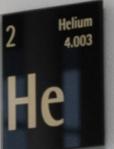


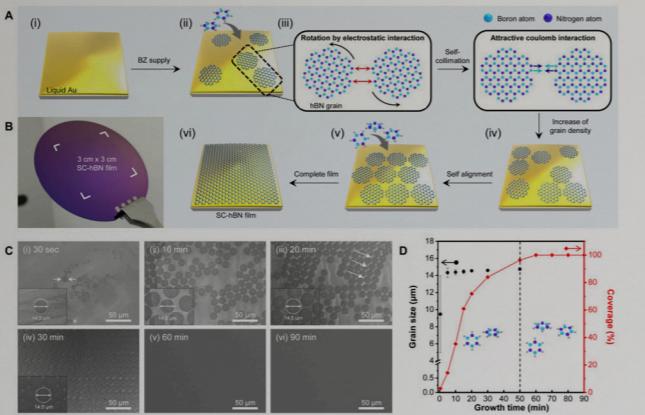
01  
OUTTHINKERS

## 원자 두께로 여는 차세대 양자 소재 혁신

*Kim, Soo-min*  
화학과 교수 김수민



액상 금 기판 위에  
합성된 2차원  
질화붕소(hBN) 결정립과  
자기 줄맞춤(self-  
collimation) 현상에  
의한 대면적 단결정 합성  
모식도 및 실험 결과  
출처: 과학기술정보통신부  
보도자료



그동안 연구팀은 2차원2D 소재 합성과 차세대 전자·광·양자 소자 연구에 집중해 왔다. 연구 초기에는 그라핀Graphene과 전이금속 칼코젠화합물TMDs을 비롯해, 다양한 2차원 소재를 합성하여 이들의 구조적·전자적 특성을 규명하는 데 주력했다. 그 과정에서 소재의 품질이 소자의 성능 한계를 결정한다는 사실을 깨닫게 되었다. 그 당시, 대부분의 2차원 소재는 대면적·단결정으로 합성하는 것이 어렵다고 여겨졌다. 특히 질소와 봉소처럼 두 가지 원소가 결합한 이종 원소 기반 2차원 소재는 단결정 성장에 적합하지 않다는 인식이 강했다.

그래서 기존의 고체 금속 기판에 기반한 성장 방식에서 벗어나 접면 방식을 바꿔보았다. 이 과정에서 연구팀은 액상 금속 기판 위에서 결정립이 스스로 정렬을 이루는 “자기 줄맞춤self-collimation” 메커니즘에 의해 새로운 합성을 성공했다. 그야말로 혁신적인 합성 패러다임을 제시한 것이다. 세계 최초로 질화붕소hBN를 대면적 단결정으로 합성에 성공한 후 국제 전문 학술지《사이언스Science》에 발표했다. 수년간의 노력에 힘입어 연구의 신뢰성과 학문적 가치를 세계적으로 인정받게 된 것이다. 액상 금속 표면에서는 질화붕소hBN 결정립들이 자유롭게 이동할 수 있고, 봉소(+)·질소(-)의 정전기적 특성에 의해 가장 안정한 방향으로 배열되어 하나의 거대한 단결정을 형성한다. 그러나 연구팀에게 가장 큰 도전은 “전체 영역이 정말 단결정인가?”를 증명하는 일이었다. 이를 위해 수많은 위치에서 TEM·전자 분광 분석을 반복하며 성장 영역 전체의 결정 구조를 검증해야 했다. 이 과정만 거의 2년이 걸렸다. 그러나 이처럼 정밀한 검증은 연구의 완성도를 높이는 데 결정적이었다.

단결정 질화붕소hBN는 2차원 소재 중 유일한 절연체라는 점에서 큰 의미가 있다. 이는 고성능 반도체 소자의 절연층, 유연 디스플레이, 센서, 배리어 필름 등 다양한 분야의 기반으

로 활용될 수 있기 때문이다. 이후 본 연구자는 이 단결정 질화붕소hBN를 기판으로 활용해 그래핀, MoS<sub>2</sub>몰리브덴화물, WS<sub>2</sub>텅스텐화합물 등 다른 2차원 소재를 결합 없이 적층하는 연구를 이어갔고, 마침내 고품질 반데르발스 이종 구조 플랫폼을 완성했다. 이러한 연구 성과는 학계의 높은 평가를 받으며 국무총리상, 국가연구개발 100선, 에쓰-오일 차세대과학자상 등의 수상으로 이어졌다.

앞으로의 연구 방향은, 기존의 2차원 소재 합성에서 더 나아가, 봉소BN 기반의 2차원 양자 소재와 양자 광학 플랫폼을 구축하는 것이다. 양자 기술은 국가 경쟁력과 직결되는 핵심 전략 기술이다. 상온에서도 작동하는 대면적 접면이 가능한 새로운 양자 소재는 양자 통신, 양자 암호, 양자 센싱 등 다양한 분야에서 필수적이다. 질화붕소hBN와 룸보데드릴 결정 구조 rhombohedral BN, rBN는 결합 및 도핑 조절을 통해 상온에서 단일 광자 방출양자컬러센터를 구현할 수 있고, 비대칭 적층 구조로 인해 강한 비선행광학 응답SHG, SPDC를 보여 양자 얹힘 광자 쌍 생성에도 적합하다.

연구팀은 향후에 액상 금속 기반의 합성 기술에 계산화학과 머신러닝 기반의 물질 설계 기법을 결합해 상phase, 두께, 도핑 농도, 뒤틀림 각도까지 정밀하게 제어된 설계형 2D 양자 소재 합성 플랫폼을 구축할 계획이다. 또한 이렇게 제작된 소재에서 양자컬러센터의 안정성, 개별 결함의 발광 특성, 비선행광학 응답의 조절 가능성 등을 분석하고, 뒤틀림 구조나 외부 전기장·양자장·기계적 변형 등을 활용해 양자 광원 특성을 능동적으로 제어하는 연구를 수행할 계획이다. 궁극적으로는 이 모든 연구를 통합하여 침 기반 양자광집적회로QPIC의 구현을 목표로 하고 있다.

그리하여 단일 광원, 양자 얹힘 광자 쌍 소자, 양자 암호 통신용 광원 등 실질적 양자 기술의 응용으로 연결되는 소자 플랫폼을 개발하고, 소재-광원-소자-측정의 피드백 루프를 구축해 양자 기술 상용화에 기여하고자 한다.

더불어 연구와 교육을 병행하는 연구자로서 이러한 연구가 여성 과학기술인의 미래 첨단 분야 진출에 긍정적 역할을 할 수 있기를 기대한다. 여성 연구자들이 자신의 가능성을 스스로 제한하지 않도록 적극적으로 지원하는 일 역시 이루고자 하는 중요한 목표이다.

연구실은 가시광선 활성 광촉매의 효율성 향상을 목표로, 산화물 및 황화물 기반의 나노입자 표면을 정밀하게 설계·제어하는 연구를 수행하고 있다. 방사광 기반의 광전자분광UPS/XPS과 흡수분광학XAS, STEM-EELS 등 첨단 분석기법을 활용하여 표면 결합 구조와 전자구조 변화를 규명하고, 이러한 변형이 광촉매 성능에 미치는 메커니즘을 규명해 오고 있다.

주요 접근법은 도핑금속·비금속, 표면 환원/산화 처리, pH 제어 등 합성 변수를 체계적으로 조절하는 것이다. 결합 밀도 및 밴드 엔지니어링을 구현해 결합·계면에서의 전자 분리 및 전달 거동을 실시간으로 연속 추적해 성능 향상 원리를 제시하는 연구를 지속하고 있다.

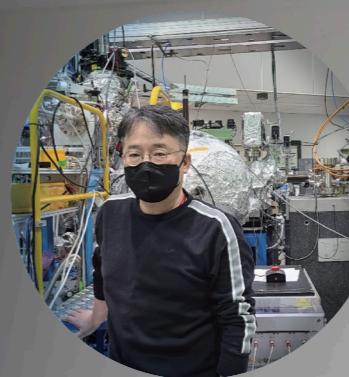
한편 저비용·고효율을 목표로, 공정의 단순화와 스케일업 가능성이 높은 합성법을 개발하는 데 주력해왔다. 이러한 연구를 통해 가시광선 하에서의 광촉매 반응성과 선택도를 유의미하게 개선했으며, 관련 분석 데이터와 메커니즘 기반 설계를 학술지에 게재하고 연구보고서로 발표했다.

현재 광촉매 나노입자를 활용한 바이오매스 광변환과 광기반의 대체 에너지 기술을 중점적으로 연구하고 있으며, 구체적인 목표는 다음과 같다.

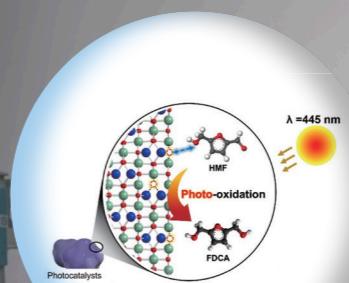
첫째, 산업화가 가능한 수준으로 광촉매 효율성을 달성한다. 반응 스케일업, 촉매의 안정성·재사용성 확보, 공정 에너지 효율의 최적화를 통한 바이오매스에서 고부가가치 화합물으로의 전환 경로 개발을 위해, 특히 HMF 등 모델 화합물의 선택적 산화·전환 반응 연구에 중점을 둘 계획이다.

둘째, 광촉매 기반의 분산형/현장 적용형 에너지·화학 플랫폼을 구축한다. 태양광 연계 반응 시스템과 모듈화된 반응기를 설계하고 데이터베이스 및 설계 가이드라인을 제공한다. 이를 위해 합성 조건·결합 특성·성능의 정량적 상관관계를 축적하여 소재 설계의 표준화 작업을 추진할 계획이다.

셋째, 이러한 연구를 통해 산업 사회에 기여하고자 한다. 화석연료에 대한 의존도를 낮추고 지속 가능한 에너지·화학의 생산 기술 개발로 미래 세대에 안정적인 에너지 공급을 할 수 있도록 한다. 이를 위해 저비용으로 확장 가능한 촉매 공정을 개발함으로써 산업계 기술이전과 지역 산업의 활성화를 촉진한다.



포항가속기 연구소 광촉매  
전자구조 실험



주요 연구 주제인 광촉매를  
이용한 광변환 반응

화석연료 의존도를 낮추고  
지속 가능한 에너지·화학  
생산 기술 개발로  
미래 세대에 안정적인 에너지를  
공급하는 것이 연구 목표

02  
OUTTHINKERS

## 바이오매스 광변환과 대체 에너지 기술 개발

*Lee, Han-gil*  
화학과 교수 이한길

