

“같은 소재라도 ‘결정 방향’이 성능 3배 높인다”

GIST, 물질은 그대로 두고 원자 배열만 바꿔 고부가가치 화합물 생산 효율 높인 광전극 개발

- 신소재공학과 이상한 교수팀 비스무스 바나데이트(BiVO₄) 광전극의 결정 배열 방향 제어만으로 광전기화학 성능 대폭 향상.. 바이오디젤 부산물(글리세롤)→고부가가치 화학원료 전환 효율 개선
- 특정 결정 방향 광전극에서 광전류생성물 생산성 최대 3배 이상 향상, 화학 조성 변경 없이 성능 높이는 새로운 광전극 설계 기준 제시.. 국제학술지《Materials Horizons》거제



▲ (왼쪽부터) 신소재공학과 이상한 교수, 이민주 석사과정생, 황준범 박사과정생

태양에너지를 활용해 화학 반응을 유도하는 광전기화학 기술은 탄소 배출을 줄이는 친환경 에너지 생산뿐 아니라, 산업 부산물과 폐기물을 고부가가치 화합물로 전환할 수 있는 차세대 기술로 주목받고 있다.

특히 바이오디젤* 제조 과정에서 대량으로 발생하는 글리세롤을 유용한 화학원료로 전환하는 기술은 자원 순환과 친환경 산업 측면에서 그 중요성이 크다.

이러한 가운데 국내 연구진이 같은 광전극 소재라도 결정이 배열된 방향에 따라 반응 성능이 크게 달라질 수 있음을 새로운 접근법으로 밝혀내고, 태양에너지 기반 화학원료 전환 기술의 새로운 설계 기준을 제시했다.

* **바이오디젤:** 식물성 기름이나 폐식용유 등 재생 가능한 자원을 이용해 만드는 친환경 연료로, 생산 과정에서 글리세롤이 부산물로 발생한다.

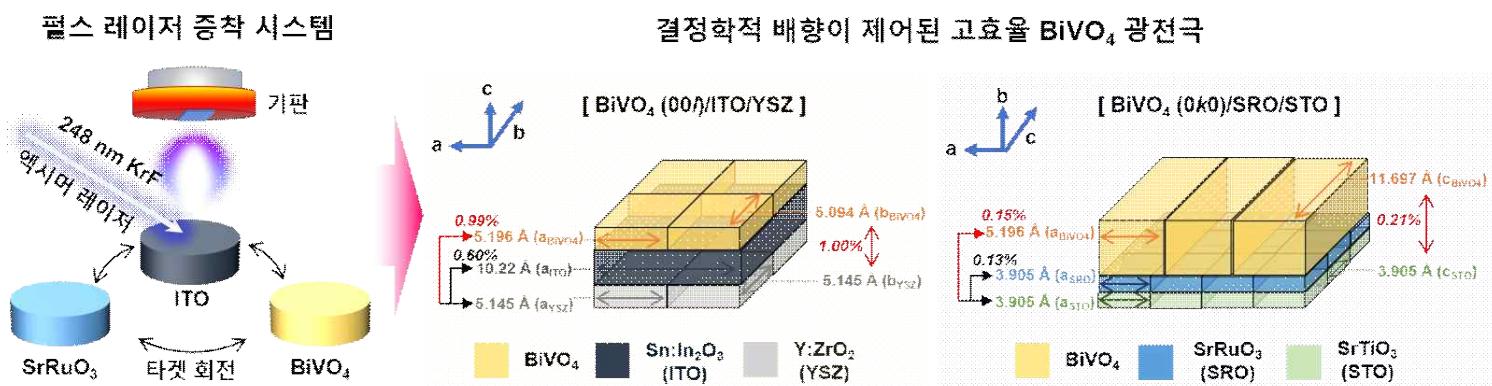
광주과학기술원(GIST, 총장 임기철)은 신소재공학과 이상한 교수 연구팀이 광전극* 을 이루는 물질의 결정이 배열된 방향(결정학적 배향*)을 정밀하게 제어한 비스무스 바나데이트*(BiVO₄) 기반 광전극을 개발하고, 이를 통해 글리세롤을 산화하는 반응의 효율과 고부가가치 화합물의 생산성을 획기적으로 높이는 데 성공했다고 밝혔다.

글리세롤은 바이오디젤 제조 과정에서 대량으로 발생하는 부산물로, 이를 효율적으로 산화하면 화장품·의약·화학 산업에 활용 가능한 고부가가치 화합물로 전환할 수 있다.

* **광전극**: 빛을 흡수해 전자와 정공을 생성하여 이를 전달해 화학 반응을 일으키는 역할을 하는 소재이다.

* **결정학적 배향**: 결정 물질의 내부에서 원자들이 배열된 방향을 의미하며, 이 방향에 따라 물질의 전기적·화학적 성질이 달라질 수 있다.

* **비스무스 바나데이트(BiVO_4)**: 뛰어난 광흡수 능력과 전하 이동 특성으로 인하여 금속 산화물 기반 광전극 소재로 주목받으며, 광전기화학 반응을 이용한 물분해 및 폐기물 전환에 매우 유망한 물질로 평가된다.



▲ 펄스 레이저 증착법을 이용한 결정학적 배향이 제어된 고효율 BiVO_4 광전극 제작 모식도. 본 연구팀은 펄스 레이저 증착법을 활용하여 결정 구조가 균일하고 방향이 일정한 YSZ 및 STO 기판 위에 각각 다른 결정학적 배향의 BiVO_4 광전극을 제작하였다.

연구팀은 결정이 한 방향으로 균일하게 정렬된 단결정 기판 위에 펄스 레이저 증착법(PLD)^{*}을 적용해, 서로 다른 결정학적 배향을 갖는 비스무스 바나데이트(BiVO_4) 박막 광전극을 정밀하게 제작했다. 이후 동일한 조건에서 광전기화학적 성능과 글리세롤 산화 반응 특성을 비교·분석했다.

그 결과, 결정이 특정 방향으로 정렬된 비스무스 바나데이트(BiVO_4) 광전극은, 다른 방향의 광전극에 비해 전하 전달 효율이 크게 향상됐으며, 실제 글리세롤 산화 반응에서도 뚜렷한 성능 차이를 보였다.

이 가운데 $(0k0)^*$ 방향으로 결정이 정렬된 광전극은, $(00l)^*$ 방향의 광전극에 비해 우수한 성능을 나타냈다.

* **펄스 레이저 증착법(Pulsed Laser Deposition, PLD)**: 고에너지 레이저를 이용해 타겟 소재를 증발시킨 후 기판 위에 고품질의 박막을 형성하는 기술이다.

* **$(0k0)$, $(00l)$** : 결정 물질에서 원자들이 노출되는 결정면의 방향을 나타내는 결정학적 표기법으로, 표면 반응 특성과 전하 이동 특성에 영향을 준다.

실제 글리세롤 산화 반응 실험에서, 성능이 우수한 결정 방향(0k0)의 광전극은 광전극 면적당 광전류 밀도 2.51 mA를 기록하며, 다른 결정 방향(00l)의 광전극 대비 약 2.4배 높은 성능을 보였다.

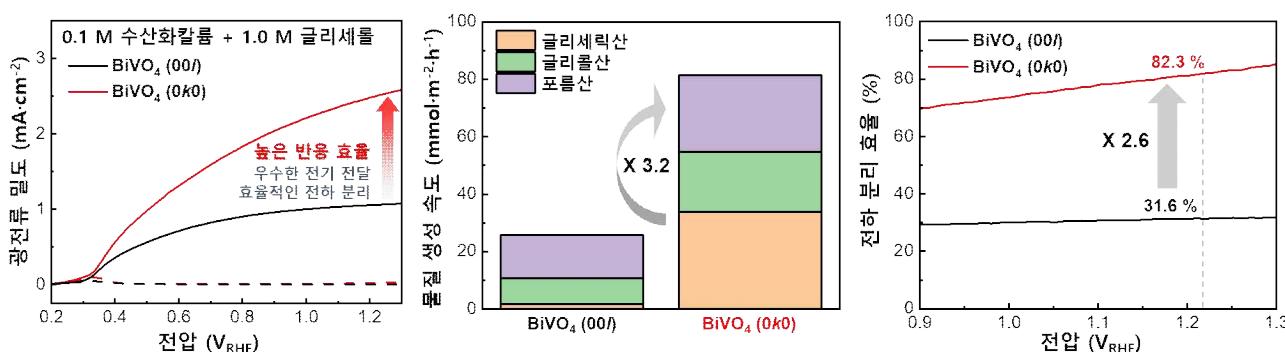
또한 글리세릭산, 글리콜산, 포름산 등 고부가가치 화합물의 생성 속도 역시 81.4 mmol·m⁻²·h⁻¹로, 상대적으로 낮은 성능을 보인 광전극(00l) 대비 최대 3.2배 이상 향상된 것으로 확인됐다.

이는 광전극 내부에서 생성된 전자와 정공이 반응에 보다 효율적으로 사용되었음을 의미하며, 같은 물질이라도 결정이 배열된 방향에 따라 반응 성능이 크게 달라질 수 있음을 실험적으로 입증한 결과다.

연구팀은 성능 향상의 원인을 분석하기 위해 전하 이동 특성과 재결합 거동을 정밀하게 조사했다. 그 결과, 성능이 우수한 결정 방향의 광전극(0k0)에서는 전하가 서로 재결합하지 않고 분리된 상태로 유지되는 특성이 크게 개선된 것을 확인했다.

결정학적 배향을 제어함으로써 전하가 이동하는 결정 내부 경로가 보다 효율적으로 형성되었고, 이로 인해 생성된 전하가 손실 없이 글리세롤 산화 반응에 참여하면서 광전극의 반응 성능과 생성물 생산성이 동시에 향상된 것이다.

* 결정학적 배향(Crystallographic orientation): 결정 물질 내부에서 원자들이 배열된 특정 방향을 의미한다. 동일한 화학 조성을 가진 물질이라도 결정학적 배향에 따라 전하 이동 경로, 표면 반응 특성, 전기적·화학적 성질이 크게 달라질 수 있다.



▲ 결정학적 배향에 따른 BiVO₄ 광전극의 광전기화학 성능 비교. 결정학적 배향이 (0k0)으로 제어된 BiVO₄ 광전극은 (00l) 배향 대비 더 높은 광전류 밀도를 나타내며, 글리세롤 산화 반응에서 글리세릭산, 글리콜산, 포름산 등 고부가가치 화합물의 생성 속도가 약 3.2배 향상되었다. 성능 향상의 원인을 분석한 결과, (0k0) 배향 광전극의 전하 분리 효율이 약 2.6배 우수한 것으로 나타났으며, 이는 결정학적 배향 제어를 통해 전기 전달이 원활해지고 전하 이동이 효과적으로 이루어지면서 광전극의 반응 성능과 생성물 생산성이 동시에 향상됨을 보여준다.

이번 연구의 가장 큰 의의는 광전극의 화학 조성이나 복잡한 구조를 변경하지 않고도, 오직 결정학적 배향이라는 근본적인 설계 요소만으로 광전기화학 반응 성능을 획기적으로 개선할 수 있음을 입증했다는 점이다.

연구팀은 이번 성과가 향후 태양에너지 기반 친환경 화학원료 생산 기술, 나아가 폐기물 자원화 및 탄소 저감형 화학 공정의 실용화 가능성을 크게 넓힐 것으로 기대하고 있다.

이상한 교수는 “이번 연구는 광전극의 결정학적 배향에 따라 광전기화학적 글리세롤 산화 성능이 어떻게 달라지는지를 세계 최초로 체계적으로 규명한 사례”라며, “폐기물을 고부가가치 화합물로 전환하는 태양에너지 기반 기술의 새로운 설계 기준을 제시했다는 점에서 의미가 크다”고 말했다.

GIST 신소재공학과 이상한 교수가 지도하고 이민주 석사과정 학생과 황준범 박사과정 학생이 수행한 이번 연구는 과학기술정보통신부·한국연구재단 개인기초연구사업(중견연구)과 미래수소원천기술개발사업의 지원을 받았다.

연구 결과는 국제학술지 《머티리얼스 호라이즌스(Materials Horizons)》에 2026년 1월 13일 온라인으로 게재됐다.

한편 GIST는 이번 연구 성과가 학술적 의의와 함께 산업적 응용 가능성까지 고려한 것으로, 기술이전 관련 협의는 기술사업화센터(hgmoon@gist.ac.kr)를 통해 진행 할 수 있다고 밝혔다.

논문의 주요 내용

1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Materials Horizons (IF: 10.7, 2024년 기준)
- 논문명 : Orientation-engineered Epitaxial BiVO₄ Thin Films for Efficient Photoelectrochemical Glycerol Valorization
- 저자 정보 : 이민주 (공동 제1저자, GIST 신소재공학과), 황준범 (공동 제1저자, GIST 신소재공학과), 정윤성 (공저자, GIST 신소재공학과), 양지웅 (공저자, GIST 신소재공학과), 장윤서 (공저자, GIST 신소재공학과), 오인혁 (공저자, GIST 신소재공학과), 김예준 (공저자, GIST 신소재공학과), 조용륜 (공저자, GIST 중앙기기연구소), 이상한 (교신저자, GIST 신소재공학과)