라만 스펙트럼을 측정한 결과, 3000  $\text{cm}^{-1}$  까지 이르는 넓은 가측정 범위가 확보되어 있음을 확인하였으며 빠른 시일내에 파이 공액 분자체, 파이-파이 쌓임체들에서 나타나는 에너지 및 전하 전달과 같은 엑시톤 동역학을 구조적으로 정밀히 분석할 예정이다.

## Confocal Laser Scanning Microscopy



# Spectroscopic Diagnosis of Excited-State Aromaticity

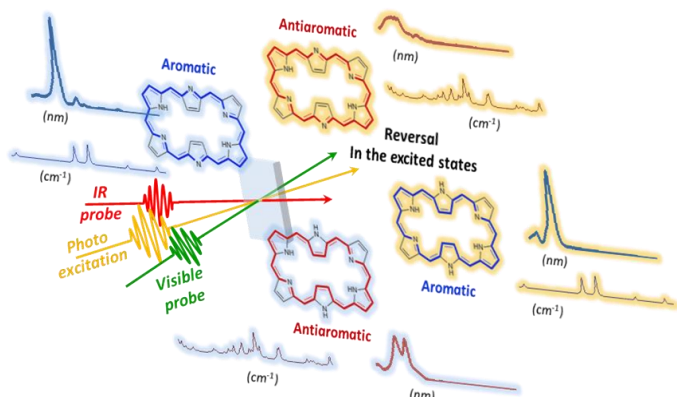


그림 1. 들뜬상태 방향성 뒤집힘을 규명하기 위한 분광학적 방법 모식도

이러한 연구 결과는 아직 이론적 접근에만 많이 의존하는 들뜬 상태 방향성 연구에 실험적 분석에 대한 기반을 마련하고 광성질 조절 메커니즘 규명 등으로의 응용가능성을 제시한다는 점에서 큰 의의를 가진다. 본 연구팀은 이러한 들뜬 상태 방향성 뒤집힘 현상 규명에 대하여 효과적인 접근법을 제공하고자 방향성의 변화에 따라 뚜렷한 물성의 변화를 보여주는 헥사피린 분자를 이용하였다. 방향성의 변화는 파이공액 구조를 형성하는 파이전자의 구조를 변화시키는 주요 요인으로 작용하기 때문에, 분자의 전자구조를 직접적으로 반영하는 전자상태 흡수 스펙트럼은 방향성·반방향성에 따라 확연히 달라지게 된다. 이에 기인하여 들뜬 상태 방향성 변화를 확인하기 위해 펄스 레이저 분광학을 이용한 전자상태 순간 흡수 스펙트럼의 변화를 관측하여 들뜬 상태에서 헥사피린 분자들의 방향성 뒤집힘을 확인할 수 있다는 점을 제시하였다 (그림 2). 이와 더불어, 분자의 구조 또한 방향성 반방향성의 지표가 된다. 방향성과 반방향성은 분자의 안정성과 직결되는 핵심적인 요소이기 때문에, 방향성 분자의 구조는 파이 오비탈 겹침에 의해 형성되는 공액 구조에 의한 안정성을 최대화 시키기 위해 평평한 구조를 가지게 되지만, 분자가 반방향성을 가지게 되면 불안정해지기에

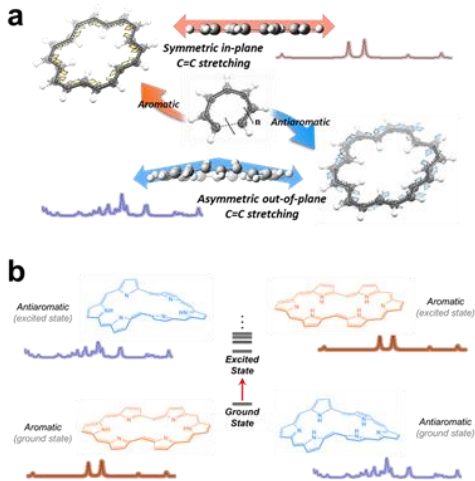


그림 3. 분자의 방향성과 적외선 스펙트럼 관계 모식도

방향성은 분자의 안정성을 결정짓는 중요한 성질로서 화학분야에서 연구되는 핵심적인 연구 분야중의 하나이다. 이러한 분자의 방향성이 들뜬 상태에서 뒤집힌다는 것이 이론적으로 제안되었고, 최근에 본 연구실에서 분광학적 방법을 이용하여 이를 규명하였다. 이에 들뜬 상태에서의 방향성 뒤집힘 현상은 분자의 광-선택적 반응 및 광화학-에너지 저장과 같은 광-활성 성질 조절에 중요한 요인으로 작용할 수 있다는 점에서 많은 관심을 받고 있다. 하지만, 순간적으로만 존재하는 들뜬 상태를 분석하기 위한 실험적 접근이 어렵기 때문에 들뜬 상태에서의 방향성 변화를 통한 물성조절 메커니즘 분석 연구는 아직 많은 어려움을 겪고 있고 결과 또한 미미한 실정이다. 이에 본 연구실에서는 분광 측정을 통해 들뜬 상태에서의 방향성 변화를 규명하고 이를 기반으로 메커니즘을 분석하는 체계적인 방법을 적용하였다 (그림 1).

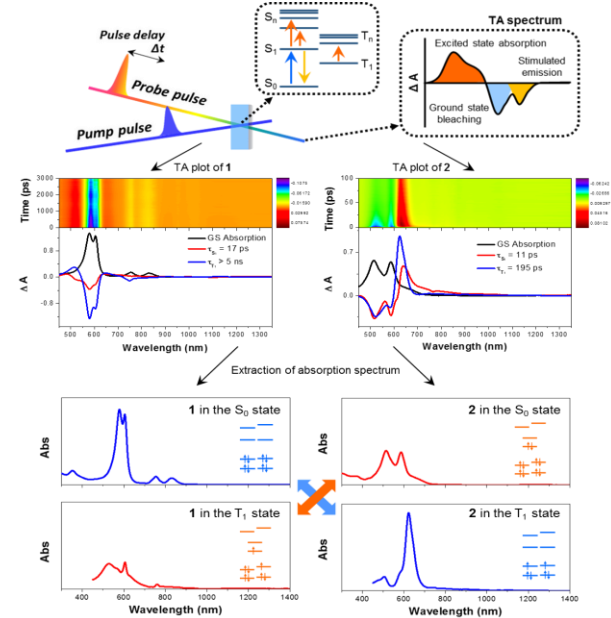


그림 2. 전자상태 순간흡수 측정에 의한 들뜬상태 방향성 분석 방법 모식도

파이 공액 구조를 최소화 시키는 뒤틀린 구조를 가지게 된다. 이러한 구조변화는 분자의 적외선 흡수 성질을 결정 짓는 쌍극자 변화 유도에 극명한 차이를 유발하여 탄소 이중결합에 의한 적외선 흡수 밴드들이 방향성/반방향성에 따라 상반되는 적외선 흡수 스펙트럼을 보이게 된다. 이를 기반으로 펄스 레이저 적외선 분광학을 이용하여 들뜬 상태에서 방향성 뒤집힘에 따라 방향성·반방향성 헥사피린 분자들의 스펙트럼의 양상이 서로 상반되게 나타나는 것을 통해 들뜬 상태 방향성을 분석하는 효과적인 방법으로 시간분해 가시광선 및 적외선 흡수 스펙트럼 분석법을 제공하였다 (그림 3). 이는 들뜬 상태 방향성 연구에 대한 획기적이고 중요한 연구법을 제공한다는 우수성을 인정받아 American Chemical Society의 대표 화학지 중 하나인 'Accounts of Chemical Research'에 표지논문으로 게재되었다.

# Aromatization Induced by Charge Transfer

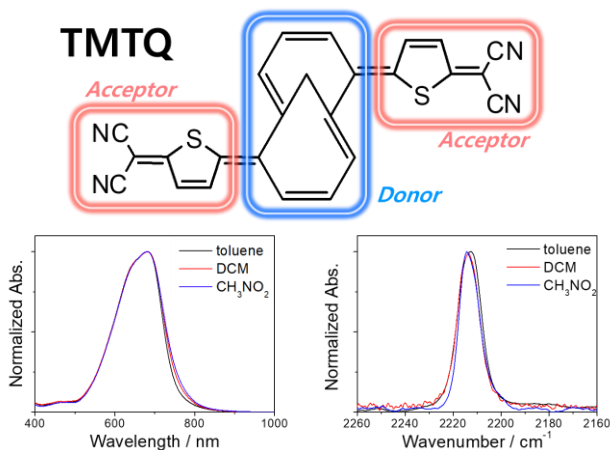


그림 1. TMTQ 분자 구조(상)와 정류상태에서의 흡수, 적외선 스펙트라(하).

순간 흡수 분광법으로 대상 분자 시스템을 연구했을 때, 용매 극성도에 따라 들뜬 상태 수명이 급격히 바뀌는 것을 통해 들뜬 상태에서 전하 이동이 일어나는 것을 관찰하였다. 이에 들뜬 상태 동력학을 자세히 분석하기 위해 광대역 순간 흡수 분광법 (Broadband transient absorption spectroscopy) 을 통해 아주 빠른 시간에 해당하는 전하 이동 현상을 관찰 할 수 있었다. 또한 시간 분해 적외선 분광법 (Time-resolved IR spectroscopy)을 이용하여 나이트릴기의 진동 모드 분석으로 들뜬 상태에서 나타나는 밴드의 위치가 전기화학적으로 만든 2가음이온 (dianion)상태와 일치하는 것을 통해 2개에 해당하는 전자가 애놀렌에서 빠져나간 상태인 것을 간접적으로 확인할 수 있었다. 이렇게 2개의 전자가 이동했을 때 [10]애놀렌은 총 8개의 파이 전자를 가지고 있는 상태라는 것을 예상할 수 있고 이 조건은 고려해보면 들뜬 상태에서 4n개의 전자를 가지는 베어드 방향성에 해당하는 상태인 것을 예측할 수 있다.

이를 확인 하기 위해 애놀렌에 대한 적외선 분광법과 양자 계산을 진행하였다 (그림 2). 계산적으로 에너지 최적화된 구조에서 바닥상태와 들뜬상태의 구조적 성질 비교. Nucleus independent chemical shift (NICS)와 anisotropy induced current density (ACID)와 같은 방향성을 나타내는 지표를 통해 들뜬 상태에서 방향성의 존재를 뒷받침 할 수 있었다. 또한 C=C 스트레칭 영역의 적외선 분광 스펙트라의 분석을 통해 순간 흡수

본 연구단은 확장 포피린 분자체를 이용하여 바닥상태의 방향성을 변화시키는 연구를 진행해 왔다. 적절한 산 또는 염기를 이용한 화학적 산화, 환원 반응을 통해 양성자를 붙이고 때는 방식으로 바닥상태에서 뒤틀린 구조 때문에 파이전자 공액이 형성되어 있지 않은 비방향성(Nonaromatic)의 분자의 구조를 변화시킴으로써 외비우스 방향성, 혹은 더 나아가 휘켈 방향성을 갖게 되는 방법을 제시했다. 이러한 연구들을 기초로 하여 바닥상태가 아닌 들뜬 상태에서도 방향성을 조절할 수 있는 가능성을 확인하였고, 전하 이동 (charge transfer) 현상에 의한 파이 전자의 개수를 변화시키는 방법을 고안하였다. 이를 구현할 수 있는 시스템으로 바닥 상태에서 비방향성을 가진 [10]애놀렌을 중심으로 양말단에 강한 전자 구인성 (electron withdrawing)인 나이트릴기 (C≡N group)를 가진 분자를 이용하여 전하 이동이 일어날 수 있는 전자 주게-받게 시스템을 도입해서 연구를 진행하게 되었다 (그림 1).

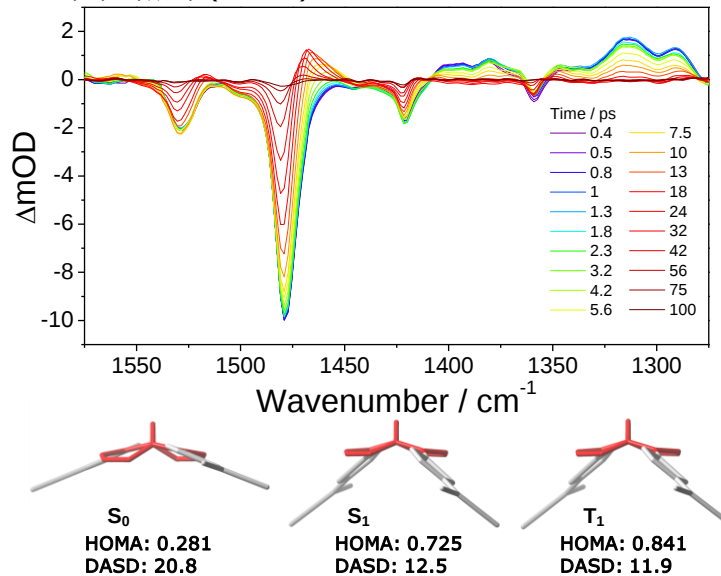


그림 2. 시간분해 적외선 분광 스펙트라(상)와 양자계산을 통해 얻은 들뜬상태의 구조와 방향성(하).

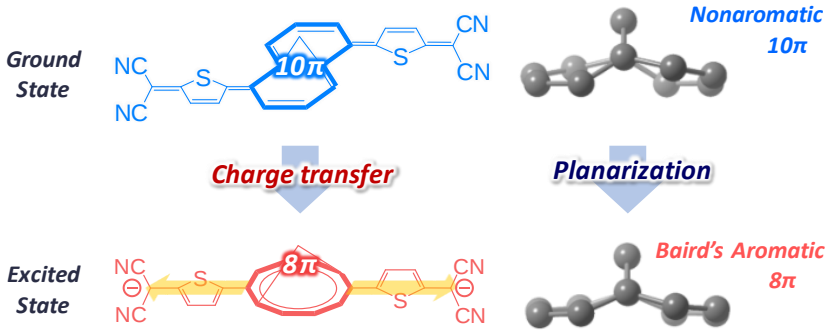


그림 3. 들뜬 상태에서의 전하이동에 의한 방향축화와 구조변화 도식

분광법에서 관측된 각각의 동력학과 일치하는 스펙트럼 변화와 감쇠곡선을 확인했고 스펙트라의 변화가 평평한 애놀렌과 휘어진 날개 구조에서 비롯된다는 것을 진동모드 분석을 통해 입증할 수 있었다. 이는 들뜬 상태에서의 방향축화에 의한 구조적인 평평해짐을 직접적으로 관찰한 결과이다. 이 연구를 통해 처음으로 들뜬 상태의 방향성을 조절할 수 있는 방법을 제시하였고 연구결과를 토대로 광반응성의 물질에 합성에 있어서 새로운 방향을 열어줄 것이라 기대 된다.

# Efficient $\pi$ - $\pi$ Stacking of Annulated Rosarin Derivative

방향성 (Aromaticity) 혹은 반방향성 (Antiaromaticity) 에 대한 연구는 분자의 안정성을 결정하는 중요한 요소이다. 이론적으로 4n개의 파이 전자를 갖는 반방향성 (Antiaromatic) 분자의 경우 불안정한 시스템으로 알려져 있지만, 최근 반방향성을 가지면서도 안정한 확장 포피린 분자들을 합성하는데 성공하였다. 이후 반방향성 분자들이 서로 가까운 거리에서 상호작용을 하는 경우, 그 성질이 약해지거나 방향성이 바뀐다는 사실이 이전의 많은 계산 연구들을 통해 예측되었고 이에 실험을 통해 직접적으로 증명하고자 하는 연구들이 많은 관심을 받고 있다. 특히 반방향성을 갖는 확장 포피린 분자체인 로자린에서 메조 위치의 치환기 차이에 따라 쌓임 구조를 조절 할 수 있다는 점에 착안하여 본 연구팀에서는 분자간 상호작용에 의한 방향성 변화를 분광학적 실험을 통해 증명하기 위해 연구를 진행하고 있다.

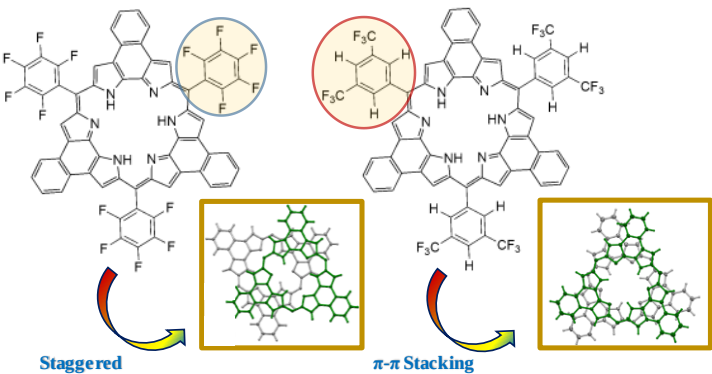
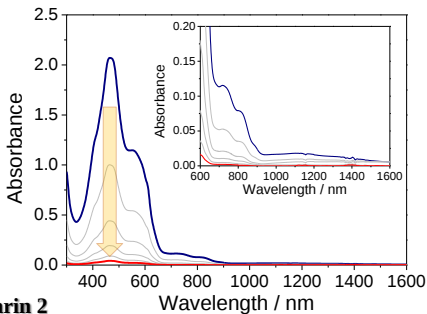


그림 1. Rosarin 1 (좌)과 Rosarin 2 (우)의 메조 치환기 차이에 따른 쌓임 구조의 변화

상호작용을 통해 Rosarin 2 분자의 반방향성이 약해지는 것인지 확인하기 위해 방향성/반방향성 분자에 대한 예측 기준이 되는 NICS (Nuclear independent chemical shift) 와 ACID (Anisotropy of the induced current density) 계산을 진행하였다 (그림 2, 우). 기본 이합체의 구조에서 상호 간 거리가 3.4 Å였던 것이, 최적화 계산 결과 3.1 Å 정도로 가까워 지는 결과를 확인 할 수 있었다. 그리고 ACID 계산을 통해 최적화 이전의 분자 체에서는 강한 반방향성의 전류 고리가 형성되지만, 분자 간의 거리가 가까워 지면서 반방향성이 약해지는 것을 확인할 수 있었다. 현재 실험 결과들을 더욱 자세히 분석하기 위하여 농도 변화에 따른 방향성의 변화를 직접적으로 확인할 수 있는 NMR 실험 및 근적외선 파장을 이용한 펄스초 광대역 순간 흡수 분광법을 수행하고자 계획 중이며, 후에 본 연구가 완료되면 미세한 구조적 차이에 의해 쌓임 구조와 방향성이 달라질 수 있다는 결과를 제시할 수 있는 좋은 기초 자료가 될 것으로 사료된다.

엑스레이 회절 분석법 (X-ray diffraction spectroscopy)을 통해, 반방향성을 갖는 로자린 분자에서 메조 치환기에 따라 분자 간의 쌓임 구조가 달라지는 것을 확인하였다. 상대적으로 거대한 치환기로 연결된 Rosarin 1 분자의 경우 비틀린 구조를 갖는 반면, Rosarin 2는 효율적으로 pi-pi 쌓임이 일어난다 (그림 1). 이 실험결과를 분광학적으로 증명하기 위해 단위체로 존재한다고 생각할 수 있는 저농도 조건에서 고농도로 바꿔 정류상태 흡광 스펙트럼을 찍은 결과, Rosarin 1에서는 특별한 변화를 관측 할 수 없었지만 Rosarin 2에서는 pi-pi 쌓임에 의해 단위체에서는 보이지 않던 장파장 영역에서의 흡수 전이 (950 nm)가 점차 자라나는 것을 확인하였다 (그림 2, 좌). 추가적으로 두 분자 간의 pi-pi

Rosarin 1



Rosarin 2

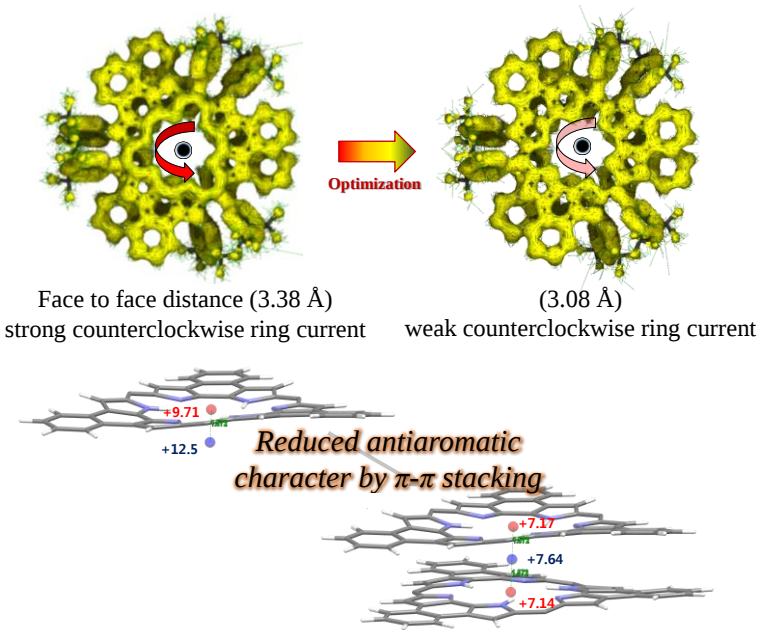
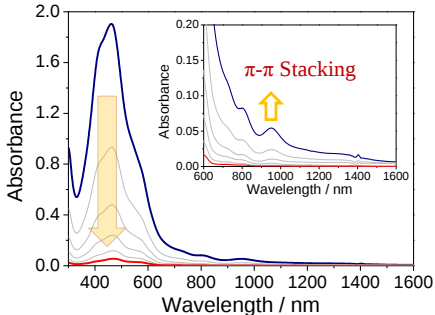


그림 2. Rosarin 1 과 2 의 농도별 흡광 스펙트럼 (좌) 과 Rosarin 2의 n-n 쌓임 거리에 따른 방향성 변화 (우)

# Symmetry-breaking Charge Transfer in Porphyrin Triad DAD

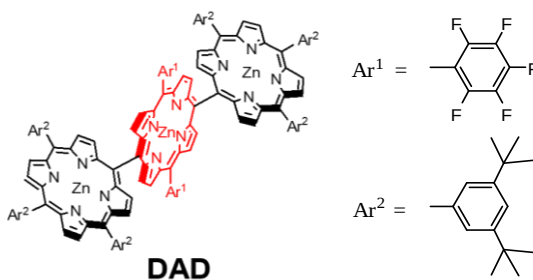


그림 1. 선형 포피린 삼량체의 구조

있다. 연결 부분을 삽입함으로써 각각 주개와 받개가 원래의 성질을 거의 유지하거나 아주 약하게 영향을 받게 할 수 있어서 주개와 받개가 어느 정도 빠르기로 전자를 주고 받는지, 또 그 주고 받아서 형성된 전자-분리 상태가 얼마나 유지되는 지에 대해 연구를 할 수 있다. 특히 분자가 들뜬 상태에서 대칭이 어떻게 변화하는지에 대한 연구를 대칭-깨기 전자-분리 (symmetry-breaking charge-transfer)라는 주제로 많은 연구자들이 이러한 시스템을 심도 있게 이해하려고 노력중이다. 메조 위치의 탄소간의 공유결합으로 직접 연결된 선형 포피린 삼량체 DAD를 목표 분자체로(A는 전자 받개, D는 전자 주개) 설정해서 4극자 대칭을 깨는 전하이동의 관한 연구를 수행했다 (그림 1). 4극자 대칭을 깨는 전하 이동은 결국 두 개의 포피린 단위체 사이의 전하이동을 의미하며 결국 쌍극자 상태를 이루게 된다.

이와 같은 연구를 실험적으로 증명하기 위해서는 적절한 대조군이 반드시 필요한데 DAD가 무극성 사이클로헥세인 용매에서는 일반적인 무극성 삼량체로서 비교 분석 하였다. 가장 기본이 되는 정류상태 흡광과 형광 스펙트럼을 통해 분자들의 바닥과 들뜬상태가 용매의 극성에 얼마나 영향을 받는지를 볼 수 있었다. 먼저, 기본적인 광물리적 성질을 밝히기 위해서 정류상태 흡광 및 형광 스펙트럼을 측정했다. 무극성 용매에서는 기존 포피린 배열체와 같은 특징을 보이는 반면, 톨루엔이나 벤조나이트릴 용매에서는 형광이 장파장으로 끌리고 더 넓은 양상을 확인했다. 이러한 특징이 형광에서 나타나는 경우, 일반적으로 단순히 Frank-Condon 상태가 용매에 따른 에너지 변화에 기인할 수도 있고, 그 상태에서 추가적인 전하이동 과정을 통해 전하이동 상태에 도달하여 생기는 변화일 수도 있다. 이를 구분하기 위해 형광 상위 전환 분광법을 이용해 면밀히 분석하였다 (그림 2). DAD가 사이클로헥세인에 있을 때에는 50 피코초 동안 시간에 영향을 받지 않는 형광 스펙트럼을 보인 반면, 톨루엔에서는 미세하게 장파장 쪽으로 가면서 밴드 비율이 달라짐을 관찰하였다. 이 때 형광 쌍극자 모멘트는 달라지지 않기 때문에 대칭깨짐 전하이동 현상에 기인한 것이 아니라 톨루엔이라는 4중극모멘트를 갖고 있는 용매와 분자의 빠른 시간안에서 상호작용에 기인한 것이라고 알 수 있었다. 반면 극성 벤조나이트릴 용매에서는 형광 쌍극자 모멘트가 50 피코초 동안 급격하게 감소하는 것을 관찰하여 이러한 극성 용매 조건일 때에 대칭깨짐 전하이동 현상이 일어난다는 것을 직접적으로 밝힐 수 있었는데 이는 오비탈간의 겹침이 감소하면서 형광 쌍극자 모멘트가 감소하기 때문이다. 즉, DAD가 빛을 받아 들뜬 상태에서 전하 이동으로 인해 대칭이 깨진 쌍극자 상태로 이동했다는 증거가 된다. 순간 흡수 분광법을 통해서도 같은 시간 성분을 갖는 것을 볼 수 있었다.

최근에 자연에서 발생하는 광합성 현상을 모방할 수 있는 다양한 분자 시스템을 합성하려 노력해왔다. 실제로 태양에너지는 안테나 복합체에 의해 흡수가 되고 반응 중심으로 전달되는데 이때, 길게 남아 있는 전자 분리 상태가 중추적인 역할을 한다. 따라서 전자-분리 상태의 근본적인 탐구가 필수적인 상황이고 이에 대한 연구들이 국제적으로 활발하게 진행되고 있다. 다양한 자연계-모방시스템 중에서 특히 전자 주개-받개 (Donor-acceptor) 분자들에 대한 연구들이 많은 주목을 받고 있는데, 지금까지 연구된 분자 시스템은 이러한 전자 주개와 받개 사이에 연결 부분을 삽입한 것들이 주를 이루고

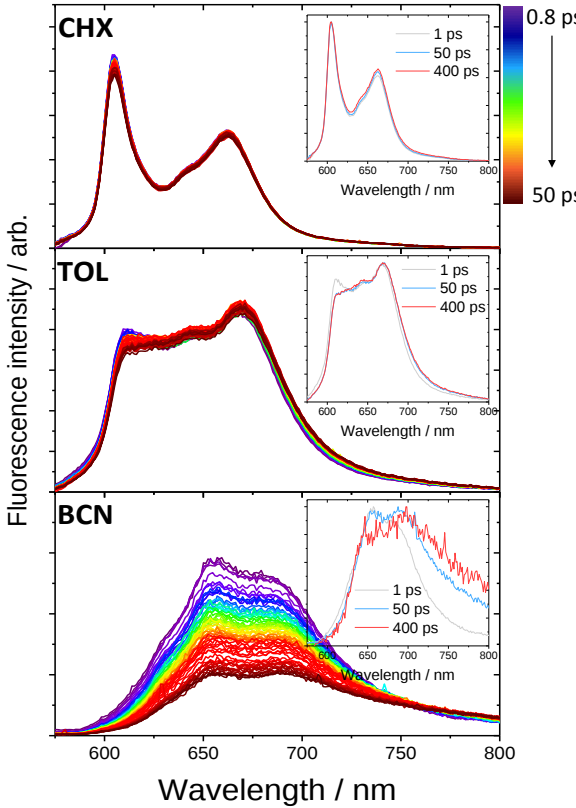
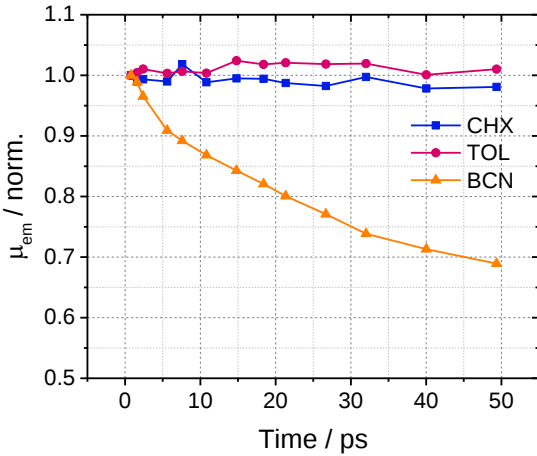


그림 2. 시간에 따른 형광 쌍극자 모멘트 (상), 50 피코초 동안의 형광 스펙트럼과 1, 50 400 피코초를 정규화한 스펙트럼 (하)

# Binding Properties and Charge Separation/Recombination Dynamics of TriBODIPY/Fullerene Complex

본 연구실에서는 트리보디피와 풀러렌 복합체를 대상 물질로 이들의 들뜬 상태에서의 전자이동 및 재결합 동역학을 연구하였다. 기본적인 트리보디피의 흡수 스펙트럼을 이해하기 위해 흡광 스펙트럼을 4개의 가우시안 함수로 피팅을 하였고, 이를 통해 강하게 엑시톤 커플링 된 상태와 약하게 엑시톤 커플링 된 상태의 에너지 차이를 알 수 있었다 (그림 1). 하지만 보디피 단량체의 에너지 준위를 정확히 알 수 없기 때문에 두 가지 방식으로 이에 접근할 수 있었다. 먼저 TD-DFT 계산을 통해서 가상의 보디피 단량체의 에너지 준위를 구하고 이를 계산한 트리보디피의 전자전이와 비교해봤을 때 아래와 위로 갈라지는 비율이 2:1 정도로 나타나는 것을 확인 하였다. 또한 행렬 대각화 방식을 이용해서 트리보디피를 이루고 있는 각각의 보디피의 전이를 가능한 방향들의 조합을 모두 고려해서 보디피 단량체를 기준으로 분석 결과, 마찬가지로 에너지가 2:1로 갈라지는 것을 확인할 수 있었다.

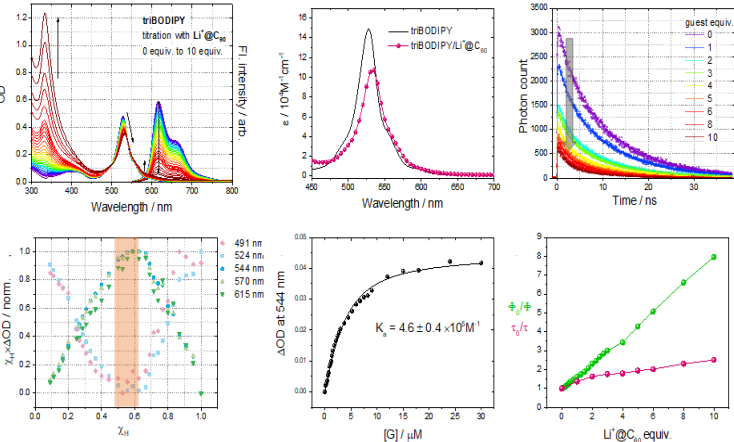


그림 2. 첨가한 풀러렌의 양에 따른 트리보디피의 흡광 스펙트럼(왼쪽 위), 비선형 피팅을 통해 도출한 흡광스펙트럼(중간 위), 같은 시간 동안(120 초) 받은 형광 감쇠 곡선(오른쪽 위), 잡플랏(왼쪽 아래), 결합상수(가운데 아래), 형광 양자수율과 형광 수명의 비율(오른쪽 아래).

또한 이 결합 상수는 보디피의 경우 형광 소멸을 통해 구했을 때도 비슷한 정도로 나타났기 때문에 더욱 결합 상수에 대한 확신을 할 수 있었다. 그리고 이 소멸이 전자 이동에 기인한 것인지는 실험적으로 순간 흡수 분광법과 전기화학을 이용해 정류상태 흡광을 측정한 것을 통해서 진행했다. 그림 3에서 보이듯이, 트리보디피는 5 나노초에도 절반 정도가 아직 들뜬 상태에 있는 반면, 풀러렌을 넣었을 때는 1040 nm 정도에서 풀러렌 음이온의 밴드가 나오는 것을 관찰했고, 이는 직접적인 들뜬 상태에 있는 트리보디피로부터 풀러렌으로 전자가 이동한다는 것을 말한다. 그리고 이 풀러렌 음이온 밴드의 세기가 감소하는 시간 즉, 전자 재결합 현상은 35 피코초에 일어나는 것을 관찰하였다. 이전에 확장된 로자린과 구조적으로 유사한 시스템임에도 상이한 동역학을 보이기에 추후에 확장된 로자린과 트리보디피의 자기장 효과에 대한 비교 연구를 추가적으로 해봄으로써 어떤 메커니즘으로 복합체의 전자 이동/재결합 동역학이 진행되는지 더 자세히 연구해 보고자 한다.

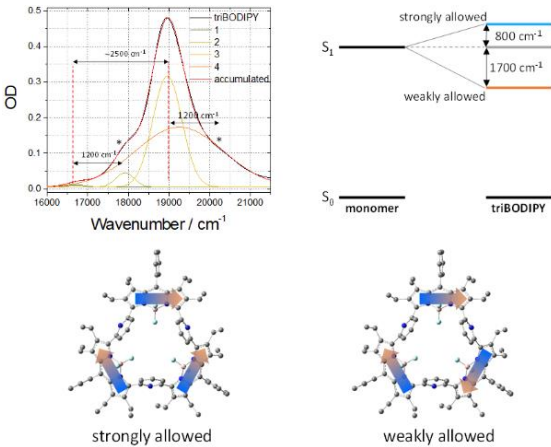


그림 1. 가우시안 분석 및 엑시톤 커플링 에너지(상)와 분자구조(하)

트리보디피와 풀러렌의 복합체가 얼마나 잘 형성되는지와 그 비율을 조사하기 위해서 풀러렌을 트리보디피 용액에 적정을 하면서 흡광도를 측정하였다 (그림 2). 이 때 트리보디피와 풀러렌의 결합 비율이 용액 상태에서 1:1로 이루어지는 것을 잡플랏을 통해 확인할 수 있었고, 결합 상수는  $4.6 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$  정도로 계산되었다. 이는 확장된 로자린 풀러렌 복합체보다 100배 이상 큰 것으로 트리보디피가 풀러렌과 복합체를 잘 이루는 것을 알 수 있었다.

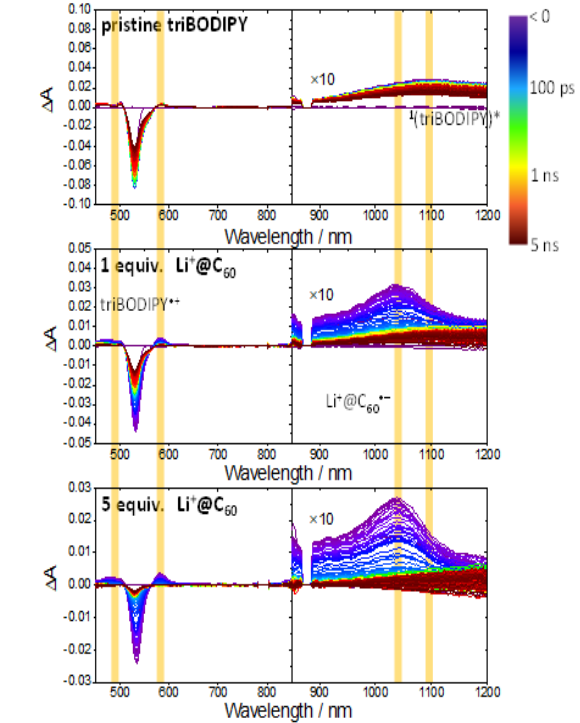


그림 3. 첨가한 풀러렌에 따른 트리보디피의 순간 흡수 스펙트럼

# Exciton Transport in Porphyrin Aggregates

최근 대체 에너지 문제가 대두되면서 에너지원으로 가장 주목받고 있는 태양광 에너지를 활용하기 위한 연구가 매우 활발하게 진행되고 있다. 태양광 에너지를 효율적으로 활용하기 위해서는 광포집 구조체가 포집한 광 에너지를 효율적으로 반응계로 전달해야 한다. 따라서 태양전지 및 광전자소자의 개발과 효율 향상을 위해서는 여기상태의 광 에너지인 엑시톤의 수송 현상을 근본적인 단계에서 이해하는 연구가 필수적이다. 포피린 분자 집합체는 자연계에서 관찰되는 효율적인 광합성 복합체와 그 구조와 기능이 유사하다는 점에서 해당 분야에서 많은 관심을 받고 있다. 하지만 나노미터 수준의 미시 공간에서 일어나는 엑시톤 확산 현상의 기저에 있는 메커니즘에 대한 이해는 아직 부족한 실정이다. 본 연구는 엑시톤 수송 현상의 메커니즘을 이해하기 위해 새로운 분석법을 제시하여 광물리적인 측면에서 깊게 접근함과 동시에 분자 집합체의 쌓임 정도에 따라 나타나는 엑시톤 거동의 차이를 비교함으로써 해당 분야의 기초적인 이해를 넓히는데 기여했다는 점에서 그 의의를 가진다.

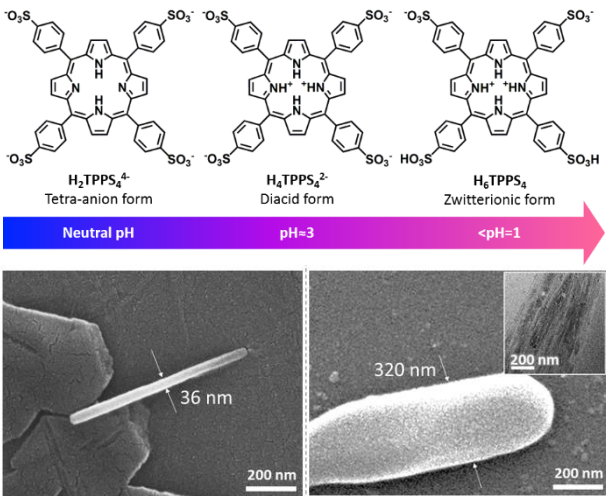


그림 1. pH 변화에 따른 포피린 분자의 양성자화(상)와 자가 조립 유도 이온 종류에 따라 쌓임 정도가 조절되는 포피린 분자집합체(하)

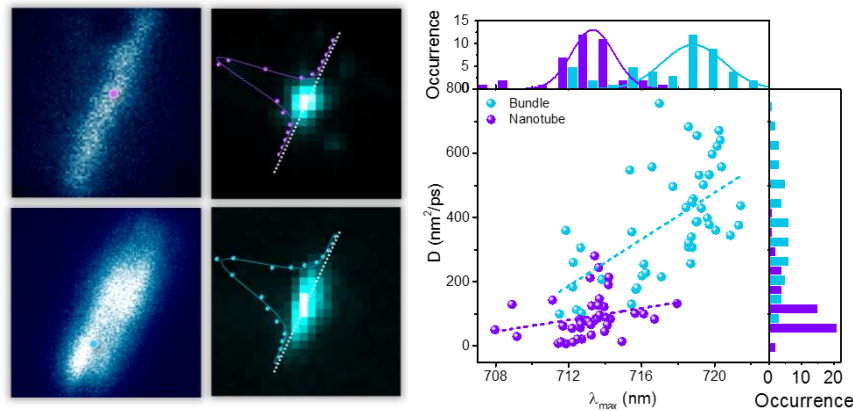


그림 2. 포피린 분자 집합체의 형광 이미지와 국소 부위 형광 프로파일 이미지(좌) 엑시톤 확산 계수와 형광 방출 에너지 상관관계도(우)

포피린 분자의 자가조립 (self-assembly) 조건을 조절하여 나노튜브 (nanotube) 형태의 집합체와 그것이 더욱 응집한 다발 (bundle) 형태의 거대 집합체를 형성하였고, 개별적인 나노튜브 가닥과 그것이 응집한 다발에서의 엑시톤 수송 현상을 비교 분석 하였다 (그림 1). 공초점 형광 현미경법을 이용하여 독립적인 단일 분자 집합체를 구분해낼 수 있었으며, 각 집합체의 국소 부위에 고정된 여기광 레이저 빔으로부터 공간적으로 확산된 엑시톤이 형광을 방출하는 것을 형광 프로파일 이미지로 분석하여 엑시톤의 공간적 거동을 나타내는 확산 계수를 규명하였다 (그림 2).

나아가, 각 집합체로부터 측정한 형광 프로파일 이미지와 각각에 해당하는 형광 스펙트럼을 연관 지어 나노튜브와 다발에서의 엑시톤 수송 현상의 차이를 도출해냈다. 모든 신호를 한꺼번에 검출하는 양상불 분광학 측정으로는 구분해낼 수 없는 정보를 공간 분해 분광학을 이용하여 정밀하고 효과적으로 얻어낼 수 있었다. 이를 통해, 포피린 분자 집합체가 더욱 응집하여 다발을 이루게 되면 엑시톤의 에너지 준위의 밀도가 높아지며, 주변 환경과의 결합도가 강해져 더욱 안정화된 에너지 준위로의 엑시톤 이동을 촉진한다는 것을 밝혀냈다 (그림 3). 이는 이전까지 규명되지 못 했던 다발 구조체에서 나타나는 향상된 엑시톤 수송 현상을 설명할 수 있는 중요한 실험적 증거를 제시했으며, 자연 모방 광포집 구조체의 구조-성질 관계를 밝혀냈다는 점에서 의의를 가진다.

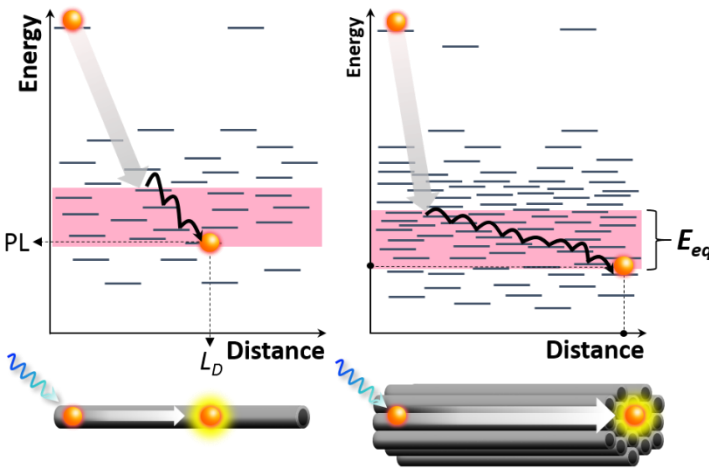


그림 3. 포피린 나노튜브(좌)와 다발 구조체(우)에서의 엑시톤 수송 현상 메커니즘 모식도

# Exciton Localization, Delocalization and Excimer Formation Dynamics in a PBI Tetramer Aggregate

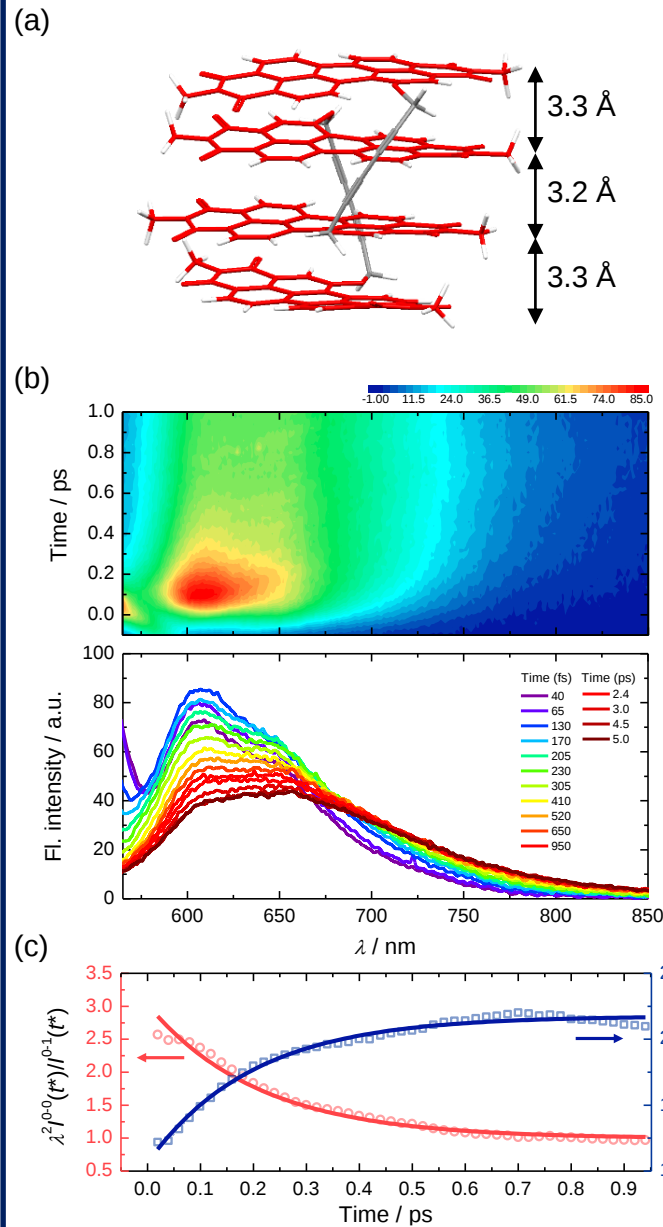


그림 1. PBI 사합체의 구조 모식도 (위), PBI 사합체의 시간 분해 형광 스펙트라 (중간), 엑시톤 결맞음 길이 및 엑사이머 준위 형성 동역학 변화 추이 (아래).

수와 동일함을 관찰하였다. 따라서 쌍임체 내에서 엑사이머 준위의 형성은 초기의 형성된 엑시톤의 결맞음 소멸과 관련 있다는 것을 알 수 있다. 본 결과는 이전에 관측된 PBI 이합체 및 올리고머 쌍임체에서의 시간 분해 형광 동역학과 일치한다. 하지만 PBI 올리고머 쌍임체는 두 시간상수(80 그리고 200 펨토초)의 엑시톤 결맞음 길이 변화 및 엑사이머 준위 형성 동역학을 나타내었던 반면, PBI 사합체는 200 펨토초의 단일 시간 상수만을 보였다. 80펨토초의 동역학이 긴 PBI 올리고머 쌍임체 내에서 일어나는 결맞음 엑시톤 전달과정임을 고려할 때, PBI 사합체는 짧은 길이로 인해 전체에 걸쳐 비편재화된 엑시톤이 다른 곳으로 이동할 수 있는 공간이 없기 때문에 오로지 엑시톤 편재화 및 엑사이머 준위 형성의 동역학만을 나타낼 수밖에 없다는 사실을 암시한다. 본 연구는 크기가 잘 정의된 쌍임체 내에서의 엑시톤 동역학을 우수한 시간 분해능을 지닌 형광 분광 장치를 이용하여 정량 및 정성적으로 분석한 최초의 연구임에 그 의의가 크다고 사료된다.

파이 공액 시스템(pi-conjugated systems)에 기반을 두어 만들어낸 초분자 자기 조립체(supramolecular self-assemblies)들은 광전지(photovoltaics) 및 센서(sensors)로의 응용뿐만 아니라 자연계의 광합성 식물 및 박테리아에서 일어나는 광경작(light-harvesting)과정의 기본원리를 이해하기 위한 모델로서 관련 연구 분야에서 많은 주목을 받아왔다. 하지만 크기가 잘 정의된 자연계의 시스템들과는 달리 인공적인 초분자 자기 조립체를 합성할 경우 조립체의 크기 또는 구조를 임의로 조절하기 용이하지 않다는 단점이 존재한다. 특히 현재까지의 연구들을 종합하여 볼 때, 뼈대 분자구조를 이용한 이합체(dimer)형태의 쌍임체들은 많이 보고되었지만 그 이상의 삼합체(trimer) 또는 사합체(tetramer)와 쌍임체들은 그 예시가 매우 한정적이었다. 최근 본 연구진은 퍼릴렌 비스이미이드 (perylene bisimide, PBI) 이합체의 이합체화를 통해 PBI 사합체(그림 1, 위)를 합성하는 데 성공하였다. 본 연구에서는 광대역 형광 상위 전환(broadband fluorescence upconversion) 분광법을 사용하여 측정한 시간 분해 형광 스펙트라의 변화를 자세히 분석하여 크기가 잘 정의된 자기 조립체에서의 초고속 엑시톤 거동을 밝히고자 하였다. PBI 사합체는 1 피코초 이내에 극적인 스펙트라의 변화를 나타내었고 이는 다음과 같다 (그림 1. 중간): 1) 단파장 영역(600-650 nm)에서 나타나는 형광의 빠른 소멸 및 진동-전자(vibronic) 봉우리 비율 변화, 2) 장파장 영역(700-850 nm)에서 나타나는 형광의 빠른 증가. 전자는 초기에 형성된 엑시톤의 결맞음 길이(또는 비편재화 정도)를 나타내주는 척도로서 시간 분해 형광 스펙트라를 여러 개의 가우시안 함수로 분해해내어 시간에 따른 진동-전자 봉우리 비율을 분석하면 결맞음 길이의 변화를 유추할 수 있었다. 그림 1의 아래에 보이듯, 광여기를 통해 PBI 사합체에 형성된 초기의 엑시톤 결맞음 길이는 대략 단위체 3개 정도가 됨을 알 수 있었다. 하지만 분광 장치의 시간 분해능을 고려했을 때, 이는 실제로 사합체 전체에 걸쳐 엑시톤이 비편재화 되어 있음을 암시한다. 또한 결맞음 길이는 200 펨토초의 시간 상수를 나타내며 빠르게 감소하며, 이는 장파장 영역에 해당하는 엑사이머(excimer) 준위의 형광 신호가 증가하는 시간 상

# Depolarization Dynamics of Self-assembly PBI Tetramer and More Extended Oligomer

파이 전자 쌓임 ( $\pi-\pi$  stacking)에 의해 생성되는 초분자 집합체 (supramolecular aggregate)는 비 공유 결합에 의한 상호작용이라는 특징으로 인하여 온도, 농도, 용매의 극성 그리고 배위 위치에 결합하고 있는 치환기에 따라 같은 분자 단위에서도 다양한 형태의 쌓인 구조를 나타낼 수 있기 때문에 분자 간 상호작용 (intermolecular interaction)을 연구하는 새로운 거점으로 각광받고 있다. 이러한 파이전자 분자 시스템의 자기 조립체들의 쌓임현상은 OLED, FIT 등 다양한 형태의 분자 소재로서 응용될 수 있다. 특히 빛을 흡수하거나 발광하는 과정에서 자기 조립체의 쌍극자 모멘트의 형성 및 변화를 분석하는 것은 용액 상에서의 초분자 집합체의 상호작용을 이해하는데 중요하다. 이를 위해서 다양한 유기 분자 시스템들이 연구 대상으로 이용 되어왔다. 하지만 다양한 유기 분자 시스템 중에서도 평평한 분자 구조에 의해 매우 우수한 쌓임 현상을 나타내는 퍼릴렌 비스이미이드 (perylene bisimide; PBI)는 단위체들이 가지고 있는 강한 흡광, 손쉬운 물성 변화, 강한 분자간 상호작용 등의 특징들로 인하여 엑시톤 동역학과 엑사이머 형성과정의 분광학적인 연구가 활발히 진행되고 있다.

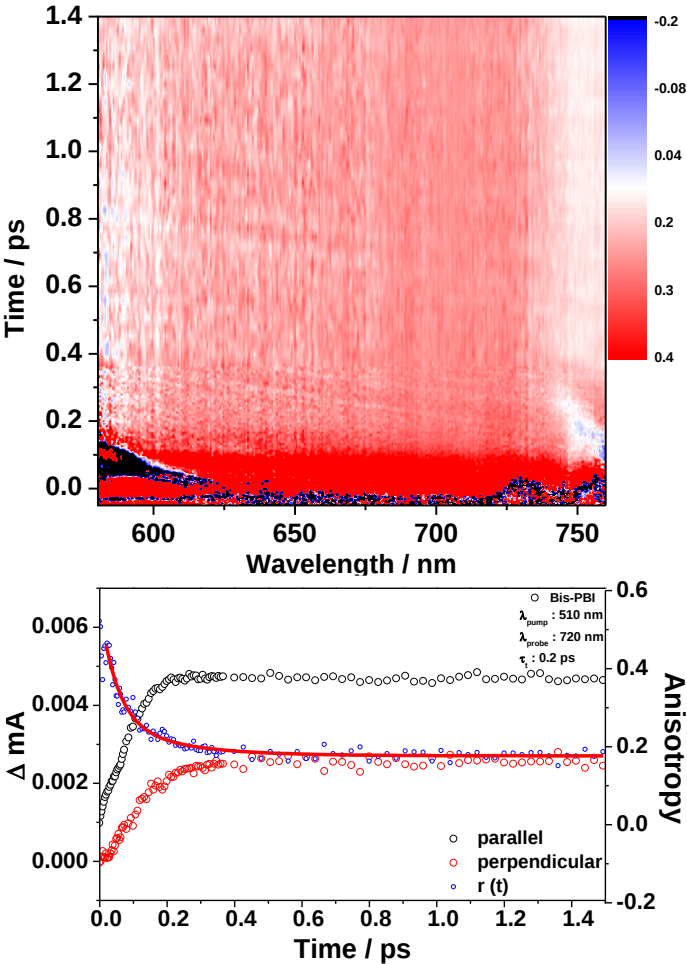


그림 2. 사합체 PBI에서의 펨토초 광대역 순간 흡수 분광 비등방성 (TAA) 측정 (이차원 그래프 (상)과 비등방성 변화 추이(하))

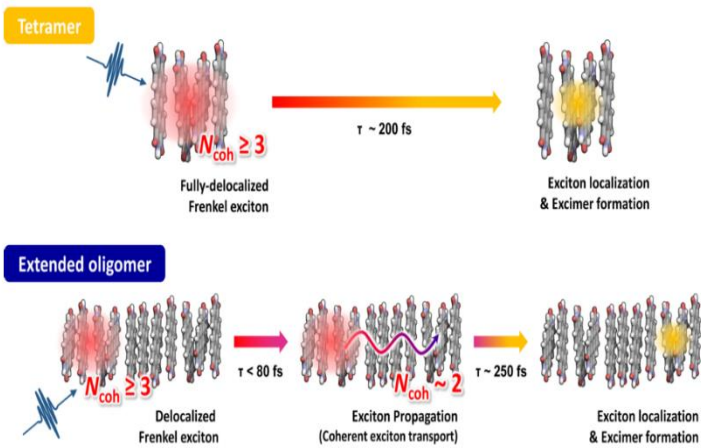


그림 1. PBI 사합체 (상) 및 올리고머 (하) 에서의 엑시톤 동역학 모식도

본 연구에서는 이러한 쌓임 구조의 크기가 다른 두 집합체인 사합체 그리고 올리고머에서의 최초 들뜬 상태에서의 비편광 동역학을 밝혀내고자 하였다 (그림 1). 평면 구조의 파이 전자 분자 시스템의 경우 단일 분자들 사이의 상호 작용을 통해 면과 면이 맞닿은 구조를 갖는 파이 전자 쌓임에 의한 자기 조립체를 형성하게 된다. 이러한 분자 시스템의 큰 특징은 장파장 영역에서 엑사이머 형광이라 칭하는 형광이 낮은 수율로 나타내게 된다는 것이다. 이러한 형광의 변화는 최초 들뜬 상태에서 생성되는 Frenkel 엑시톤이 여러 PBI 단위체들 사이에 비편재화 되었다가 사합체에서는 약 200 fs에 엑사이머 상태로 전환되며 편재화되고 올리고머에서는 약 80 fs 동안 다합체 내를 빠르게 이동하는 결맞음 에너지 전달 현상을 보인 후 250 fs에 엑사이머 상태로 전환되며 편재화됨에 의한 것임이 기존 연구에 의해 밝혀졌다 (그림 1, 하). 이 특징과 일치하는 현상으로써 사합체에서 펨토초 순간 흡수 분광법 비등방성 (TAA) 실험을 통해 Frenkel 엑시톤이 최초 들뜬 상태에서 엑사이머 상태로 전환되는 편재화 과정에서 쌍극자 모멘트의 변화가 같은 시간 영역에서 일어남을 밝혀내었다 (그림 2). 이러한 연구 결과를 바탕으로 추후 올리고머에서의 엑시톤의 동역학 역시 TAA 실험을 통해 초분자 집합체에서 크기에 따라 쌍극자 모멘트의 변화를 분석하고자 한다. 본 연구를 통해 기존에 밝혀진 파이전자 쌓임 구조의 형광 관찰 및 Frenkel 엑시톤의 동역학을 새로운 방법으로 실험적으로 직접 관찰 할 수 있었으며, 이를 통해 에너지 전달 메커니즘 역시 관찰할 것으로 기대됨으로써 파이전자 쌓임 분자체에 대한 이해와 향후 실제 소자로 응용함에 있어서의 가이드 라인을 제공할 것으로 생각된다.

Conformational Structures in Large Macrocyclic Oligothiophenes

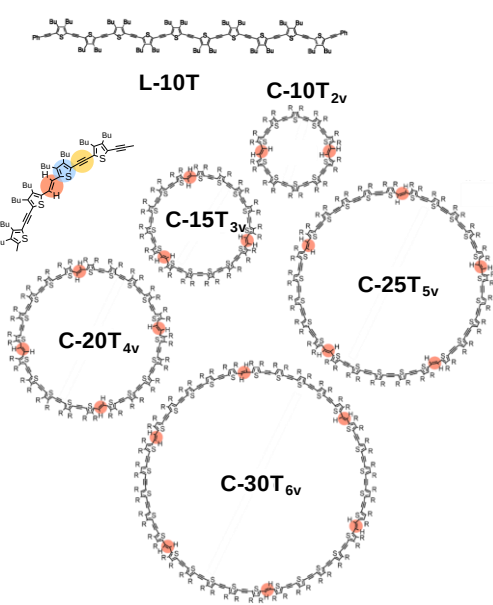


그림 1. 선형 및 고리형 올리고 싸이오펜

이와 같이 큰 고리형 싸이오펜에서 선형 구조의 동역학을 보이는 결과를 통해 두가지 가능성을 유추해 볼 수 있다. 첫번째로 큰 올리고 싸이오펜에 결함이 없이 전체가 하나의 양자 구조를 가져서 하나의 발광 유닛으로 작용하여  $k=\pm 1$  중 낮은 에너지 상태가 여기되는 경우를 생각할 수 있다. 두번째는 고리형 구조가 크게 깨지게 되어, 두개 이상의 비고리형 구조의 발광체가 발광 유닛으로 작용하는 경우를 생각해 볼 수 있다. 두가지 경우 중 어떤 해석이 일치하는지 확인해 보기 위해서, 발광 유닛이 하나의 양자상태로 존재하는지 여부를 확인해볼 수

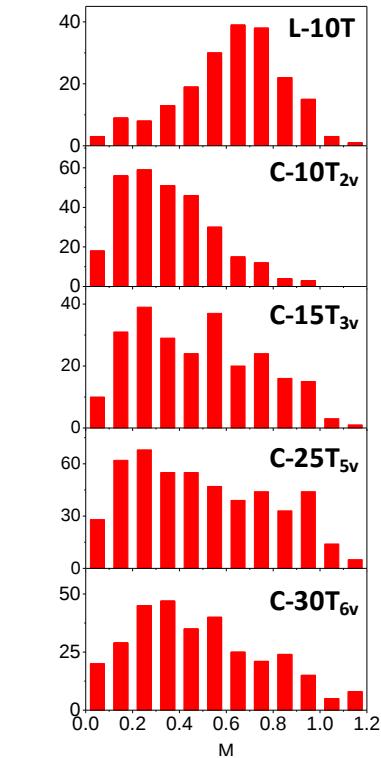


그림 2. 크기에 따른 올리고 싸이오펜의 M 값의 히스토그램

파이전자 공액이 확장된 폴리머 및 올리고머 분자들은 높은 흡광도와 양자수율을 가지며, 전자 전달성이 뛰어나고, 구조적으로 안정한 특징을 갖고 있다. 특히 그 중에서도 싸이오펜을 구성 유닛으로 하는 폴리머 및 올리고머들은 그 뛰어난 특성으로 인한 태양전지, 발광다이오드 등 다양한 광학 소자로의 응용 가능성으로 인해 많은 관심을 받아오고 있다. 이들을 이용하여 제작된 소자들의 효율성을 높이기 위해서는, 심도있는 연구를 통해 이들의 광물리적 특성을 이해하는 것이 중요하다. 따라서 본 연구실에서는 다양한 구조 또는 연결체를 갖는 올리고 싸이오펜 분자 시스템의 광물리적 특성을 시간 분해 및 단분자 분광법을 통해 알아보고자 하였다 (그림 1). 그 중 고리형 올리고 싸이오펜에서의 크기에 따른 구조를 밝히고 그에 따른 광물리적 특징을 밝히고자 단분자 형광 분광학 (Single molecule fluorescence spectroscopy) 연구를 진행하였다.

여기 편광 분광학 (Excitation polarization spectroscopy) 실험을 통해 형광세기의 변조 깊이 (Modulation depth) M 값을 측정하였고, 고리형 올리고 싸이오펜의 크기가 커짐에 따라 M 값이 평균값이 점점 크게 나타나는 결과를 관찰하였다 (그림 2). C-10T<sub>2v</sub>의 경우 고리형 구조를 대부분 유지하고 있는 것으로 보이지만 그보다 큰 C-15T<sub>3v</sub>~30T<sub>6v</sub> 분자의 경우 M값이 큰 형태의 분포가 나타났다. 이는 고리형 올리고 싸이오펜의 크기가 커지면서 고리형 구조에서 벗어나는 구조를 가진 싸이오펜 분자들이 선형에 가까운 흡광 유닛을 가졌기 때문인 것으로 보인다.

있는 공초점 동시성 측정 (Coincidence measurement) 실험을 진행하였다 (그림 3). 고리형 올리고 싸이오펜 분자의 크기가 커짐에 따라  $N_C/N_L$  값이 커지는 것을 확인함으로써 크기가 커짐에 따라 고리형 구조에서 벗어나게 되면서 싸이오펜 분자 내에 결함이 생겨나고 그로 인해 비고리형의 발광 유닛 여러 개로 발광하는 것이라 볼 수 있다. 이러한 연구는 고리형 파이공액 시스템의 크기에 따라 달라지는 구조 변화와 그에 따른 광물리적 특징에 대한 이해를 도울 수 있는 이정표를 제시할 것으로 생각된다.

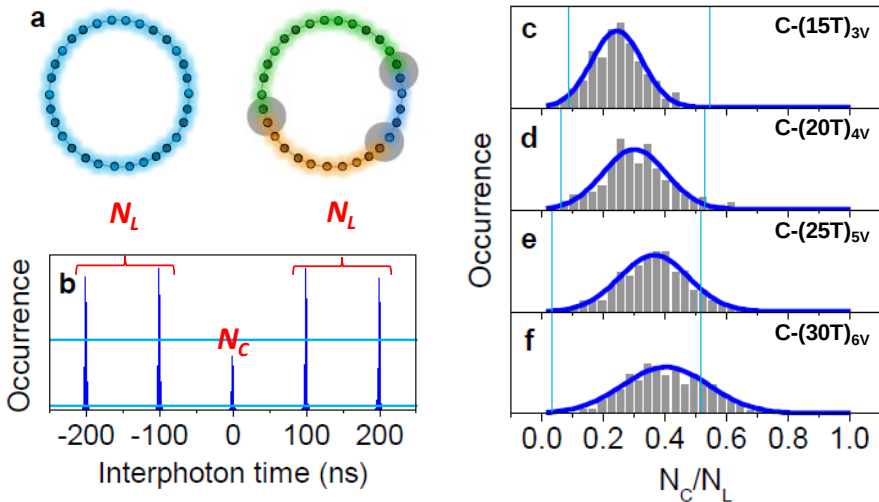


그림 3. a) C-30T<sub>6v</sub>의 발광 유닛 예시 b) C-30T<sub>6v</sub>에서 대표적인 광 상관 히스토그램 c-f) 크기에 따른 올리고 싸이오펜의  $N_C/N_L$  값의 히스토그램

# Structural Dynamics of [n]Cycloparaphenylenes

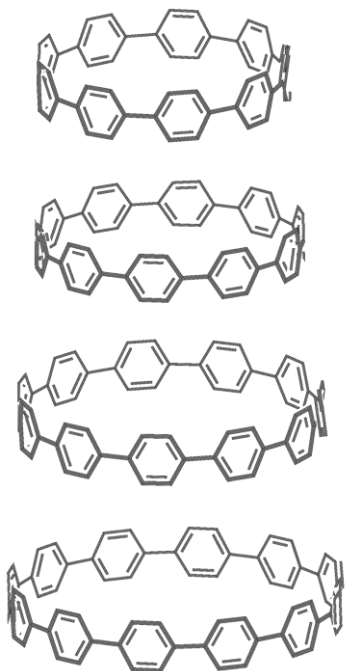


그림 1. 페닐로 구성된 고리형 파이 공액 확장체 ([N]CPP (N=9-12))

본 실험 결과로부터, 광여기 방법에 따라 들뜬 상태에서의 구조 변화가 서로 다른 속도 상수로 일어나며, 초기의 들뜬 상태의 분자의 구조가 광여기 방법에 따라 다른 것을 알 수 있었다. 이것은 단일 및 이광자 흡광의 선택 규칙 (selection rule) 이 다르기 때문에 일어난 결과로 생각된다. 현재 바닥상태에 존재하는 다양한 구조들을 분자 동역학 시뮬레이션을 (molecular dynamics simulation) 통해 얻는 것과 구조들에 대한 이광자 흡수 능력 (two-photon cross-section) 값을 이론적으로 계산하는 것을 진행하고 있다 (그림 3). 이광자를 이용하여 광여기 시켰을 경우, 중심 대칭성을 잘 유지하고 있는 원형 대칭성의 구조들이 효율적으로 들뜨게 되는 반면 단일 광자 광여기의 경우, 중심 대칭성이 완화된 구조들이 들뜨게 될 것으로 보이며, 본 구조적 차이에 따라 초고속 엑시톤 편재화 과정 및 구조변화를 수반한 비편재화 과정의 양상이 상이하게 일어나는 것으로 사료된다.

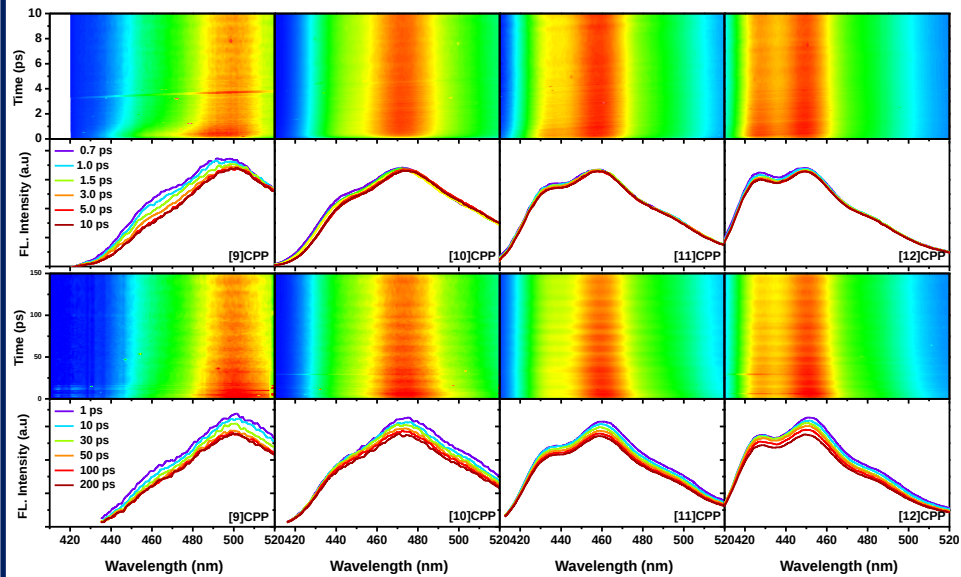


그림 2. 단일 (위) 및 이광자 (아래) 광여기에 따른 시간 분해 형광 스펙트럼

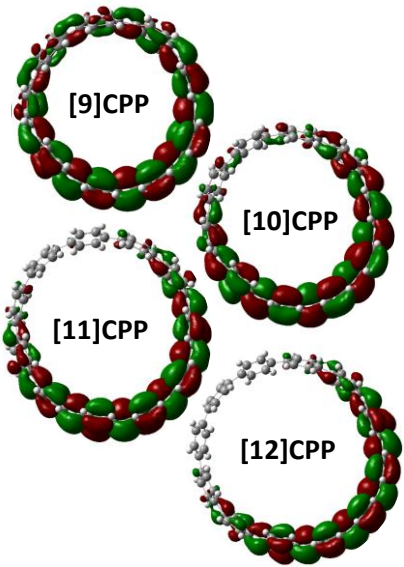


그림 3. DFT 계산을 통해 얻어진 광여기 상태에서 편재화 된 엑시톤

# Magnetic Field Effect on Singlet Fission of Pentacene Dimers

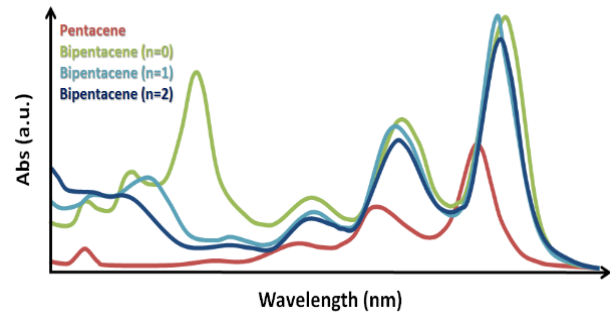
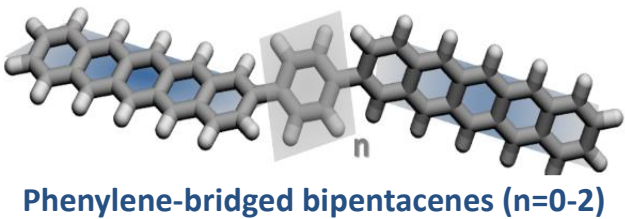


그림 1. 페닐 유닛으로 연결된 펜타신 이합체의 구조 및 정류상태 흡광 스펙트럼

결합된 삼중항 상태는 아홉 개의 스핀 준위들로 구성이 되어 있으며 그 스핀 준위들은 다양한 자기적 상호작용을 통하여 스핀 다중항들이 혼재되어 있다 (spin mixing). 스핀 다중항 간의 상호작용은 외부 자기장 의하여 영향을 받으며 정류상태 형광 수율이 외부 자기장 세기에 의하여 변화하는 양상이 과거로부터 관찰된 바 있으나 외부 자기장에 의한 형광 수율 변화가 어떠한 메카니즘으로 이루어지는 지에 대한 직접적 관찰은 미흡한 상황이다. 외부 자기장에 의한 결합된 삼중항 내의 아홉 개의 스핀 상태들 간의 상호작용 변화는 단일항 엑시톤에서 결합된 삼중항 상태로의 형성 및 결합된 삼중항 상태가 두 개의 삼중항으로 분열하는 과정에 모두 영향을 미칠 수 있을 것으로 사료되며 본 연구진은 자기장이 접목된 시간 분해 분광법을 이용하여 전 시간 영역에서의 여기 상태 동역학을 관찰함으로써 결합된 삼중항의 형성 및 분열 과정에 대한 외부 자기장 효과를 연구하였다. 단일항 분열 현상에 대한 외부 자기장 효과를 연구하기 위하여 페닐 유닛을 연결체로 하는 공유결합으로 연결된 펜타신 이중체를 합성하고 본 시스템에 대한 외부 자기장 하에서의 순간 흡수 스펙트럼 측정을 수행하였다 (그림 1). 연결체인 페닐 유닛의 개수를 조절함으로써 이웃한 두 펜타신 개체 간의 오비탈 상호작용의 세기가 달라지고 단일항 분열 현상의 속도 상수 값이 변화하는 것을 우선적으로 관찰하였다. 본 실험 결과는 단일항 분열 현상이 오비탈 상호작용에 따른 전자 이동의 결과로서 수반되는 현상이라고 제시하는 이론적 연구들에 부합하는 데이터로 사료된다. 동일한 전자 준위를 가지는 다양한 스핀다중도 상태들의 에너지적 축퇴를 깨뜨리는 교환에너지의 세기 역시 전자들이 위치하고 있는 오비탈간의 오버랩 (orbital overlap) 정도에 따라 달라지게 된다. 따라서 펜타신 간의 거리를 조절함으로써 결합된 삼중항 상태 내의 아홉 개의 스핀 준위 간의 자기적 상호작용 양상이 변화하게 되며 이에 따른 자기장 효과를 연구하였다. 페닐 연결체 없이 직접적으로 연결된 펜타신 이중체의 (BP0) 경우 순간 흡수 측정에서 외부 자기장 효과가 나타나지 않는 것으로 관찰 되었다. 반면 연결체의 페닐 개수가 1개인 펜타신 이중체에 (BP1) 대해서는 삼중항쌍 형성의 양이 정상적으로 변화하는 것을 관찰하였다 (그림 2). 본 연구진은 추가적으로 페닐 연결체의 개수가 증가한 시료들에 대한 분광 측정을 계획하고 있으며 이론적으로 본 현상을 규명하는데 목표하고 있다.

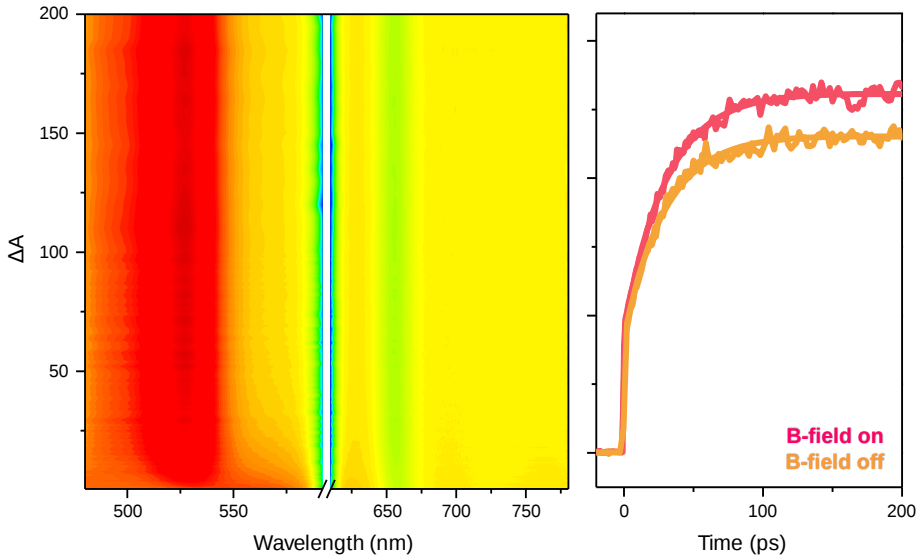


그림 2. BP1의 순간 흡수 스펙트럼 및 자기장 하에서의 동역학 변화 양상

Rashba Couplings in APbBr<sub>3</sub> (A = CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>, Cs) Perovskites

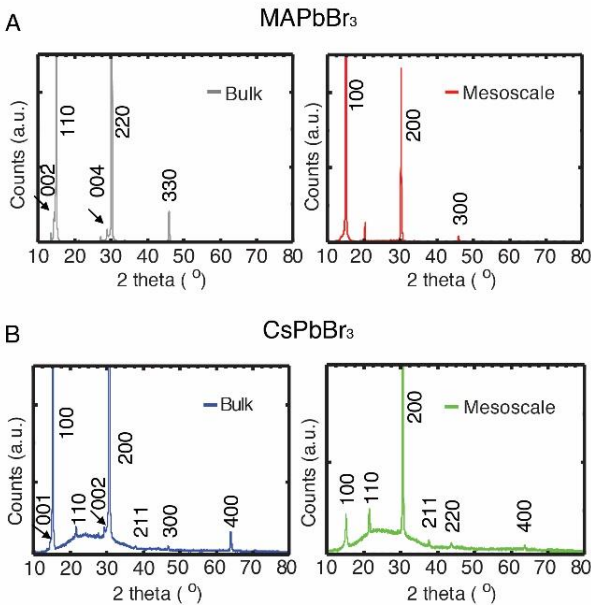


그림 1. 결정 크기에 따른 X-ray 회절 데이터. A 위치 양이온의 종류와 관계없이 결정크기가 작아 지면서 (좌→우) 더 높은 대칭성을 보인다.

작아지면서 결까지 픽들이 사라지며 더 높은 대칭성을 가지는 것을 확인할 수 있었다 (그림 1). 세부적으로는 점대칭성(inversion symmetry, centro-symmetry)이 회복된 Cubic (*Pm-3m*) 구조를 가지게 되는 것을 확인하였다. 이 결과를 반영하여 밀도함수이론 (DFT) 계산을 진행하였고, 해당 구조에서 확실하게 감소된 라쉬바 스핀-궤도 결합을 확인할 수 있었다 (그림 2). 라쉬바 스핀-궤도 결합이 존재할 경우에는 밴드갭에서의 전도띠 및 원자가띠를 결정방향에 따라 분리시켜 간접전이 밴드갭 (indirect bandgap)을 형성한다. 이는 결과적으로 스핀 및 모멘텀금지전이 (spin- and momentum-forbidden transition)를 유발하여 발광성질을 감소시키는 요소로 작용하는데, 이번 결과를 통해 결정크기를 작게 만드는 것만으로도 이 라쉬바 스핀-궤도 결합을 억제하여 발광성질을 개선시킬 수 있다는 것을 확인하였다. 이는 발광 세기 및 양자효율 증가, 직접전이 밴드갭 형성으로 인한 전하수송체 수명 감소 등으로 나타났다 (그림 3). 이 연구는 페로브스카이트 기반 발광소자를 구상하고, 제작함에 있어 기초적 관점에서의 직관을 제공한다는 점에서 큰 의의가 있다.

최근 본 연구팀은 다양한 유무기 할라이드화 납 페로브스카이트 (APbX<sub>3</sub> perovskites)에서의 전하수송체 생성, 이동 및 소멸 등 전하수송체 동역학에 대하여 연구해왔다. 유무기 할라이드화 납 페로브스카이트 박막의 경우 태양 전지에서 뿐 아니라 발광소자 (Light-emitting device, LED)에서도 높은 광량, 색순도, 효율 등의 면에서 기존 기록을 경신하며 차세대 소재로 각광받고 있다. 좀 더 나은 페로브스카이트 기반 발광소자를 제작하기 위해서는 박막 내 결정의 나노구조와 발광 성질 간의 관계를 기저 메커니즘을 연구하여 알아내는 것이 중요하다. 본 연구에서는 형광 수명 분석, X-ray 및 전자 회절 분석, DFT 계산을 통하여 A 위치 양이온의 종류에 관계없이 결정의 크기가 결정 구조 및 그에 따른 스핀-궤도 결합에 어떤 영향을 주는지를 분석하여, 최종적으로 페로브스카이트 박막의 광물리적 현상 변화의 원인을 밝히고자 하였다. 결정 크기에 따른 광물리적 성질 변화 및 그 원인을 분석하기 위하여 결정크기가 약 200 그리고 수 10 나노미터에 해당하는 페로브스카이트 박막을 제작하였다. 해당 박막을 고해상도 주사 전자현미경 및 투과 전자현미경을 이용하여 박막의 두께, 러프니스 및 결정 크기를 직접 확인하였다. 이 박막들의 X-ray 회절 분석 결과 A 위치 양이온의 종류에 관계 없이 (CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub> 혹은 Cs) 결정크기가

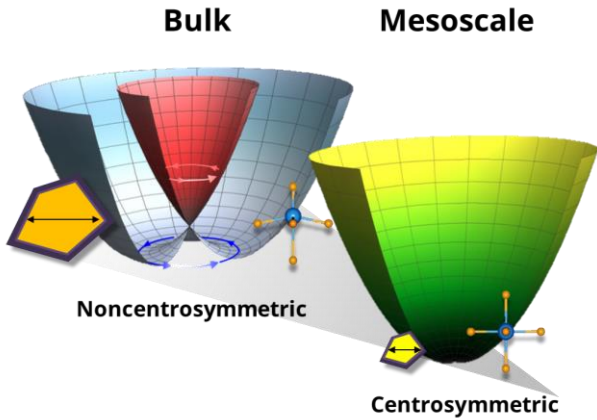


그림 2. 결정구조 대칭성 증가로 인한 밴드갭 위치에서의 라쉬바 스핀-궤도 결합의 감소

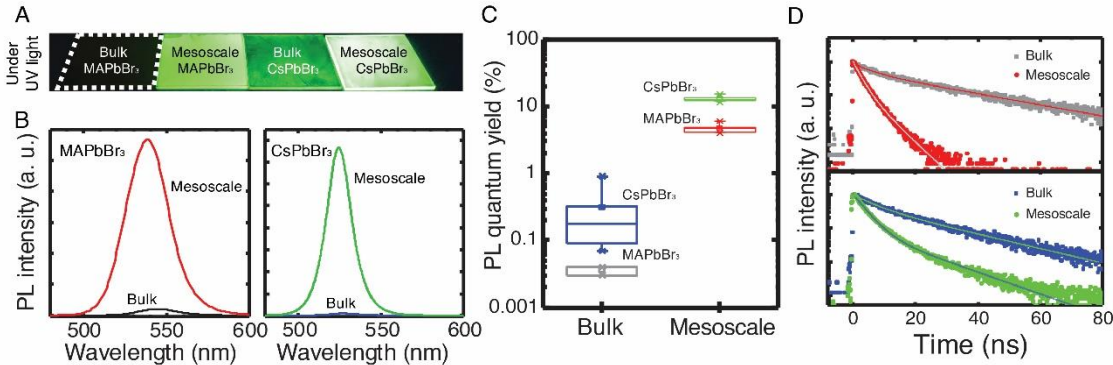


그림 3. 라쉬바 스핀-궤도 결합이 감소함으로 인해 나타나는 작은 결정크기를 갖는 박막에서의 발광 특성 향상

# Guanidinium-incorporated Perovskite-based LED Devices

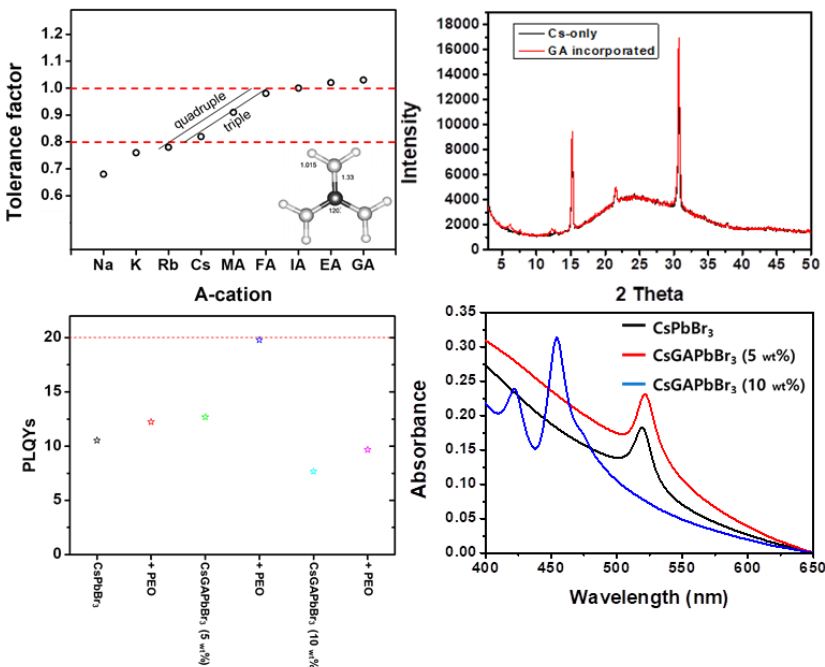


그림 1. A 위치 양이온에 따른 페로브스카이트 물질의 Tolerance Factor와 Cs 기반 페로브스카이트 물질에 Guanidinium (GA) A 양이온이 첨가되었을 때의 물질의 구조적/분광학적 특성 변화

3D 구조를 형성하는 Cs 양이온에 비해 이온의 크기가 큰 GA 양이온은 2D 구조를 형성하기 때문에 (그림 1, 상-좌) 3D 구조를 이루는 양이온에 GA 양이온이 첨가될 경우 다차원 구조를 갖는 페로브스카이트가 형성된다. 이는 XRD pattern 분석에서 낮은 2 theta 값에서의 새롭게 생겨나는 peak을 통해 확인 할 수 있으며 (그림1, 상-우), 흡광 스펙트럼에서 낮은 파장에서 나타나는 새로운 peak을 통해서도 다시 한 번 확인할 수 있다 (그림1, 하-좌). 또한 GA 양이온의 첨가로 인해 기존 3D 구조의 페로브스카이트의 결정성이 크게 증가되었을 뿐만 아니라 흡광 및 형광 효율 등 분광학적 특성이 크게 증대되는 것을 확인하였다. A 위치 양이온에 GA 양이온이 첨가됨에 따라 페로브스카이트 물질의 구조적, 분광학적 특성이 크게 향상되는 것을 확인하였고, 이러한 향상을 기반으로 페로브스카이트 물질을 발광소자에 적용하고자 하였다. GA 양이온이 첨가된  $\text{Cs}_x\text{GA}_{1-x}\text{PbBr}_3$  박막의 경우  $\text{CsPbBr}_3$  기반 발광소자와 비교하여 전기적 발광 (Electroluminescence) 이 크게 증가되었고 (그림 2, 하-좌), 이와 마찬가지로 발광소자의 전류 효율 (Current efficiency, Cd/A) 또한 크게 증가하는 것을 확인 하였다. 따라서 본 연구는 앞으로의 페로브스카이트 소자 효율 향상 연구에 있어 큰 기여를 할 것이라 사료된다.

유무기 복합 페로브스카이트 물질은 최근 태양 전지의 전력 변환 효율 (Power conversion efficiency, PCE) 의 급격한 향상으로 인하여 큰 주목을 받고 있다. 태양전지의 효율 증대에 초점을 맞춘 최근 연구는 결정립 크기의 조절, 결정립계 부동화 및 페로브스카이트 박막의 양이온 그리고 할라이드 조성의 변화 등 다양한 방향에서 진행되고 있다. 이와 동시에, 뛰어난 광학 특성 및 제조의 용이성 면에서 장점을 갖고 있는 유무기 복합 페로브스카이트 물질은 태양전지 뿐만 아니라 발광소자 (Light emitting diode, LED), 레이저 등 수 많은 분야에 응용되고 있다. Guanidinium (GA) 양이온은 쌍극자 모멘트가 거의 0에 가까워 페로브스카이트 물질을 이루었을 때 장기적 안정성을 기대할 수 있으며, 결정립계를 안정화시켜 소자의 응용성을 높일 수 있는 물질의 광학적 특성들을 크게 증대시킨다는 연구 결과들이 보고되고 있다. 이에 본 연구실에서는 GA 양이온을 첨가하여 효율 및 안정성이 크게 증가된 페로브스카이트 기반 발광소자를 개발하고자 하였다.

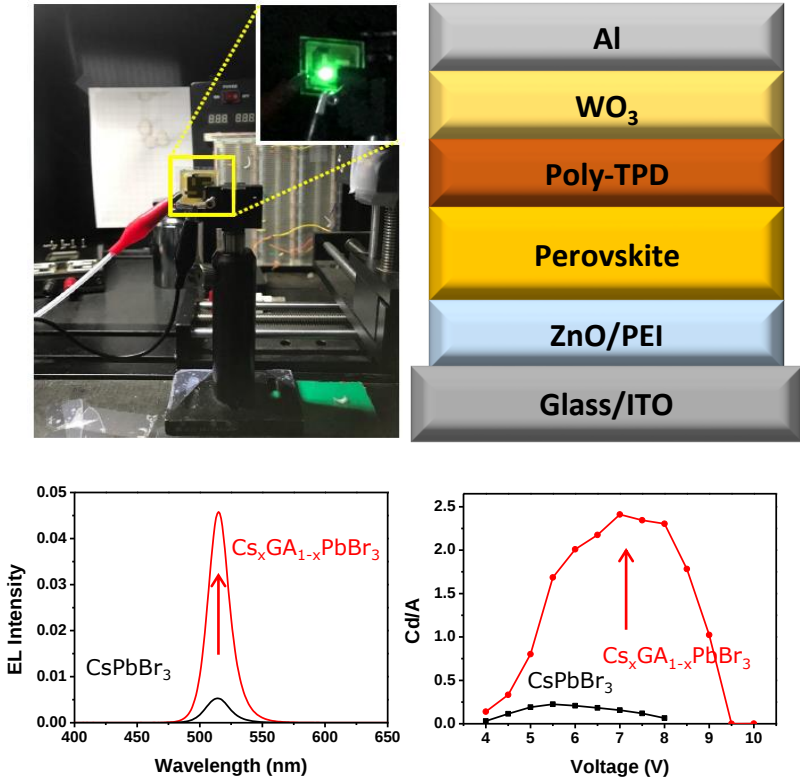


그림 2. Cs 기반 페로브스카이트 발광소자 구조 (상)와 A위치 양이온의 조성에 따른 발광소자의 효율 (하)

Oriented Perovskite and its Polarization-dependence

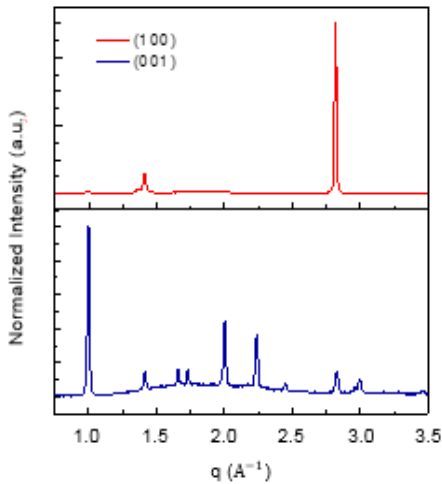


그림 1. (100)(위)과 (001) (아래)방향으로 자란 MAPbI<sub>3</sub> 박막들의 XRD

기존에 널리 알려진 MAPbI<sub>3</sub> 박막의 일반적인 발광 이미지와는 다르게 줄기처럼 자란 모습을 볼 수 있었다 (그림 2). 기존 연구에서 광전류는 편광방향에 의존한다는 것이 보고 되었기 때문에 xy평면 상에서 자란 박막이 빛을 흡수하는 정도 또한 편광에 영향을 받는지 확인하기 위하여 넓은장 여기 편광 형광 분광법 실험을 진행하였다. 선형 편광을 회전시키면서 박막을 여기시키면 형광 세기 변조가 일어나고 이를 통해서 얻은 변조 깊이 ( $M=(I_{\text{max}}-I_{\text{min}})/(I_{\text{max}}+I_{\text{min}})$  ( $0 \leq M \leq 1$ )) 값은 쌍극자 모멘트의 방향성을 알 수 있게 해준다 (그림 3). 이 실험을 통해 (100) 배향 박막은 성장한 평면과 동일한 평면 상에 놓인 흡수 쌍극자 모멘트를 갖고 (001) 배향 박막은 Z축 방향으로 놓인 쌍극자 모멘트를 갖는다는 결론을 내릴 수 있었다. 따라서 다른 방향으로 놓인 쌍극자 모멘트를 가진 두 가지 박막을 소자에 각각 적용하였을 때 다른 광전자적 성질을 초래할 수 있고 이는 새로운 광전지 소자 개발에 기여할 수 있을 것이라고 생각된다.

페로브스카이트 물질은 높은 양자효율, 손쉬운 밴드갭 조절 그리고 좁은 폭의 발광 스펙트럼과 같은 뛰어난 특징들 때문에 현재 디바이스에 적용하는 면에서 많은 각광을 받는 물질이다. 따라서 페로브스카이트에 관해 많은 연구가 진행되어 왔었지만 고체상에서 배열 방향성에 따른 성질 규명은 아직 완전히 규명되지 않은 상태이다. 특히, 기존의 연구들은 (001) 배향이거나 무작위로 배향된 페로브스카이트 박막에 관한 연구가 대부분이었기 때문에 (100) 방향으로 배향된 페로브스카이트 박막을 제조하는 방법과 그 특성은 잘 알려지지 않았다. 이에 본 연구팀은 (100) 방향으로 배향된 MAPbI<sub>3</sub> 박막을 합성하여 넓은장 여기 편광 형광 분광법 (Excitation Polarization Fluorescence Spectroscopy) 실험을 통해 전이 쌍극자 모멘트와 관련된 배향막의 편광 의존성을 조사하였다.

XRD 측정에서 xy평면 상에서 배향된 페로브스카이트 박막의 경우  $2\theta=20.0, 40.8^\circ$  에서 명확하고 날카로운 피크를 보여주므로 박막이 주로 (100) 방향으로 성장한다는 것을 볼 수 있었다 (그림 1). 넓은 장 발광 이미지에서도 볼 수 있듯이 (100) 배향 MAPbI<sub>3</sub> 박막은

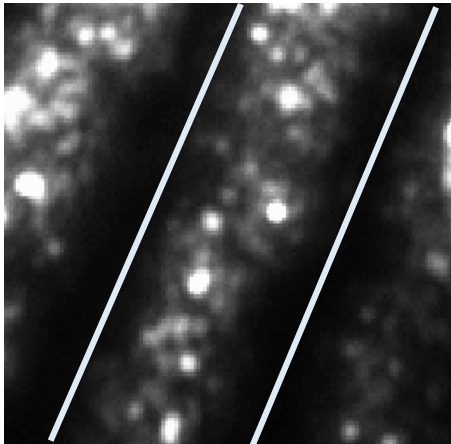


그림 2. MAPbI<sub>3</sub> 박막의 넓은장 발광 이미지

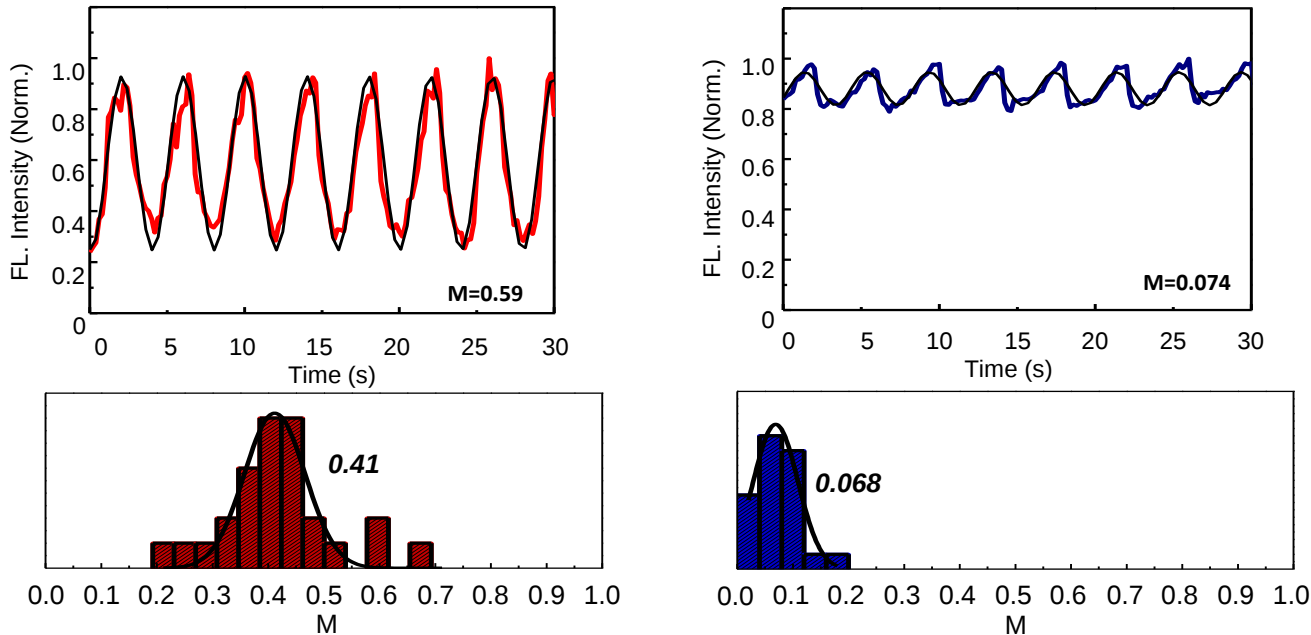


그림 3. (100) 방향 박막(좌)과 (001) 방향 박막(우)의 형광세기 변조그래프와 변조 깊이(M) 히스토그램.

연구실 구성원



Director Prof. Dongho Kim  
dongho@yonsei.ac.kr



Secretary Min-Kyung Jeong  
wcu-nanobio@yonsei.ac.kr



Ph.D. Sangsu Lee  
sokura123@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Yung Ji Choi  
yungdi@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Juwon Oh  
oreooz613@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Sujin Ham  
realfn@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Sang Hyeon Lee  
lsh6677@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Woojae Kim  
kaotic@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Wonhee Cha  
wonhee900416@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Taeyeon Kim  
ty1211@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Yongseok Hong  
yshong@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Juno Kim  
kevinkjo@yonsei.ac.kr



M.S. Course Yun Hee Koo  
yhkoo@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Gakhyun Kim  
gk310@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Jinseok Kim  
kytescy1006@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Taehee Kim  
taeheetaehee@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Sungsu Kang  
rkdtdtn12@yonsei.ac.kr



Ph.D. Course Jumi Park  
jm0930@yonsei.ac.kr



M.S. Course Yoonji Choi  
yoonjic58@yonsei.ac.kr



M.S. Course Sangeun Yun  
yunse0502@yonsei.ac.kr



Visiting student HaeYeon Chung  
sayu0412@snu.ac.kr

## 연구원 동정

석·박사 통합과정이었던 **박규형** 연구원은 2018년 2월 졸업하여 박사학위를 받은 후 2018년 3월부터 Princeton University 에서 박사 후 연구원으로 활동을 시작하였다. 석·박사 통합과정이었던 **이상수** 연구원은 2018년 2월 졸업 하여 박사학위를 받은 후 3월부터 본 연구단에서 박사 후 연구원으로 활동을 시작하였다. 석사과정이었던 **정석일** 연구원은 2018년 2월 졸업하여 석사학위를 취득하였다. 박사 후 연구원이었던 **차원영** 박사는 2018년 9월부터 Kyoto University 에서 커리어를 시작하였다.



2018년 3월 두 명의 석·박사 통합과정 연구원과 두 명의 석사과정 연구원이 우리 연구실에 합류하였다. **강성수** 그리고 **박주미** 연구원은 학부 대학원 연계 과정을 통해 석·박사 통합과정으로 우리 연구실에 합류하였다. 강성수 연구원은 perylene bisimide 분자집합체에서 일어나는 엑시톤 동역학을 펄스초 광대역 순환 흡수 분광법 비등방성 측정법을 통해 집합체의 쌓임 정도에 따른 비편광화 과정을 분석하는데 몰두하고 있다. 박주미 연구원은 양자점의 겹질 두께 별 분광/전기 화학적 특성에 대한 연구를 주도적으로 진행하고 있다. **윤상은** 그리고 **최윤지** 연구원은 석사과정 연구원으로 우리 연구실에 합류하였다. 윤상은 연구원은 페로브스카이트 박막의 성장 방향 조절과 그 편광 반응성에 대한 연구를 진행하고 있다. 최윤지 연구원은 페로브스카이트 박막에서 빠른 시간 안에 일어나는 전하 수송체의 동역학을 시분해 분광법을 이용해 관찰하는 연구를 수행하고 있다.

석·박사 통합과정인 **홍용석** 연구원은 2018년 6월 30일부터 7월 7일까지 영국 Cambridge University Cavendish laboratory의 **Akshay Rao** 박사 연구실을 방문하여 시공간분해 순환 흡수 현미경 기술 및 데이터 분석 방법에 대한 노하우를 습득하였다.

올해는 총 2명의 연구원들이 우수한 연구 결과를 바탕으로 학회 포스터상 및 우수 논문상을 수상하였다. 본 연구실의 박사 후 연구원인 **차원영** 박사는 연세대학교에서 주최하는 연세대학교 우수논문상을 수상하였으며 동시에 한국 과학 기술 한림원 (KAST) 와 한국 대학 총장 협회에서 수여하는 S-oil 우수학위 논문 우수상을 수상하였다. 석·박사 통합과정 연구원인 **함수진** 연구원은 삼성에서 주관한 2017 삼성 QD 포럼 학술 발표회에서 Poster silver prize 를 수상하였다.

## 연구실 활동

올해 본 연구실은 동계 워크숍과 하계 워크숍을 각각 2018년 2월 그리고 9월에 실시하여 연구원들의 연구 진행 상황에 대해 보고하고, 앞으로의 연구 방향에 대한 심도 깊은 토론과 의견 교류의 장을 열었다. 동계 워크숍과 하계 워크숍 세미나를 통해 2017년 하반기 및 2018년 상반기에 진행하였던 연구 내용 및 향후 계획에 대하여 발표 및 토론을 하였다. 2017년 12월에는 특별 워크숍을 개최하여 다양한 분야에서 활동중인 선배님들의 발표를 듣고 **김동호** 교수님을 비롯하여 많은 선배배들이 함께 담소를 나누는 뜻 깊은 시간을 가졌다.



5월 26일에는 스승의 날을 맞이하여 **김동호** 교수님을 비롯하여 본 연구실을 거쳐가신 많은 선배님들이 모여서 제 13회 기능성 파이프 시스템 분광학 연구실 홈커밍데이를 빛내주셨다. 선배님들 그리고 지도 교수님과 함께 많은 추억과 덕담을 나누었고, 사제지간의 깊은 정을 확인 할 수 있는 소중한 시간을 보냈다.

우리 연구실은 2013년부터 일본 Kyoto University 의 **Atsuhiko Osuka** 교수 연구실과 글로벌연구실사업 (Global Research Laboratory)을 공동으로 수행하고 있으며, 파이-파이 쌓임체에서의 엑시톤 확산 및 전하 분리 메커니즘, 페로브스카이트 양자점 나노소자에서의 엑시톤 및 전하 수송체 전달 동역학과 표면 방출과의 상관관계 등에 대한 연구를 진행하고 있다. 또한 한국 연구 재단에서 출연하는 전략과제 사업과 미 공군(AFOSR) 에서 지원하는 AOARD 사업에 참여하고 있으며 전자 주개 받게 형태의 유기 분자 및 나노구조체에서의 자기장 효과 (Magnetic field effect) 연구를 진행하기 위해 전자석 장비를 접목한 시공간 분해 분광법을 개발하는 데에 매진하고 있다. 성균관 대학교의 **박남규** 교수 연구팀과 공동연구로 참여하고 있는 멀티스케일 연구 과제에서는 페로브스카이트 무기 나노소자에 대한 합성 및 분광학적 연구를 확장 진행하고 있으며, 두 차례의 연구성과 발표 워크숍과 자체 평가를 우수한 실적으로 성공적으로 진행하였다. 더불어 삼성 전략 산학과제의 일환으로 진행하였던 QLED 산업의 3·5축으로 구성된 무독성의 양자점에 대한 연구가 더욱 확장되면서 2018년 5월부터 삼성전자(주)에서 지원하는 산학협력과제를 새로이 시작하게 되었다. 본 과제에서는 시공간 분해 분광법을 이용한 친환경 양자점 나노구조체에서의 동역학 연구를 활발히 진행하고 있다.

한림원 FILA기초과학상 수상, 국가연구개발 우수성과 '최우수' 선정  
2017년 연세 리서치 프론티어 표지 보도



김동호 교수, 한림원 FILA기초과학상 수상  
국가연구개발 우수성과 '최우수' 선정

도전적이고 창의적 연구 수행  
외비우스 방향성 등 과학계 오랜 난제 해결



김동호 교수가 한국과학기술한림원이 선정하는 제4회 FILA기초과학상을 받게 됐다. 화학분야에서는 처음으로 수상하게 된 김동호 교수는 기초학문분야인 분자의 방향성 및 반방향성 연구에 새로운 돌파구를 제공하는 도전적이고 창의적인 연구를 진행하여 과학계에서 오랫동안 난제로 남아있던 외비우스 방향성과 들뜬상태 방향성 뒤집힘 현상을 규명하고 이를 응용하여 분자의 물성을 제어하는데 성공한 점을 인정받아 수상자로 선정되었다.

과학기술정보통신부 과학기술훈장 도약장 수훈



22일 정부과천청사에서 과학기술정보통신부가 진행한 국가연구개발 성과평가 유공자에 대한 포상 수여식에서 연세대 김동호 교수가 과학기술훈장도약장에 선정됐다. 김동호 교수는 레이저 분광법으로 나노 구조체에서 보이는 엑시톤의 거동분석 연구수행으로 나노소자 개발에 활용될 국내 순수·기초과학 분야의 성과를 인정 받아 이번 수훈자에 선정 되었다.

2018 Academic Excellence Prize 수상 및 대한화학회 기념 강연

김동호 교수가 대한화학회가 선정하는 학술상(2018 Academic Excellence Prize)을 수상하고 기념 강연을 가졌다. 김동호 교수는 기초학문분야인 분자의 방향성 및 반방향성 연구에 확장 포피린 분자를 이용해 새로운 돌파구를 제공하는 도전적이고 창의적인 연구를 진행함으로써 과학계에서 오랫동안 난제로 남아있던 외비우스 방향성과 들뜬상태 방향성 뒤집힘 현상을 규명한 공로를 인정 받아 이번 수상자로 선정되었다.



## 'EMANUEL-VOGEL LECTURE' 특별 강연

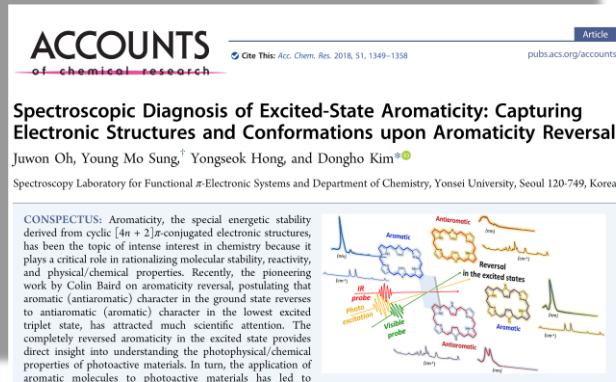
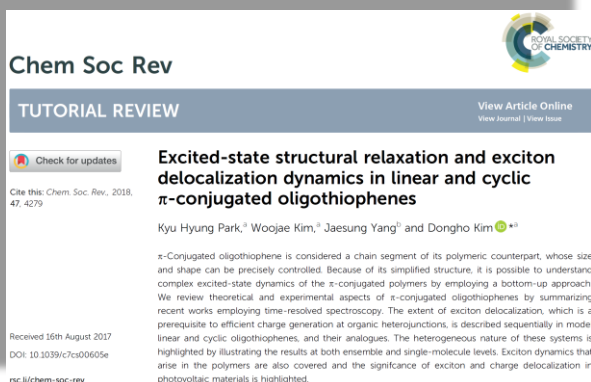


Title: Hückel, Möbius, Baird and 3-Dimensional Aromaticity in Various Expanded Porphyrins

Date: November 28, 2017

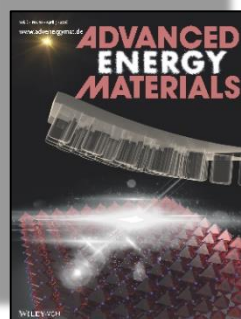
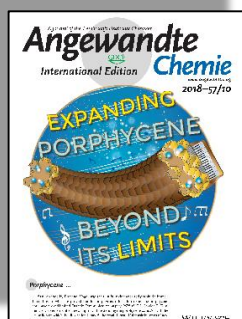
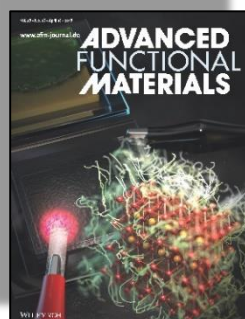
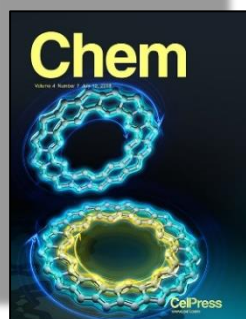
세계적인 화학자 Emanuel Vogel의 업적을 기념하며 매년 독일 University of Cologne에서 열리는 특별 강연에 아시아인 최초로 김동호 교수가 초청되었다. 이 특별 강연은 지금까지 단 4명의 과학자만이 초청되었으며 그 중 한명이 노벨상 수상자인 Jean-Marie Lehn 교수일 정도로 매우 권위있는 강연이다. 김동호 교수는 레이저 분광학을 이용하여 다양한 포피린 분자체에서의 방향성 규명에 관한 그 동안의 업적을 인정 받아 이번 특별 강연에 초청되었다.

## 'Chemical Society Reviews', 'Accounts of Chemical Research'에 리뷰 논문 게재



본 연구실의 선형, 고리형 파이 공액 올리고 싸이오펜의 들뜬 상태에서의 구조변화와 유기 분자체의 들뜬 상태에서의 방향성 뒤집힘 규명에 대한 그 동안의 연구 결과들이 학계의 인정을 받아 세계적인 총설 학술지 "Chemical Society Reviews" (IF 40.182) 와 "Accounts of Chemical Research" (IF 20.955)에 각각 게재 되었다. 특히 들뜬 상태 방향성 뒤집힘 규명 연구는 그 중요성을 인정받아 "Accounts of Chemical Research"의 표지논문으로 선정되었다.

## 세계 정상 화학지에 총 다섯 편의 표지논문 선정



차원영 연구원

2018년 2월, S-Oil 우수학위 논문상 - 우수상  
한국 과학 기술 한림원, 한국 대학 총장 협회



2017년 11월, 연세대학교 우수논문상- 우수상  
연세대학교



2018년 4월, 한국다우케미칼 우수 논문상 - 최우수상  
한국 다우케미칼, 대한화학회



함수진 연구원

2017년 10월, Samsung QD Forum 2017  
Samsung Advanced Institute of Technology



라만분광 국제학술대회 ICORS 2018 (August 26-31), ICC JEJU에서 개최



본 연구실에서는 라만 분광학 분야의 저명한 학자들이 대거 참석하는 제26차 국제 라만 분광학 국제학술대회 (ICORS 2018; the 26th International Conference on Raman Spectroscopy) 를 지난 8월 26일~ 8월 31 일 제주국제컨벤션 센터로 유치하였다. 33개국 613명의 인원들이 참석한 이번 학회는 Prof. George C. Schatz, Dr. Tahei Tahara 등 저명한 학자들이 기조 연설을 하는 등 성황리에 마무리 되었다.

## 국내 외 연구논문 발표 (2017.10 ~ 2018. 09)

### 1. "Flattened Calixarene-like Cyclic BODIPY Array: A New Photosynthetic Antenna Model"

Xian-Sheng Ke, Taeyeon Kim, Vincent M. Lynch, Dongho Kim and Jonathan L. Sessler

*J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 13950-13956

### 2. "Hetero Cu(III)–Pd(II) Complex of a Dibenzo[g,p]chrysene-Fused Bis-dicarbocorrole with Stable Organic Radical Character"

Xian-Sheng Ke, Yongseok Hong, Peiyu Tu, Qing He, Vincent M. Lynch, Dongho Kim and Jonathan L. Sessler

*J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 15232-15238

### 3. "meso-to-meso 2,5-Pyrrolylene bridged zig-zag porphyrin arrays"

Senmiao Zhang, Jun Oh Kim, Yajie Li, Bin Wen, Mingbo Zhou, Shubin Liu, Naoki Aratani, Ling Xu, Dongho Kim and Jianxin Song

*Chem. Commun.* **2017**, *53*, 11488-11491

### 4. "Unraveling Excited-Singlet-State Aromaticity via Vibrational Analysis"

Juwon Oh, Young Mo Sung, Hirotaka Mori, Seongchul Park, Kjell Jorner, Henrik Ottosson, Manho Lim, Atsuhiko Osuka and Dongho Kim

*Chem* **2017**, *3*, 870-880

### 5. "Closed Pentaaza[9]helicene and Hexathia[9]/[5]helicene: Oxidative Fusion Reactions of ortho-Phenylene Bridged Cyclic Hexapyrroles and Hexathiophenes"

Fengkun Chen, Takayuki Tanaka, Yong Seok Hong, Tadashi Mori, Dongho Kim and Atsuhiko Osuka

*Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 14688-14693

### 6. "Solution-based single-molecule study of surface-bound PBIs: solvent-mediated environmental effects on molecular flexibility"

Ji-Eun Lee, Ye Ri Han, Sujin Ham, Chul-Ho Jun and Dongho Kim

*Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, *19*, 29255-29262

### 7. "Bicyclic Baird-type Aromaticity"

Won-Young Cha, Taeyeon Kim, Arindam Ghosh, Zhan Zhang, Xian-Sheng Ke, Rashid Ali, Vincent M. Lynch, Jieun Jung, Woojae Kim, Sangsu Lee, Shunichi Fukuzumi, Jung Su Park, Jonathan L. Sessler, Tavarekere K. Chandrashekar and Dongho Kim

*Nat. Chem.* **2017**, *9*, 1243-1248

### 8. "Sequential energy transfer followed by electron transfer in a BODIPY-bisstyrylBODIPY bound to C60 triad by a 'two-point' binding strategy"

Shuai Shao, Michael B Thomas, Kyu Hyung Park, Zoe Mahaffey, Dongho Kim and Francis Dsouza

*Chem. Commun.* **2018**, *54*, 54-57

### 9. "BODIPY-based Antiaromatic Macrocycles: Facile Synthesis by Knoevenagel Condensation and Unusual Aggregation-Enhanced Two-Photon Absorption Properties"

Ming Hui Chua, Taeyeon Kim, Zheng Long Lim, Tullimilli Y. Gopalakrishna, Yong Ni, Jian Wei Xu, Dongho Kim and Jishan Wu

*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 2232-2241

### 10. "Benzonorcorrole Ni(II) Complexes: Enhancement of Paratropic Ring Current and Singlet Diradical Character by Benzo-Fusion"

Takuya Yoshida, Kohtaro Takahashi, Yuki Ide, Ryohei Kishi, Jun-ya Fujiyoshi, Sangsu Lee, Yuya Hiraoka, Dongho Kim, Masayoshi Nakano, Takahisa Ikeue, Hiroko Yamada and Hiroshi Shinokubo

*Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 2209-2213

### 11. "An expanded porphycene with high NIR absorptivity that stabilizes two different kinds of metal complexes"

Gonzalo Anguera Pujadas, Won-Young Cha, Matthew Darren Moore, James Thomas Brewster II, Michael Ying Zhao, Vincent M Lynch, Dongho Kim and Jonathan L. Sessler

*Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 2575-2579

### 12. "A Saturn-like complex composed of macrocyclic oligothiophene and [60]fullerene: structure, stability, and photophysical properties in solution and the solid state"

Hideyuki Shimizu, Kyu Hyung Park, Hiroyuki Otani, Shinobu Aoyagi, Tohru Nishinaga, Yoshio Aso, Dongho Kim and Masahiko Iyoda

*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 3793-3801

### 13. "Hexadecaphyrin (1.0.0.0.1.1.0.1.1.0.0.0.1.1.0.1): A Dual Site Ligand that Supports Thermal Conformational Changes"

Gonzalo Anguera Pujadas, Won-Young Cha, Matthew D. Moore, Juhoon Lee, Shenyi Guo, Vincent M Lynch, Dongho Kim and Jonathan L. Sessler

*J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 4028-4034

### 14. "Oriented Grains with Preferred Low-Angle Grain Boundaries in Halide Perovskite Films by Pressure-Induced Crystallization"

Wanjung Kim, Myung Sun Jung, Seonhee Lee, Yung Ji Choi, Jung Kyu Kim, Sung Uk Chai, Wook Kim, Dae-Geun Choi, Hyungju Ahn, Jeong Ho Cho, Dukhyun Choi, Hyunjung Shin, Dongho Kim and Jong Hyeok Park

*Adv. Energy Mater.* **2018**, *8*, 1702369

### 15. "Ping-Pong Energy Transfer in a Boron Dipyrromethane Containing Pt(II)–Schiff Base Complex: Synthesis, Photophysical Studies, and Anti-Stokes Shift Increase in Triplet–Triplet Annihilation Upconversion"

Syed S. Razi, Yun Hee Koo, Woojae Kim, Wenbo Yang, Zhijia Wang, Habtom Gobeze, Francis D'Souza, Jianzhang Zhao, and Dongho Kim

*Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 4877-4890

**16. "Composition-dependent emission linewidth broadening in lead bromide perovskite (APbBr<sub>3</sub>, A = Cs and CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>) nanoparticles"**

Sujin Ham, Heejae Chung, Tae-Woo Kim, Jiwon Kim and Dongho Kim  
*Nanoscale*, **2018**, *10*, 2207-2212

**17. "Photo-induced Intermolecular Electron Transfer Mediated by the Colloidal Tyrosyl Bolaamphiphile Assembly"**

Junghyun Cho, Jinyoung Kwak, Juwon Oh, Dongho Kim and Sang-Yup Lee  
*ChemPhysChem* **2018**, *19*, 643-650

**18. "Switch-ON Near IR Fluorescent Dye Upon Protonation: Helically Twisted Bis(Boron Difluoride) Complex of  $\pi$ -Extended Corrorin"**

Yutaka Hisamune, Taeyeon Kim, Keiichi Nishimura, Masatoshi Ishida, Motoki Toganoh, Shigeki Mori, Dongho Kim and Hiroyuki Furuta  
*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 4628-4634

**19. "Ultrafast Exciton Delocalization, Localization and Excimer Formation Dynamics in a Highly Defined Perylene Bisimide Quadruple  $\pi$ -Stack"**

Christina Kaufmann, Woojae Kim, Agnieszka Nowak-Król, Yongseok Hong, Dongho Kim and Frank Würthner  
*J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 4253-4258

**20. "Stable Nitrogen-centered Bis(imino)rylene Diradicaloids"**

Wangdong Zeng, Yongseok Hong, Samara Medina Rivero, Jinseok Kim, José L. Zafra, Hoa Phan, Tullimilli Y. Gopalakrishna, Tun Seng Herng, Jun Ding, Juan Casado, Dongho Kim and Jishan Wu  
*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 4944-4951

**21. "Stable 2D anti-ferromagnetically coupled fluorenyl radical dendrons"**

Jian Wang, Gakhyun Kim, María Eugenia Sandoval-Salinas, Hoa Phan, Yadagiri Gopalakrishna Tullimi, Xuefeng Lu, David Casanova, Dongho Kim and Jishan Wu  
*Chem. Sci.* **2018**, *9*, 3395-3400

**22. "All-Inorganic CsPbI<sub>3</sub> Perovskite Phase-Stabilized by Poly(ethylene oxide) for Red-Light-Emitting Diodes"**

Beomjin Jeong, Hyowon Han, Yung Ji Choi, Sung Hwan Cho, Eui Hyuk Kim, Seung Won Lee, Jong Sung Kim, Chanhoo Park, Dongho Kim and Cheolmin Park  
*Adv. Funct. Mater.* **2018**, *28*, 1706401

**23. "Electron-Deficient Bipyrrrole Boomerangs. Bright Fluorophores Obtained via Double C-H Bond Activation"**

Marika Żyła-Karwowska, Liliia Moshniha, Yongseok Hong, Halina Zhylitskaya, Joanna Cybińska, Piotr Jan Chmielewski, Tadeusz Lis, Dongho Kim and Marcin Stępień  
*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 7525-7530

**24. "Electron photoejection from dianion of an expanded phthalocyanine"**

Yun Hee Koo, Ryo Yanagisawa, Won-Young Cha, Taniyuki Furuyama, Nagao Kobayashi and Dongho Kim  
*J. Porphyr. Phthalocya.* **2018**, *22*, 437-442

**25. "Synthesis of bis-Silicon Complexes of [38]-, [37]-, and [36] Octaphyrins: Aromaticity Switch and Stable Radical Cation"**

Shin-ichiro Ishida, Jinseok Kim, Daiki Shimizu, Dongho Kim and Atsuhiko Osuka  
*Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 5876-5880

**26. "Investigation and Control of Single Molecular Structures of meso-meso Linked Long Porphyrin Arrays"**

Sang Hyeon Lee, Sujin Ham, Seungsoo Nam, Naoki Aratani, Atsuhiko Osuka, Eunji Sim and Dongho Kim  
*J. Phys. Chem. B* **2018**, *122*, 5121-5125

**27. "Azabuckybowl-Based Molecular Tweezers as C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> Receptors"**

Motoki Takeda, Satoru Hiroto, Hiroki Yokoi, Sangsu Lee, Dongho Kim and Hiroshi Shinokubo  
*J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 6336-6342

**28. "The First Silicon(IV) Corrole Complexes: Synthesis, Structures, Properties, and Formation of a  $\mu$ -Oxo Dimer"**

Kento Ueta, Masaya Fukuda, Gakhyun Kim, Soji Shimizu, Takayuki Tanaka, Dongho Kim and Atsuhiko Osuka  
*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 7637-7646

**29. "Diarylamine-fused Subporphyrins: Proof of Twisted Intramolecular Charge Transfer (TICT) Mechanism"**

Koki Kise, Yongseok Hong, Norihito Fukui, Daiki Shimizu, Dongho Kim and Atsuhiko Osuka  
*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 8306-8310

**30. "Spectroscopic diagnosis of excited-state aromaticity: Capturing electronic structures and conformations upon aromaticity reversal"**

Juwon Oh, Young Mo Sung, Yongseok Hong and Dongho Kim  
*Acc. Chem. Res.* **2018**, *51*, 1349-1358

**31. "Metal-Stabilized Quinoidal Dibenzo[g, p]chrysene-Fused Bis-dicarbacorrole System"**

Xian-Sheng Ke, Yongseok Hong, Vincent M Lynch, Dongho Kim and Jonathan L. Sessler  
*J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 7579-7586

**32. "Macrocyclic Polyradicaloids with Unusual Super-ring Structure and Global Aromaticity"**

Chunchen Liu, María Eugenia Sandoval-Salinas, Yongseok Hong, Tullimilli Y. Gopalakrishna, Hoa Phan, Naoki Aratani, Tun Seng Herng, Jun Ding, Hiroko Yamada, Dongho Kim, David Casanova and Jishan Wu  
*Chem* **2018**, *4*, 1586-1595

**33. "The Role of Disorder in the Extent of Interchain Delocalization and Polaron Generation in Polythiophene Crystalline Domains"**

Kyu Hyung Park, Sung Y. Son, Jun Oh Kim, Gyeongho Kang, Taiho Park and Dongho Kim  
*J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, *9*, 3173-3180

**34. "Excited-state structural relaxation and exciton delocalization dynamics in linear and cyclic  $\pi$ -conjugated oligothiophenes"**

Kyu Hyung Park, Woojae Kim, Jaesung Yang and Dongho Kim  
*Chem. Soc. Rev.* **2018**, *47*, 4279-4294

**35. "Near-Infrared S2 Fluorescence from Deprotonated Möbius Aromatic [32]Heptaphyrin"**

Jun Oh Kim, Yongseok Hong, Taeyeon Kim, Won-Young Cha, Tomoki Yoneda, Takanori Soya, Atsuhiko Osuka and Dongho Kim  
*J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, *9*, 4527-4531

**36. "Halide Perovskite Nanopillar Photodetector"**

Do Hyung Chun, Young Jin Choi, Yongjae In, Jae Keun Nam, Yung Ji Choi, Sangeun Yun, Wook Kim, Dukhyun Choi, Dongho Kim, Hyunjung Shin, Jeong Ho Cho and Jong Hyeok Park  
*ACS Nano* **2018**, *12*, 8564-8571

**37. "Solvent and Structural Fluctuations Induced Symmetry-Breaking Charge Transfer in a Porphyrin Triad"**

Taeyeon Kim, Woojae Kim, Hirotaka Mori, Atsuhiko Osuka and Dongho Kim  
*J. Phys. Chem. C* **2018**, *122*, 19409-19415

**38. "Stable Expanded Porphycene-Based Diradicaloid and Tetraradicaloid"**

Anup Rana, Yongseok Hong, Tullimilli Y. Gopalakrishna, Hoa Phan, Tun Seng Herng, Priya Yadav, Jun Ding, Dongho Kim and Jishan Wu  
*Angew.Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 12534-12537

**39. "Enhancement of exciton transport in porphyrin aggregate nanostructures by controlling the hierarchical self-assembly"**

Taehee Kim, Sujin Ham, Sang Hyeon Lee, Yongseok Hong and Dongho Kim  
*Nanoscale* **2018**, *10*, 16438-16446

**40. "Proton-Coupled Redox Switching in an Annulated  $\pi$ -Extended Core-Modified Octaphyrin"**

Tridib Sarma, Gakhyun Kim, Sajal Sen, Won-Young Cha, Zhiming Duan, Matthew D. Moore, Vincent M. Lynch, Zhan Zhang, Dongho Kim and Jonathan L. Sessler  
*J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 12111-12119

국내 외 학술회의 발표  
 (2017.10 ~ 2018. 09)

**국제 학술회의 강연**

**[특별강연]**

**Dongho Kim** "Hückel, Möbius, Baird and 3-Dimensional Aromaticity in Various Expanded Porphyrins" **Emanuel Vogel Lecture**, November 28, **2017**, Cologne University, Cologne, Germany

**[기조강연]**

**Dongho Kim** "Control and Switching of Aromaticity in Various Expanded Porphyrins: Spectroscopic and Theroetical Analyses" **International Conference on Spectroscopy of Bio-molecules and Advanced Materials (ICSBAM2017)**, October 05, **2017**, Christian College Chengannur, Kerala, India

**Dongho Kim** "Hückel, Möbius, Baird and 3-Dimensional Aromaticity in Expanded Porphyrins" **Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (KJFP2017)**, October 28, **2017**, Inha University, Incheon, Korea

**Dongho Kim** "Spectroscopic diagnosis of excited-state aromaticity: Capturing electronic structures and conformations upon aromaticity reversal" **2018 Asian Workshop on Frontiers of Porphyrins and Phthiocyanines**, August 24-26, **2018**, Zhenjiang, China

**[초청강연]**

**Dongho Kim** "Characterization of Exciton Dynamics in Various Functional  $\pi$ -Systems" **Indian Institute of Science Education and Research Thiruvananthapuram (IISER-Thiruvananthapuram) Mini-Symposium on Spectroscopy**, October 07, **2017**, IISER-Thiruvananthapuram Seminar Hall, India

**Dongho Kim** "Characterization of Exciton Dynamics in Various Functional  $\pi$ -Systems" **National University of Singapore (NUS) Department of Chemistry Research Seminar**, October 09, **2017**, National University of Singapore (NUS), Singapore

**Dongho Kim** "Characterization of Exciton Dynamics in Functional  $\pi$ -Electronic Systems" **The 19th Chinese Conference on Light Scattering**, December 03-05, **2017**, Kaifeng hotel, Sun Yat-sen University, Guangzhou, China

**Dongho Kim** "Ultrafast Coherent Exciton Dynamics in a Series of Cofacially Stacked Perylene Bisimides" **10th Asian Conference on Ultrafast Phenomena (ACUP 2018)**, January 07-10, **2018**, The University of Hong Kong, Hong Kong

**Dongho Kim** "Characterization of Exciton Dynamics in Functional  $\pi$ -electronic systems" **Frontiers in Photochemistry Conference**, February 18-21, **2018**, Cancun, Mexico

**Dongho Kim** "Ultrafast Coherent Exciton Dynamics in a Series of Cofacial Perylene Bisimide Stacks" **Asia-Pacific Laser Symposium (APLS 2018)**, May 30, 2018, Sheraton Xi'an North City Hotel, Xi'an, China

**Dongho Kim** "Spectroscopic diagnosis of excited-state aromaticity: Capturing electronic structures and conformations upon aromaticity reversal" **The 9th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy (CMDS 2018)**, June 25-29, 2018, Korea University, Korea

**Dongho Kim** "Unravelling of Baird's Rule via Vibrational Analysis: Reversal of Aromaticity in the Excited-Singlet States" **International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-10)**, July 01-06, 2018, Munich, Germany

**Dongho Kim** "Spectroscopic diagnosis of excited-state aromaticity: Capturing electronic structures and conformations upon aromaticity reversal" **27th IUPAC International Symposium on Photochemistry**, July 08-13, 2018, University College Dublin, Dublin, Ireland

**Dongho Kim** "Ultrafast Coherent Exciton Dynamics in a Series of Cofacial Perylene Bisimide Stacks" **Ultrafast Phenomena 2018**, July 15-20, 2018, Hamburg, Germany

**Dongho Kim** "Spectroscopic Diagnosis of Excited-state Aromaticity: Capturing Electronic Structures and Conformations upon Aromaticity Reversal" **Seminar on Porphyrinoid Chemistry: Recent Progress and Future**, July 21, 2018, Ehime University, Japan

#### [국내학회]

**Dongho Kim** "Suppressed Rashba couplings by recovery of inversion symmetry in mesoscale APbBr<sub>3</sub> perovskite" **Perovskite Photonics Conference 2017**, November 20, 2017, 제주도 제주시 라마다프라자호텔

**Dongho Kim** "Characterization of Exciton Dynamics in Various Functional Molecular Systems" **강원대학교 화학과 세미나**, March 08, 2018, 강원대학교

**Dongho Kim** "Characterization of Exciton Dynamics in Various Functional Molecular Systems" **한양대학교 화학과 세미나**, March 15, 2018, 한양대학교

**Dongho Kim** "A Journey to Molecular Excitonic World" **대한화학회 제121회(춘계) 총회 및 학술발표회**, April 20, 2018, 제주 ICC

**Dongho Kim** "A Journey to Molecular Excitonic World" **연세대학교 원주캠퍼스 화학과 세미나**, May 03, 2018, 연세대학교 원주캠퍼스

#### 국외 학술회의 발표

##### [구두 발표]

**Juno Kim** "The role of torsional disorders in exciton self-trapping and delocalization dynamics of [n]cycloparaphenylenes" **27th IUPAC International Symposium on Photochemistry**, July 08-13, 2018, University College Dublin, Dublin, Ireland

**Juwon Oh** "Diagnosis of excited state aromaticity via vibrational analysis" **The 26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS2018)**, August 26-31, 2018, Jeju, Korea

##### [포스터]

**Yung Ji Choi** "Suppression of Rashba couplings by recovery of inversion symmetry in mesoscale APbBr<sub>3</sub> perovskite" **2017 MRS Fall Meeting and Exhibit**, November 26-December 01, 2017, Boston, Massachusetts, USA

**Wonhee Cha** "Stable and Size-Controllable Organometallic Trihalide Perovskite Nanocrystals/Polymer Film" **2017 MRS Fall Meeting and Exhibit**, November 26-December 01, 2017, Boston, Massachusetts, USA

**Juwon Oh** "Magnetic field effect on organic molecular systems" **10th HOPE Meeting**, March 11-15, 2018, Yokohama, Japan

**Gakhyun Kim** "Exciton self-trapping and delocalization dynamics of [n]Cycloparaphenylenes" **Advanced Lasers and Their Applications (ALTA 2018)**, May 11, 2018, KAL hotel, Jeju, Korea

**Seong Soo Kang** "The observation of Symmetry-Breaking Charge Transfer processes in Directly Linked Push-Pull Porphyrin Arrays" **Advanced Lasers and Their Applications (ALTA 2018)**, May 11, 2018, KAL hotel, Jeju, Korea

**Jumi Park** "Investigation of Conformational Structures of meso-meso Directly-Linked Single Porphyrin Arrays" **Advanced Lasers and Their Applications (ALTA 2018)**, May 11, 2018, KAL hotel, Jeju, Korea

**Sangeun Yun** "Controlling the spatial distribution of quantum dots in one-dimensional polymer templates for dye-sensitized solar cells" **Advanced Lasers and Their Applications (ALTA 2018)**, May 11, 2018, KAL hotel, Jeju, Korea

**Yoonji Choi** "Stable and Size-Controllable Organometal Trihalide Perovskite Nanocrystals/Polymer Film" **Advanced Lasers and Their Applications (ALTA 2018)**, May 11, 2018, KAL hotel, Jeju, Korea

**Woojae Kim** "Investigations of chain-length-dependent exciton delocalization in series of linear oligothiophenes by femtosecond stimulated Raman spectroscopy" **The 9th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy (CMDS 2018)**, June 25-29, 2018, Korea University, Korea

**Taeyeon Kim** "Solvation and symmetry-breaking charge transfer in porphyrin triad using broadband fluorescence up-conversion spectroscopy" **The 9th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy (CMDS 2018)**, June 25-29, 2018, Korea University, Korea

**YongSeok Hong** "The Extension of Baird's Rule to Twisted Heteroannulene: Aromaticity Reversal of Twisted [36]Octaphyrins in The Lowest-Excited-Triplet State" **International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-10)**, July 01-06, 2018, Munich, Germany

**Jinseok Kim** "Aromatization induced by Charge Transfer in the Excited State" **27th IUPAC International Symposium on Photochemistry**, July 08-13, 2018, University College Dublin, Dublin, Ireland

**Woojae Kim** "Chain-Length-Dependent Exciton Dynamics in Linear Oligothiophenes Studied by Ultrafast Time-Resolved Raman Spectroscopy" **Ultrafast Phenomena 2018**, July 15-20, 2018, Hamburg, Germany

**Woojae Kim** "Time-resolved Raman studies of exciton delocalization in a series of linear oligothiophene" **The 26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS2018)**, August 26-31, 2018, Jeju, Korea

**Taeyeon Kim** "Symmetry-breaking charge transfer in directly-linked push-pull porphyrin arrays" **The 26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS2018)**, August 26-31, 2018, Jeju, Korea

**Jinseok Kim** "Aromatization in the excited singlet state induced by intramolecular charge transfer" **The 26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS2018)**, August 26-31, 2018, Jeju, Korea

## 국내 학술회의 발표

### [포스터]

**Sujin Ham** "Composition-Dependent Carrier-Induced Stark Effect on Perovskite (APbBr<sub>3</sub>, A=Cs and CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>) Quantum Dots" **Samsung Advanced Institute of Technology Quantum Dot Forum 2017**, October 26, 2017, 서울 (삼성 금융캠퍼스)

**Sang Hyeon Lee** "Role of Chloride as a Dopant in the Blinking Dynamics of Single Cesium Lead Iodide Perovskite Quantum Dots" **Samsung Advanced Institute of**

**Technology Quantum Dot Forum 2017**, October 26, 2017, 서울 (삼성금융캠퍼스)

**Gakhyun Kim** "Exciton self-trapping and delocalization dynamics in [n]Cycloparaphenylenes" **제 127차 대한화학회 물리화학분과회 심포지엄**, July 09-11, 2018, 속초 마레몬스 호텔

**Seong Soo Kang** "Dynamics of Directly Linked Push-Pull Porphyrin Arrays; Symmetry-Breaking Charge Transfer" **제 127차 대한화학회 물리화학분과회 심포지엄**, July 09-11, 2018, 속초 마레몬스 호텔

**Jumi Park** "Control and Investigation of Conformational Structures of meso-meso Directly-Linked Single Porphyrin Arrays" **제 127차 대한화학회 물리화학분과회 심포지엄**, July 09-11, 2018, 속초 마레몬스 호텔

## 국제 학술회의 개최 및 연사 초청 (2017.10 ~ 2018. 09)

### 국제 학술회의 개최

**26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS 2018)**, August 26-31, 2018, ICC Jeju, Jeju, Korea

### 연사 초청

**Prof. Atsuhiko Osuka (Kyoto Univ.)** "Stable Porphyrinoid Radicals and Related Compounds" **연세대학교 화학과 세미나**, October 26, 2017, Yonsei University, Seoul, Korea.

**Prof. Myong Yong Choi (Gyeongsang National Univ.)** "Conformationally Resolved Spectroscopy of Acetanilide Derivatives : Population Transfer IR Gain Spectroscopy" **연세대학교 화학과 세미나**, March 29, 2018, Yonsei University, Seoul, Korea.

**Prof. Shunichi Fukuzumi (Osaka University, Ewha Womens University)** "Production and Utilization of Liquid Solar Fuels" **연세대학교 화학과 세미나**, April 26, 2018, Yonsei University, Seoul, Korea.

**Prof. Jaesung Yang (Yonsei Univ.)** "Organic Semiconductors: Molecular Level Understanding of Mesoscopic Conjugated Polymer Aggregates" **연세대학교 화학과 세미나**, May 31, 2018, Yonsei University, Seoul, Korea.

**Prof. Jishan Wu (National University of Singapore)** "From open-shell singlet diradicaloid to polyradicaloid" **연세대학교 화학과 세미나**, June 1, 2018, Yonsei University, Seoul, Korea.

**Prof. Frank Würthner (Universität Würzburg)** "Supramolecular Photosystems with Precise Spatial organization of Dyes" **연세대학교 화학과 세미나**, July 10, 2018, Yonsei University, Seoul, Korea.



Spectroscopy Laboratory for  
Functional  $\pi$ -Electronic  
Systems

## 기능성 파이전자 시스템 분광학 연구실

**Spectroscopy Laboratory for Functional  $\pi$ -Electronic  
Systems**

서울특별시 서대문구 연세로 50 연세대학교 과학관 지하 115호 / 첨단관 607호

TEL: (02)2123-2436, 7620

FAX: (02)2123-2434

Homepage: <http://www.FPIESlab.com>



**YONSEI**  
UNIVERSITY