

## 2D 소재의 혁신 : 그래핀, TMD, h-BN의 특성 및 응용 탐구

임승미

전라남도 광양시 마로니에길 61 광양제철고등학교  
(57802)

대표적으로 그래핀, TMD, h-BN의 특성, 가격, 활용도의 측면에서 비교한 후, 이를 활용할 분야를 알아보려고 한다. 따라서, 주 탐구 목적은 다음과 같다.

- 탄소 원자로 이루어진 0D, 1D, 2D, 3D 구조를 AVOGRDO 프로그램을 활용하여 직접 구현해보기
- 2D 소재 중 그래핀, TMD, h-BN의 특성, 가격, 활용도의 측면에서 비교해보기
- 위 활동들을 바탕으로 2D 소재들을 활용할 분야를 알아보기

ABSTRACT. 2D 소재는 일반적인 물질에 비해 뛰어난 전기적, 기계적, 광학적, 열적, 자기적 특성을 띄기 때문에 에너지, 반도체, 의학, 우주항공 등 다양한 분야에서 주목을 받고 있다. 하지만, 이들은 원재료와 장비의 가격이 비싸고, 대량생산이 힘들며, 생산 과정에서 성능의 저하가 일어나는데, 이를 해결하지 못하면 상용화는 어렵다. 이러한 한계를 극복하기 위해 다양한 연구가 진행되고 있었다. 이번 탐구에서는 대표적인 2D 소재인 그래핀, TMD, h-BN의 특성과 활용 분야를 알아본 후, 에너지 분야에서 2D 소재가 어떤 식으로 활용되는지를 자세히 알아봤다.

### 재료 및 방법 (Materials and Methods)

#### 나노 물질과 2D 소재

“결정구조의 차원 수에 따라 3 차원(3D), 2 차원(2D), 1 차원(1D), 0 차원(0D) 물질로 구분 가능하고, 같은 원소로 이루어진 물질이라도 차원수가 달라지면 원자들 사이의 결합 특성이 달라지므로 기계적 안정성, 전하이동 등 물질의 특성이 달라진다.

2 차원(2D)소재란 원자들이 단일 원자층 두께(약 1nm=10 억분의 1m)를 가지고 평면에서 이루는 물질을 지칭한다.”<sup>1</sup>

### 서론 (Introduction)

이번 탐구 활동을 진행하는 것은 0D, 1D, 2D, 3D 소재의 개념을 정확히 이해하고, 2D 소재 중

<sup>1</sup> 함선영, <2 차원소재>, 한국과학기술기획평가원. 2018년 p4.

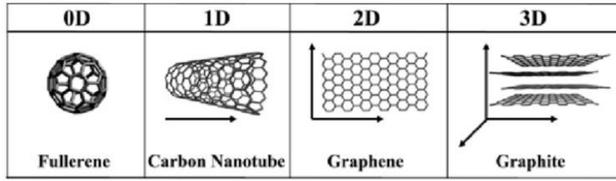


그림 1 탄소 원자로 이루어진 0D, 1D, 2D, 3D 구조 예시

AVOGARDO 프로그램을 활용하여 Fullerene, Carbon Nanotube, Graphene, Graphite 를 차례대로 구현해보았다.

- Fullerene (0D) : 풀러렌

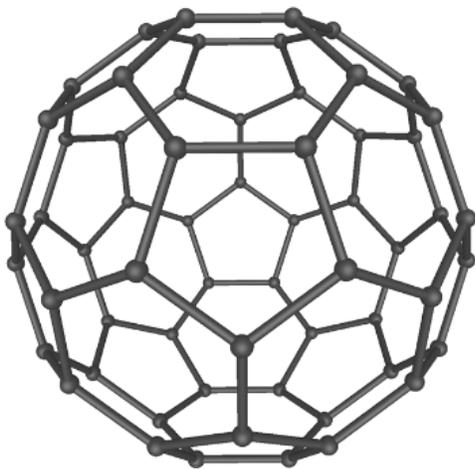


그림 2 풀러렌의 구조

- 탄소 원자가 구, 타원체, 원기둥 모양으로 배치된 분자를 통칭함.
- 주로 탄소 원자 60 개가 12 개의 5 원환과 20 개의 6 원환으로 이루어진 축구공 모양으로 생긴 버크민스터풀러렌(C<sub>60</sub>)을 말함. 5 환원에 5 개의 6 원환이 결합함.

오각형 구조를 그린 후, 각 면마다 육각형 구조를 그려준다.

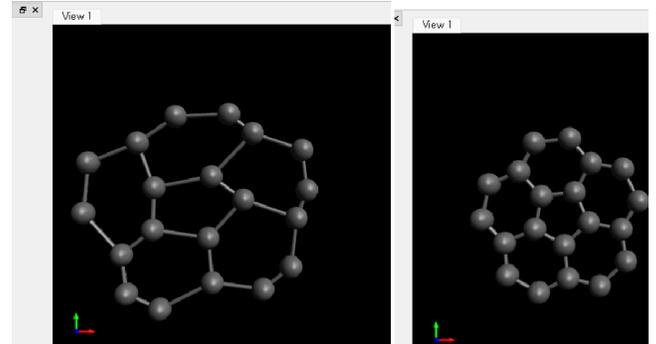


그림 3 최적화 전(좌)과 최적화 후(우)

그림 3 의 육각형 구조 사이에 오각형 구조를 결합한 후, 최적화를 한다.

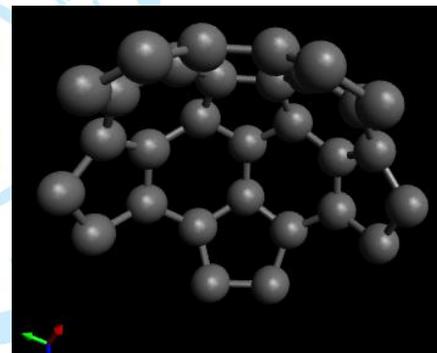


그림 4 그림 3 에 오각형 구조를 결합한 후 최적화한 모습

이렇게 오각형 구조를 육각형 구조가 둘러싸고 있는 형태로 계속해서 탄소 원자를 이어나가면 최종적으로 축구공 모양의 풀러렌을 구현할 수 있다.

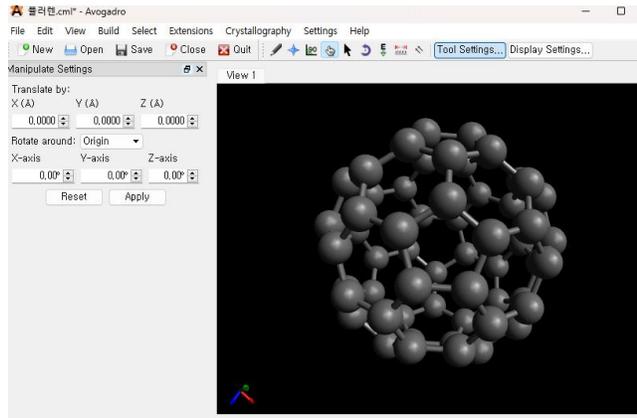


그림 5 풀러렌

- Carbon Nanotube (1D) : 탄소 나노튜브

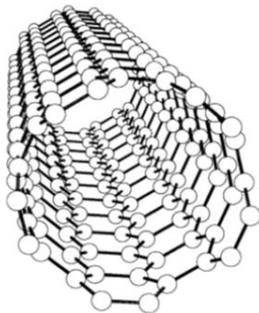


그림 6 탄소나노튜브의 구조

- 그래핀이 둥글게 말려 원통 모양이 된 것과 같음. 즉, 탄소 원자가 육각형 그물망으로 배열된 층으로 이루어진 원통형 구조임.

Build 의 Nanotube Builder 를 통해 탄소 나노튜브를 빠르고 간단하게 구현할 수 있다.

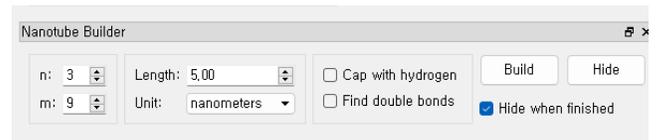


그림 7 Avogadro 프로그램의 Nanotube Builder

여기서 n 과 m 은 나노튜브의 유형을 결정하고, Length 와 Unit 은 나노튜브의 길이를 결정한다.

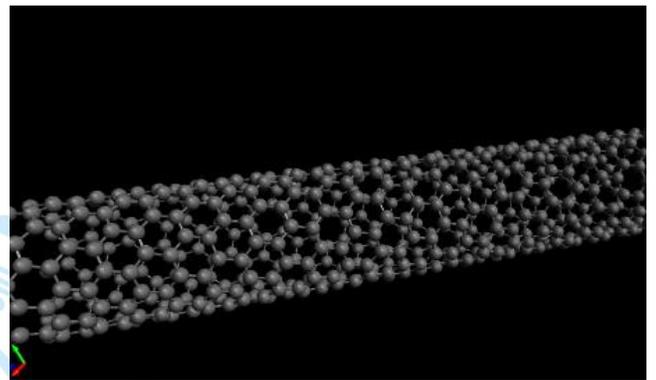


그림 8 탄소 나노 튜브

- Graphene (2D) : 그래핀

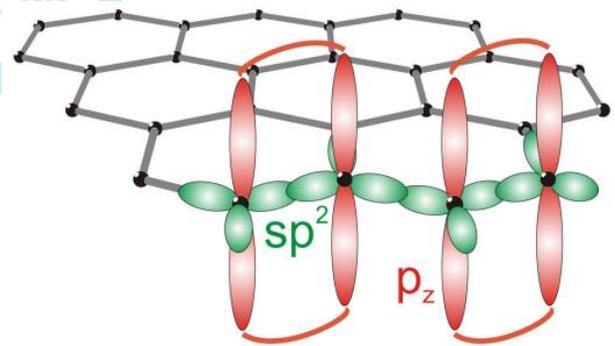


그림 9 그래핀의 분자 구조

- 각 탄소 원자들이 육각형의 격자를 이루는 2 차원 평면 구조임. (벌집구조, 벌집격자)

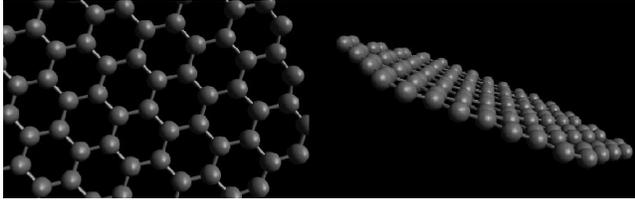


그림 10 그래핀

- Graphite (3D) : 흑연

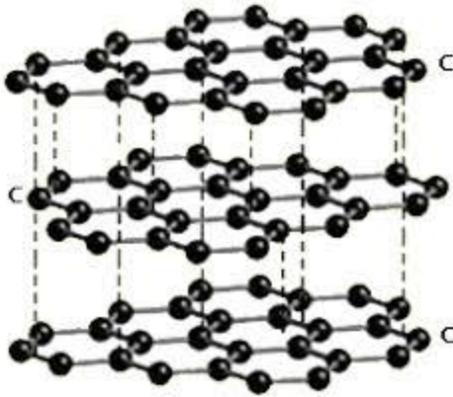


그림 11 흑연의 구조

- 탄소 원자 6 개로 이루어진 고리가 연결되어 층을 이룸.

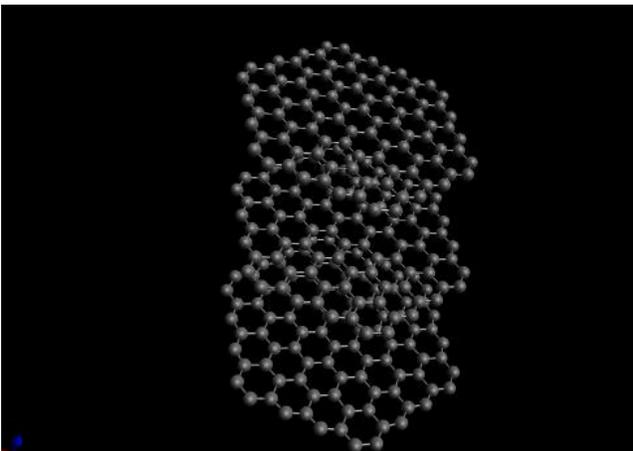


그림 12 흑연

1. 그래핀, TMD, h-BN 소재의 특성과 활용 분야를 알아보고, 1 가지 2D 소재를 선정하고 그 이유를 밝히자.

1.1 그래핀

그래핀의 특성

- 앞서 말한 것처럼 벌집구조의 탄소 원자들이 2 차원 평면을 이룸.
- 강한 공유결합을 하기 때문에 물리적, 화학적 안정성이 높고, 강철보다 200 배 이상 강하면서 기계적인 유연성이 뛰어나.

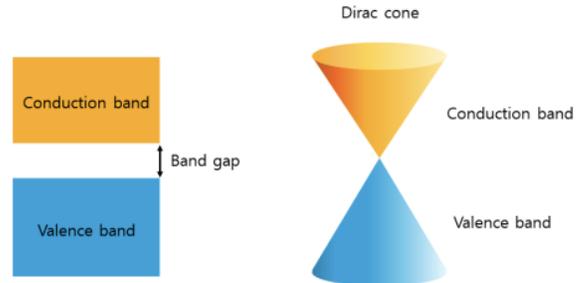


그림 13 반도체의 밴드 구조와 그래핀의 밴드 구조

- Energy band(에너지 띠)는 Conduction band(전도띠)와 Valance band(원자가띠)로 구성됨. band gap(띠틈)은 원자가띠와 전도띠 사이의 간격으로 전자의 이동을 막아주는 역할을 함. 그래핀의 Dirac cone(디랙 콘)의 구조를 가지는데, 모래시계처럼 원자가띠와 전도띠의 꼭짓점이 맞닿아 있음. 이러한 특성 때문에 물질 내 움직이는 전하의 유효질량이 0 이 됨. 다시

말해, 전기가 매우 잘 통함. 도체의 특성을 보임.

- 하지만, 이러한 특성 때문에 전자와 전류의 흐름 제어가 어려워 ON/OFF 상태 간 전환을 필요로 하는 디바이스에 적용되기 어려움. (예: 트랜지스터)
- 도핑 및 표면 개질을 통해 그래핀의 전기적 특성 변환을 통해 단점 극복이 가능함.

그래핀의 가격

- 2D 소재는 대부분 생산 방법과 기존 장치와 원재료의 가격이 비쌈.
- 그래핀의 경우 순도에 따라 1kg 당 20~2,000\$임. 이는 저렴한 가격이 속하지만, 강철에 비해 20 배 높은 가격임.
- 기계적 박리법, 화학기상증착법, 이펙택셜 합성법 및 산화-환원 반응을 이용한 화학적 박리법으로 합성할 수 있음.
- 기계적 박리법은 스카치 테이프의 접착력을 이용해 그래핀을 흑연으로부터 분리해냄. 결함은 적지만 생산 효율이 낮음.
- 화학기상증착법은 촉매를 활용해 탄소와 촉매층을 고온건조 및 냉각으로 그래핀을 형성함. 뛰어난 성능을 가져 유연소자에 적용되지만, 촉매위 그래핀은 별도의 공정없이 사용할 수 없음. 대량 생산이 가능함.
- 화학적 박리법은 산화 환원을 이용해 그래핀을 형성함. 다른 화학물질과 반응시켜 화학적 성질을 바꿀 수 있고,

성분이 고루 섞여 용액제조가 가능해 다양한 분야에서 활용이 가능하며, 대량생산에 유리함. 하지만, 공정 과정에서 강산이 탄소를 산화시켜 완전한 환원이 힘들. 그래핀의 성능이 저하됨.

- 고품질의 합성 기술을 찾는 데 어려움을 겪어 상용화되지 못하고 있음.

그래핀의 활용 분야

디스플레이, 태양전지, 이차전지(리튬 이온 배터리), 조명, 방탄조끼 등

1.2 TMD (Transition Metal Dichalcogenides)

TMD의 특성

- $MX_2$  형태의 단분자 층 구조로 이루어져 2 차원 층상 구조를 이룸. M 은 전이금속 원소를, X는 칼코젠 원소를 나타냄.
- 전이금속은 전이 원소라고도 부르는데, 주기율표의 d-구역 즉, 4~7 주기, 3~12 족 원소를 말함. 중성 원자나 양이온이 됐을 때 d 오비탈에 전자가 부분적으로 채워짐. 다른 원소들과 달리 주어진 족에서 뿐만 아니라 같은 주기에서도 화학적 성질이 유사함. 전이금속에는 몰리브데넘(Mo), 텅스텐(W) 등이 있음.
- 칼코젠 원소는 16 족에 속하는 원소를 말함. 황(S), 셀레늄(Se) 등이 있음.

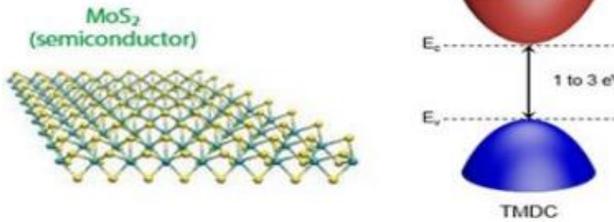


그림 14 MoS2 결정구조와 에너지 띠 구조

- 그래핀과 달리 1~3eV 의 띠를 가짐. 전도띠와 원자가띠가 포물선 모양으로 표현됨. 반도체의 특성을 보이며, 단분자층의 수에 따라 띠를 조절할 수 있어 전자 소자로 적합함.
- 띠를 있어 전하가 그래핀보다 다소 낮지만, 실리콘이나 게르마늄과 비슷해 기존의 반도체 소자 대체에 용이함.
- 칼코겐 층 사이에 전이금속 단일 원소층이 샌드위치 된 구조를 띰.
- 높은 Quantum Yield(양자 수율)을 가짐. 양자 수율은 물질에 의해 방출되는 광자의 개수로, 흡수 광자의 개수의 비율로 계산됨.

- 그래핀과 유사하게 육각구조를 가짐.

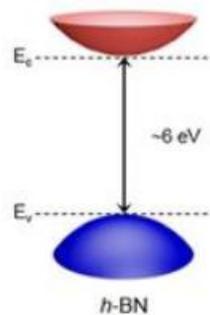


그림 15 h-BN 의 에너지 띠 구조

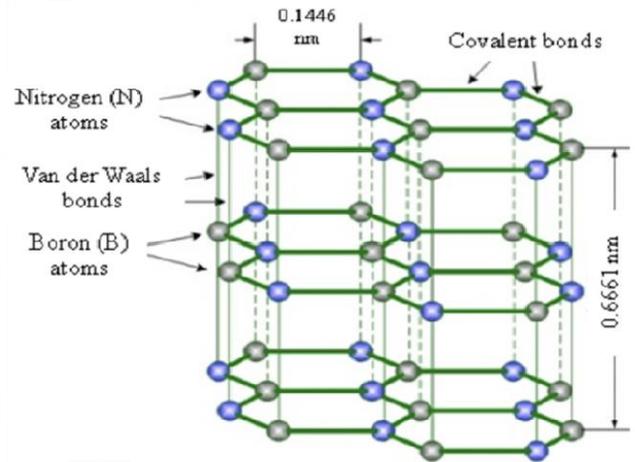


그림 16 h-BN 의 결정 구조

TMD 의 활용분야

물 전기 분해 반응(물로 수소 생산)의 촉매, 유연소자, 트랜지스터, 광검출기 등

1.3 h-BN : 질화붕소

h-BN 의 특성

- 붕소와 질소가 1:1 비율로 구성된 화합물 중 육방정계 결정구조를 가지는 물질을 지칭함.

- 붕소 원자와 질소 원자가  $sp^2$  오비탈에 의해 결합돼 공유결합 중에서 가장 강한 시그마 결합을 형성함.
- 시그마 결합은 결합에 참여하는 원자 궤도가 겹쳐져 형성되는데, 두 물질 사이에 결합을 이루는 전자는 결합을 이루고 있는 두 원자의 결합축을 중심으로 그 둘레에 위치해 전자의 분포가 원통형 대칭이 됨.

- 층간에 반데르발스 힘이 작용해 개별 층이 유지됨. 하지만 시그마 결합에 비해 약해 층간 결합이 쉽게 무너짐.
- 약 6eV 의 띠틈을 가져 부도체의 성질을 가짐.
- 섭씨 약 3000 도까지 견디고 스테인리스 강 정도의 열전도율을 가지고 있어 가열과 냉각을 급속히 반복해도 균열이 생기지 않아 열적으로 우수함.
- 금속, 비금속 물질과의 반응성이 낮아 안정성이 높음.
- 세라믹 물질 중에서 가장 가벼움.

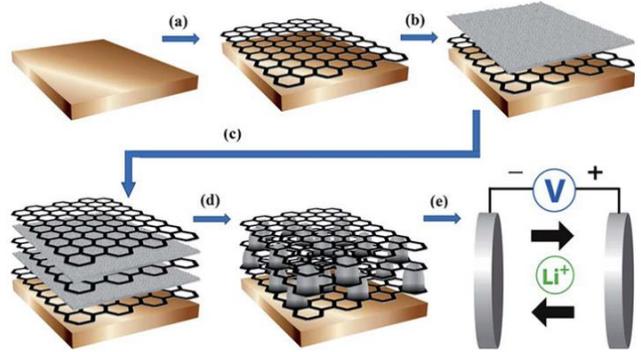


그림 17 리튬이온 전지 양극 보호막과 음극 소재로 활용되는 그래핀 볼 배터리 원리

**h-BN 의 활용분야**

단열재, 내열재, 윤활재, 트랜지스터 등

2. 선정된 소재의 특성에 기반하여 활용할 수 있는 분야를 제시해보자. (ex. 전자 기기, 의료 기기, 환경 기술 등) 해당 분야에서 소재가 어떻게 활용될 수 있는지 위의 응용 분야 설명에 제시된 사진들처럼 다이어그램으로 표현해보자. 디바이스에서 어떤 기능을 위해 소재를 활용했는지 설명해보자.

- 음극은 활물질이 산화되면 외부로 전자를 방출하는 전극임. 음극은 배터리의 충전속도와 수명을 결정하는 데 중요한 역할을 함.

- 시중에 널리 유통된 리튬이온 배터리의 음극 소재로는 주로 흑연이 사용됨. 흑연으로 된 음극재는 이론상 용량의 한계가 약 350mAh/g 내외임.

- 대체제로 흑연보다 에너지 밀도가 10 배 높고 충전 속도가 빠른 실리콘이 주목을 받았지만, 충전 시 부피가 약 3~4 배 팽창함. 즉, 시간이 경과함에 따라 열화로 인해 전기 전도도가 낮아지고, 입자가 부서져 성능과 장기 안정성이 저하됨. 또한, 음극재에 실리콘을 5%만 첨가할 수 있음.

이번 탐구에서는 위에서 조사한 2D 소재들의 특성을 바탕으로 이들이 에너지 분야에서 어떻게 활용되는지 알아보기로 했다.

**- 배터리의 음극재**



그림 18 그래핀이 실리콘을 감싸는 Core-Shell 구조

- 그물망 구조를 가진 그래핀 코팅층이 실리콘의 부피 팽창을 억제할 수 있음.
- 한국 전기 연구원은 산화 환원 공정을 통해 높은 결정성과 전기 전도성을 가진 산화 환원 그래핀 (GO, rGO)을 만들. 이를 통해 실리콘의 양을 기존 5% 이내 수준에서 20% 수준으로 증가시킴.

태양전지

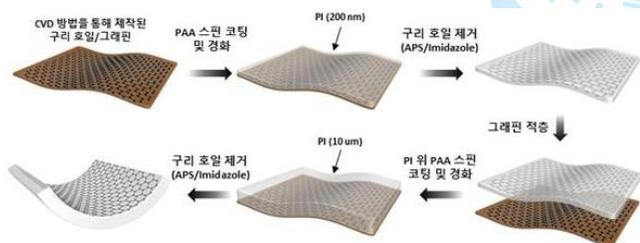


그림 19 폴리이미드 그래핀 일체형 투명전극 제작공정 모식도

- 기존의 딱딱한 전극을 활용하면 유연하고 가벼운 태양전지의 구현이 어렵지만, 그래핀의 특성은 이를 해결할 수 있음.

- 하지만, 그래핀은 얇기 때문에 전극 기관으로 옮길 때 지지층으로 쓰이는 고분자 물질이 완전히 제거되지 않아 전기 전도성을 떨어뜨리고, 기관 위 그래핀을 고정하는 힘이 부족해 떨어지기도 함.

- UNIST 에너지 화학 공학부 박혜성, 양창덕 교수팀은 그림 19의 제조법을 유기 태양 전지에 적용해 15.2%의 광전변환효율을 기록함. 또한, 굽힘에도 98% 이상의 효율을 유지하는 투명한 그래핀 전극을 얻어냄.

수소 발생 촉매

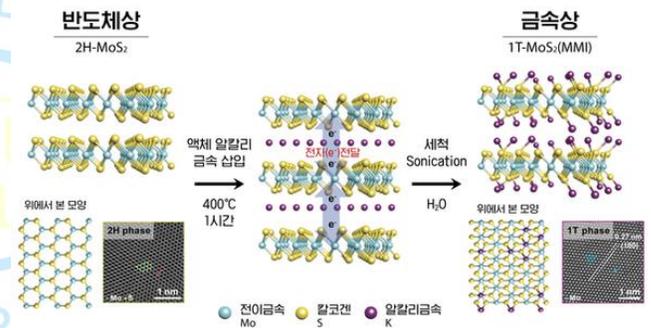


그림 20 모세관현상을 통해 반도체상 칼코겐화합물 층간으로 삽입된 액체 알칼리 금속이 전자를 공급해 금속상으로 바꿈

- 수소 전기차의 상용화를 위해서는 수소를 저가로 생산해야 함. 하지만, 수전해 장치에서 수소 발생 반응 활성과 장기 내구성에서 압도적으로 두각을 드러내는 백금은 가격이 매우 높음.
- 기존의 전이금속 칼코겐 화합물은 합성 속도도 느리고, 다시 반도체 상으로 돌아가기 쉬움.

- UNIST 에너지 및 화학공학부의 박혜성, 김건택, 곽상규 공동 연구팀은 모세관 현상을 이용해 액체 알칼리 금속을 전이금속 칼코겐 화합물에 삽입해 금속성 칼코겐 화합물을 기존의 48~72 시간에 비해 단축된 1 시간만에 합성하는 데 성공함.
- 합성 과정에서 알칼리 금속과 칼코겐 물질 간 결합이 반도체상이 금속상으로 바뀌는데 필요한 에너지 장벽을 낮추고 전자구조를 유지시킴.
- 전기 전도도 또한 향상이 됐기 때문에 충분한 연구를 통해 백금을 대체할 가능성이 높음.

**토의(Discussion), 결론(Conclusion)**

이번 탐구 활동을 진행하면서 차원에 따라 나노 물질이 어떻게 나뉘는지를 알아보았으며, AVOGARDO 프로그램을 활용하여 0 차원, 1 차원, 2 차원, 3 차원 탄소 화합물을 구현함으로써 이해도를 높일 수 있었다. 또한, 나노 소재 중 다양한 분야에서 각광 받고 있는 2D 소재 특히 그래핀, TMD, h-BN 의 특성과 활용 분야를 조사하면서 기존의 물질에 비해 탁월한 광학적, 기계적, 열적 성질을 가졌음을 알게 됐다. 원재료와 장비의 가격이 비싸고, 대량생산이 힘들며, 생산 과정에서 성능의 저하가 일어난다는 한계점을 극복하고 상용화하기 위한 많은 연구가 진행되고 있음을 알 수 있었다.

**REFERENCES**

함선영. (2018). 2 차원 소재. *KISTEP 기술동향브리프*, 05.

김건. (2016). 육각형 질화붕소와 그래핀 접합 구조에 대한 제일원리 연구 Ab Initio Study of Junctions Comprising Hexagonal Boron Nitride Sheets and Graphene. 세종대학교 산학협력단.

김경남 . (2016). 그래핀의 기술개발동향 및 응용.

“그린 수소, 가격↓·생산 효율↑”...수전해 촉매 합성법 개발됐다. (2023, June 5). NEWSIS. [https://www.newsis.com/view/NISX20230605\\_0002327620](https://www.newsis.com/view/NISX20230605_0002327620)

한음표. (2020, July 12). 액체 알칼리 금속 이용한 금속상 전이금속 칼코겐 화합물(TMD) 합성법 개발. 기계신문. <https://www.mtnews.net/news/articleView.html?idxno=8764>

한음표. (2024, May 30). 리튬이온전지 성능 '업'...흑연 대체 실리콘 음극재 개발. 동아사이언스. <https://m.dongascience.com/news.php?idx=65600>

전용현. (2023, April 26). 한국 기술 선도..꿈의 신소재 그래핀 배터리 분야⑤화. 내외신문. <https://www.nawaynews.com/300706>

성재경. (2020, July 13). ‘저절로 스며드는 액체금속’으로 차세대 수소 촉매 보완. 월간수소경제. <https://www.h2news.kr/news/articleView.html?idxno=8354>