

자동화 합성을 통한 차세대 광전자소재 디스커버리

Discovery of Future Optoelectronic Materials via Automated Synthesis

신수범 · 양중희 | Subeom Shin · Jonghee Yang

Department of Chemistry, Yonsei University, 50 Yonsei-ro, Seodaemun-gu, Seoul 03722, Korea
E-mail: jhyang@yonsei.ac.kr

1. 서론

광전자(optoelectronic) 소재는 빛과 전자의 상호작용을 활용하여 다양한 전자 및 광학 소자를 구현하는 핵심 기술로, 반도체 산업과 광학 기술의 발전에 따라 지속적으로 진화해 왔다. 초기에는 실리콘과 게르마늄과 같은 전통적 반도체 기반의 광전자 소자가 주류를 이루었으나, 이후 비소화 갈륨, 인화인듐 등 화합물 반도체, 질화갈륨, 유기 발광체 등과 같은 고성능 소재 기반의 광전자 소자 개발로 크게 확장되었다. 최근에는 2차원 소재(그래핀, MoS_2), 메타물질, 페로브스카이트 등의 혁신적 신소재 연구가 활발히 진행되면서 차세대 광전자 소자의 가능성을 열어가고 있다.

광전자 소재는 광통신, 디스플레이, 태양광 발전, 센서 및 레이저 기술 등 다양한 산업 분야에서 필수적인 역할을 한다. 예를 들어, LED와 OLED 기술은 고효율 디스플레이와 조명 산업을 혁신시켰으며, 광섬유 기반 광통신은 5G, 6G 시대의 초고속 데이터 전송을 가능하게 하고 있다. 또한, 태양광 발전을 위한 고효율 광전자 소재 개발은 지속 가능한 에너지원 확보의 중요한 열쇠가 되고 있다. 그러나 수십년에 걸친 발전에도 여전히 높은 제조 비용, 공정의 복잡성, 내구성 및 안정성 문제와 같은 다양한 기술적 난제가 존재하며, 이를 극복하기 위한 연구개발이 필수적이다.

최근 이러한 한계를 극복하기 위해 자동화(automated) 합성 및 인공지능(AI) 기반 최적화 기법이 도입되고 있다. 특히, AI 기반 실험 설계 및 머신러닝(ML) 분석을 넘어, 이들이 로봇과 융합된 자율화(autonomous) 실험 플랫폼의 도래로 신소재 탐색 속도가 획기적으로 향상되고 있다.^{1,2} 본 총설에서는 자동화 합성과 AI를 활용한 소재 개발의 최신 동향을 분석하고, 이를 기반으로 광전자 소재 및 소자 연구의 발전 가능성을 논의하고자 한다.

2. 본론

2.1 신소재 개발의 자동화 합성 필요성

신소재 개발은 기존의 실험적 접근 방식으로는 많은 시간과 자원이 소모되는 과정이다. 전통적인 소재 합성 방법은 연구자의 경험과 반복적인 실험에 의존하기 때문에, 원하는 물성을 갖춘 신소재를 찾기까지 상당한 시일이 걸릴 수 있다. 이에 반해, 로봇을 활용한 자동화 실험은 미세한 조성변화에도 정밀하게 대응할 수 있으며, 사람이 개입할 때 발생할 수 있는 오류를 최소화하여 실험의 신뢰도를 높일 수 있다. 특히, 광전자 소재와 같이 미세한 조성 변화가 물성에 큰 영향을 미치는 분야에서는 이러한 자동화 기술이 더욱 중요한 역할을 한다.³⁻⁵

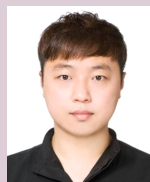
Author



신수범

2016
2024-현재

한양대학교 화학과 (학사)
연세대학교 화학과
석박사통합과정



양중희

2014
2020
2020-2021
2021-2024

한양대학교 화학과 (학사)
한양대학교 화학과 (박사)
한양대학교 화학과 (Post-Doc.)
University of Tennessee at
Knoxville 재료공학과
(Post-Doc.)
연세대학교 화학과 조교수

2024-현재

신소재 개발에서는 다양한 조합의 후보 물질을 실험적으로 검증해야 하는데, 기존의 trial and error 방식으로는 이러한 탐색이 매우 시간이 오래 걸린다. 하지만 자동화 합성 시스템을 활용하면 실험, 평가 횟수를 기하급수적으로 증가시킬 수 있어 신소재 탐색 속도를 획기적으로 향상시킬 수 있다. 예를 들어, 로봇 기반의 실험 플랫폼과 병렬 합성 시스템을 활용하면 다수의 실험을 동시에 수행할 수 있으며, 고속 분광 및 전기적 특성 분석 기법을 활용하여 신소재의 성능을 신속하게 평가할 수 있다. 특히, 광전자 소재의 경우 새로운 밴드갭, 전하 이동도, 광흡수 특성을 가지는 재료를 찾는 것이 핵심인데, 자동화 합성을 통해 이러한 특성을 최적화하는 연구가 가속화될 수 있다.

Amassian 연구팀은 RoboMapper라는 소재 가속화 플랫폼(material acceleration platform, MAP)을 제안하여 페로브스카이트 소재의 특성을 고속 분석했다(그림 1).⁵ 이상적인 밴드갭(1.7 eV)을 가지고 높은 안정성을 가지는 페로브스카이트 소재를 탐색하였고, 이를 적용한 태양전지에서 광전 변환 효율 19.2%를 달성했다. 이 과정에서 기존대비 10배 이상의 실험 속도를 구현하여 연구에 소모되는 자원을 최소화하고 환경 영향을 줄일 수 있다고 설명하였다.

2.2 광전자 소재 자동화 합성

전통적 광전자 소재 연구/개발 방식은 연구자의 경험과

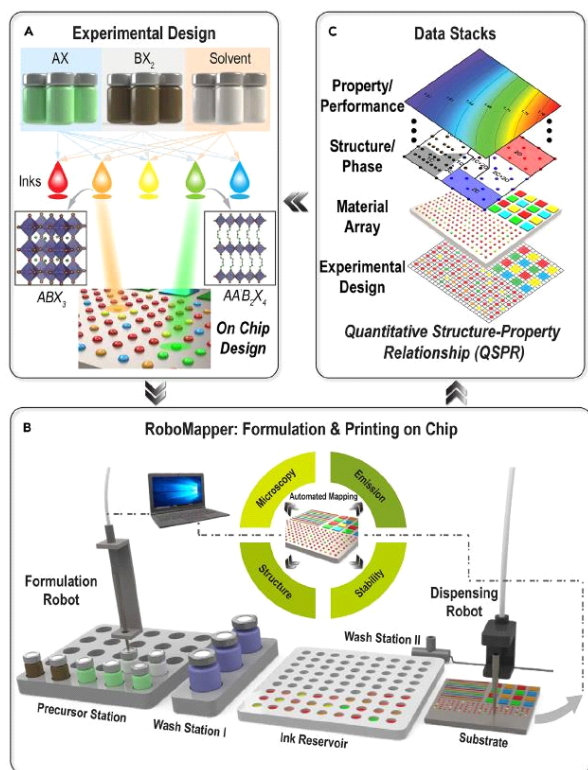


그림 1. 가속화 플랫폼 신소재 자동화 개발 워크플로.⁵

반복 실험에 의존하며, 다양한 조성을 평가하는 데 많은 시간과 비용이 소요되는 한계가 있다. 이러한 문제를 해결하기 위해 자동화 합성 기술과 AI 기반 신소재 탐색 기법이 적극적으로 도입되고 있다. 로봇 기반 자동화 실험은 합성 조건을 다양하게 변화시키면서 다양한 물질 조성 및 물리적 변수를 신속하게 평가할 수 있으며, 고속 분광 분석 기법을 통해 실시간으로 광학적 특성을 측정함으로써 최적의 소재를 빠르게 선별할 수 있다.⁶⁻⁸ 자율 실험 시스템을 활용, 실험 데이터를 실시간으로 분석하고 최적의 분자 구조를 반복적으로 개선하는 방법도 주목받고 있다. 이러한 자동화 및 AI 기반 접근법을 활용하면 기존 수개월 이상 소요되던 신소재 탐색을 단기간 내 수행할 수 있으며, 최적의 합성 조건을 효과적으로 발굴할 수 있다.⁹⁻¹²

Brabec 그룹은 AMANDA(autonomous materials and device application) 플랫폼을 개발하여, 자동화된 태양전지 소자 제조 및 특성 분석을 수행하고 있다(그림 2).¹¹ 연구팀은 도너 물질인 PM6 고분자와 비풀러렌계 엑셉터 물질인 Y6을 기반으로 하는 유기태양전지의 광전 변환 효율 및 광안정성을 최적화하기 위해 AMANDA 플랫폼을 활용하였으며, 이를 통해 최적 조성 및 합성 조건을 도출하는 데 걸리는 시간이 기존 연구 방식 대비 최대 10배 단축했다.

Ahmadi 그룹은 고처리량(high-throughput, HT) 자동화 실험 시스템을 활용하여 준2차원 금속 할라이드 페로브스카이트의 상 발현 경향성 분석 및 조성 최적화를 수행하였다.¹² 2차원 페로브스카이트(PEA_2PbI_4)와 3차원 페로브스카이트(FAPbI_3)의 조성에 따른 광학적 특성 변화에 관한 6천개 이상의 스펙트럼에 대한 자동화 피크 분석을 수행하였다. 이를 바탕으로, 페로브스카이트 소재의 결정화 과정에 관한 열역학 및 동역학적 메커니즘을 제안했다. 이는 고처리량 자동화 실험이 광전자 소재 시스템 본연의 물리·화학적 특성을 밝히는 기초과학 연구 또한 가능함을 시사한다. 소재에 관한 기초 원리의 효과적으로 탐구할 수 있도록 설계된 신개념 연구 방법론의 개발은 신소재 개발의 고속화에 기여한다.

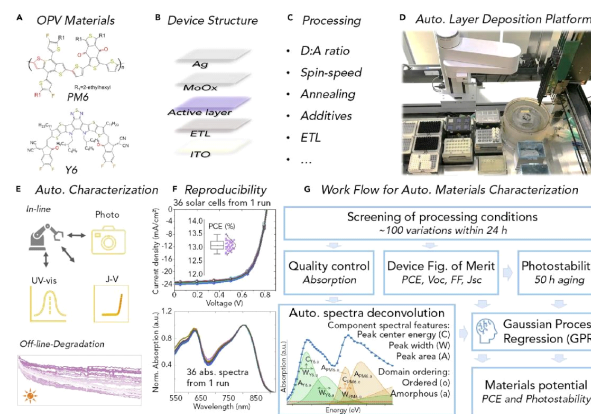


그림 2. 로봇을 활용한 고분자 신소재 자동화 합성.¹¹

유기태양전지의 경우 롤투롤(roll-to-roll) 슬롯 다이 코팅 기반 HT 공정, 그리고 머신러닝 및 실시간 조성 제어 기법을 결합한 신개념의 소재 개발 방법론이 제안된 바 있다.¹³ 이를 활용하여 2,218가지의 유기태양전지 소자를 제작하고 이를 머신러닝 모델 학습 데이터로 사용, 최적의 고효율 조성을 예측했다. 이를 통해 최대 광전 변환 효율 10.2%를 달성하는데 성공했다. 이 연구는 다양한 유기 전자소재 연구에 머신러닝 기반 접근법이 활용 가능성을 제시했다.

2.3 빅데이터 및 AI 활용 소재 개발 가속화

광전자 소재의 연구개발에 자동화 실험 시스템(로봇 기반 실험 및 고속 분석 기술)을 적용함으로써 단기간 내에 다량의 조성을 합성하고 평가할 수 있으며, 이를 통해 방대한 양의 실험 데이터를 축적하는 것이 가능하다. 이렇게 확보된 데이터의 양은 전통적인 분석 방법을 활용하여 분석하기 불가능할 정도로 크기 때문에 확보된 빅데이터를 효과적으로 활용하기 위해 AI 머신러닝 기술이 적극적으로 도입되고 있으며, 이를 통해 신소재 탐색 및 최적화 과정이 획기적으로 개선되고 있다.^{2,14-19} AI 모델은 실험 데이터를 학습하여 물리적, 화학적 특성과의 상관관계를 분석하고, 최적의 조성을 예측하는 데 활용될 수 있다. 또한, 머신러닝 알고리즘을 활용하면 특정 목표(예: 높은 발광 효율, 낮은 재결합 손실 등)에 최적화된 후보 물질을 도출하고, 실험 결과를 지속적으로 학습하면서 최적화된 물질 설계를 가속화할 수 있다. 이러한 AI 기반 접근법은 연구자의 직관적 설계와 비교하여 더 광범위한 조합을 탐색할 수 있으며, 기존의 소재 개발 방식보다 훨씬 빠르고 정밀하게 고성능 광전자 소재를 설계할 수 있게 해준다.

일례로, 최근 고처리량 자동화 합성을 활용한 페로브스카이트 소재 연구에 가우시안 프로세스 기반 베이저안 최적화(gated Gaussian process Bayesian optimization, Gated-GPBO) 기법을 통해 다양한 분자 공간상에서 최적의 화학 조성을 탐색을 가능하게 하는 연구 방법론이 제안되었다.¹⁴ 이를 통해 전통적인 연구법을 통해 탐색하기 어려웠던 삼성분계(ternary) 준2차원 페로브스카이트 시스템에 대한 연구를 효율적으로 수행할 수 있었고, 머신러닝을 활용한 빅데이터 분석을 통해 다양한 기능성 소재 연구를 가속화할 수 있음을 보였다.

최근에는 생성형(generative) AI 모델이 소재 개발에

적용되면서, 새로운 물질 조성 and 구조를 예측하는 연구가 주목받고 있다.^{8,15,16,20} 생성형 AI 모델은 기존의 실험 데이터를 기반으로 새로운 화학 조성을 생성하거나, 특정 목표 물성을 갖는 분자 구조를 설계하는 데 활용될 수 있다. 예를 들어, 생성적 적대 신경망(generative adversarial networks, GANs) 또는 트랜스포머 기반 AI 모델을 이용하면 기존 소재 데이터에서 학습한 패턴을 바탕으로 새로운 광전자 소재 후보를 설계할 수 있으며, 이를 자동화 합성과 연계하여 실험적으로 검증함으로써 신소재 개발 주기를 대폭 단축할 수 있다. 또한, 강화 학습(reinforced learning) 기반 AI 시스템은 실험 결과를 실시간으로 반영하여 최적의 합성 경로를 자동으로 제안할 수 있어, 연구자가 보다 효율적으로 신소재를 개발할 수 있도록 지원한다. 향후 자동화 합성과 AI 기반 설계, 생성형 AI 모델의 융합을 통해 고성능·저비용의 고분자 광전자 소재 개발이 더욱 가속화될 것으로 기대되며, 이를 통해 차세대 광전자 기술의 혁신이 가속될 것이다.

2020년, Batra 연구팀은 구문 지향 변분 자동 인코더(syntax-directed variational autoencoder, SD-VAE)와 가우시안 프로세스 회귀 모델을 활용하여 새로운 고분자 특성을 예측하는 연구를 수행했다(그림 3A).¹⁵ 연구팀은 높은 유리전이온도(T_g) 및 큰 밴드갭을 갖는 고분자를 합성하기 위해 분자 구조를 SMILES(simplified molecular input line entry system) 표현 방식으로 변환하여 학습 데이터로 활용하였고 머신러닝을 통해 고분자 고유의 물리적 성질(T_g , 밴드갭)을 예측했다. 이 연구는 VAE 기반의 역문제 접근법을 제안하여 다양한 신소재 설계에 머신러닝을 적용할 수 있는 가능성을 보였다.

같은 해 MacKenzie 연구팀은 심층 신경망(deep neural network, DNN)을 활용하여 유기태양전지의 미세 구조적 특성을 예측하는 연구를 수행했다(그림 3B).¹⁶ 연구팀은 20,000개 이상의 데이터 샘플을 분석하고, 이를 바탕으로 유기태양전지 소자의 주요 특성을 자동으로 추출하였다. 이 연구는 AI가 실험 데이터를 더욱 정밀하게 분석할 수 있음을 보여주었으며, 기존보다 효율적인 신소재 개발이 가능함을 시사한다.

2.4 자동화 합성을 통한 소재 연구/개발

광전자 소자의 성능은 소재의 조성 뿐 아니라 소자의 제작

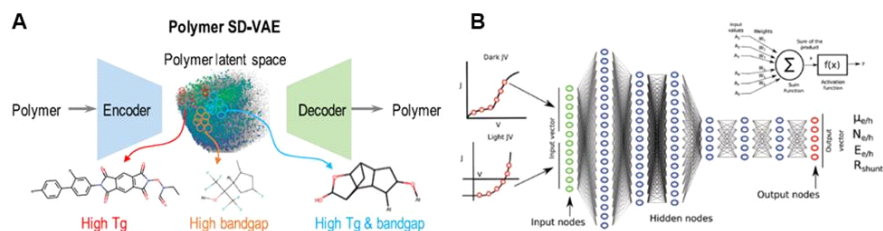


그림 3. 빅데이터 AI를 활용한 소재 예측. (A) 구문 지향 변분 자동 인코더(SD-VAE), (B) 심층 신경망(DNN).^{15,16}

3. 결론

광전자 소재 및 소자 연구는 고성능, 고효율, 친환경적인 차세대 기술 개발을 목표로 지속적으로 발전해 왔으며, 최근 자동화 합성과 AI 기반 연구방법이 도입되면서 신소재 탐색과 소자 개발의 속도가 획기적으로 향상되고 있다. 기존의 연구 방식은 연구자의 직관과 반복 실험에 의존하여 긴 개발 주기와 높은 비용이 요구되었으나, 자동화 합성 기술을 통해 대량의 조성을 신속하게 합성하고 평가할 수 있는 환경이 마련되면서 신소재 탐색이 더욱 정밀하고 효율적으로 이루어지고 있다. 또한, AI 및 머신러닝 기법을 활용한 데이터 기반 연구는 실험 데이터의 분석 속도를 높이고 최적의 조성을 예측하는 데 기여함으로써 연구 효율성을 극대화하고 있다.

향후 자동화 합성과 AI 기술의 발전이 가속화됨에 따라 광전자 소재 및 소자 연구의 효율성은 더욱 향상될 것이며, 차세대 디스플레이, 태양전지, 광검출기, 광통신 소자 등 다양한 응용 분야에서 혁신적인 성과가 기대된다. 또한, 데이터 기반 연구와 실험 자동화의 융합은 신소재 개발의 전반적인 접근 방식을 변화시키면서 연구 주기를 단축하고 비용을 절감하는 데 기여할 것이다. 이러한 기술적 진보는 광전자 산업뿐만 아니라 다양한 첨단 산업 전반에 걸쳐 새로운 기회를 제공하며, 미래의 지속 가능한 에너지, 차세대 정보통신 기술, 고성능 센서 개발 등에 핵심적인 역할을 할 것으로 전망된다.

참고문헌

1. A. J. Gormley and M. A. Webb, *Nat. Rev. Mater.*, **6**, 643 (2021).
2. F. Strieth-Kalthoff, H. Hao, V. Rathore, J. Derasp, T. Gaudin, N. H. Angello, M. Seifrid, E. Trushina, M. Guy, J. Liu, X. Tang, M. Haddadnia, W. Wang, T. Tsagaantsooj, C. Lavigne, R. Pollice, T. C. Wu, K. Hotta, L. Bodo, S. Li, M. Haddadnia, A. Wolos, R. Roszak, C. T. Ser, C. Bozal-Ginesta, R. J. Hickman, J. Vestfrid, A. Aguilar-Granda, E. L. Klimareva, R. C. Sigerson, W. Hou, D. Gahler, S. Lach, A. Warzybok, O. Borodin, S. Rohrbach, B. Sanchez-Lengeling, C. Adachi, B. A. Grzybowski, L. Cronin, J. E. Hein, M. D. Burke, and A. Aspuru-Guzik, *Science*, **384**, eadk9227 (2024).
3. K. Antami, F. Bateni, M. Ramezani, C. E. Hauke, F. N. Castellano, and M. Abolhasani, *Adv. Funct. Mater.*, **32**, 2108687 (2022).
4. J. Zhang, J. Wu, A. Barabash, T. Du, S. Qiu, V. M. LeCorre, Y. Zhao, K. Zhang, F. Schmitt, Z. Peng, J. Tian, C. Li, C. Liu, T. Heumueller, L. Lüer, J. A. Hauch, and C. J. Brabec, *Energy Environ. Sci.*, **17**, 5490 (2024).
5. T. Wang, R. Li, H. Ardekani, L. Serrano-Luján, J. Wang, M. Ramezani, R. Wilmington, M. Chauhan, R. W. Epps, K. Darabi, B. Guo, D. Sun, M. Abolhasani, K. Gundogdu, and A. Amassian, *Matter*, **6**, 2963 (2023).
6. A. Vriza, H. Chan, and J. Xu, *Chem. Mater.*, **35**, 3046 (2023).
7. Q. Yang, A. Vriza, C. A. CastroRubio, H. Chan, Y. Wu, and J. Xu, *Chem. Mater.*, **36**, 2602 (2024).
8. L. Simine, T. C. Allen, and P. J. Rossky, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **25**, 13945 (2020).
9. C. P. Callaway, A. L. Liu, R. Venkatesh, Y. Zheng, M. Lee, J. C. Meredith, M. Grover, C. Risko, and E. Reichmanis, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **14**, 3613 (2022).
10. J. Najeeb, S. S. A. Shah, M. H. Tahir, A. I. Hanafy, S. M. El-Bahy, and Z. M. El-Bahy, *Mater. Chem. Phys.*, **324**, 129685 (2024).
11. X. Du, L. Luer, T. Heumueller, J. Wagner, C. Berger, T. Osterrieder, J. Wortmann, S. Langner, U. Vongsaysy, M. Bertrand, N. Li, T. Stubhan, J. Hauch, and C. J. Brabec, *Joule*, **5**, 495 (2021).
12. M. Um, S. L. Sanchez, H. Song, B. L. Lawrie, H. Ahn, S. V. Kalinin, Y. Liu, H. Choi, J. Yang, and M. Ahmadi, *Adv. Energy Mater.*, 2404655 (2024).
13. N. G. An, J. Y. Kim, and D. Vak, *Energy Environ. Sci.*, **14**, 3438 (2021).
14. J. Yang, B. L. Lawrie, S. V. Kalinin, and M. Ahmadi, *Adv. Energy Mater.*, **13**, 2302337 (2023).
15. R. Barta, H. Dai, T. D. Huan, L. Chen, C. Kim, W. R. Gutekkunst, L. Song, and R. Ramprasad, *Chem. Mater.*, **32**, 10489 (2020).
16. N. Majeed, M. Saladina, M. Krompiec, S. Greedy, C. Deibel, and E. C. I. MacKenzie, *Adv. Funct. Mater.*, **30**, 1907259 (2020).
17. X. Rodriguez-Martinez, E. Pascual-San-Jose, and M. Campoy-Quiles, *Energy Environ. Sci.*, **14**, 3301 (2021).
18. A. A. Volk, R. W. Epps, D. T. Yonemoto, B. S. Masters, F. N. Castellano, K. G. Reyes, and M. Abolhasani, *Nat. Comm.*, **14**, 1403 (2023).
19. F. Bateni, S. Sadeghi, N. Orouji, J. A. Bennett, V. S. Punati, C. Stark, J. Wang, M. C. Rosko, O. Chen, F. N. Castellano, K. G. Reyes, and M. Abolhasani, *Adv. Energy Mater.*, **14**, 2302303 (2024).
20. C. Liu, L. Lüer, V. M. L. Corre, K. Forberich, P. Weitz, T. Heumueller, X. Du, J. Wortmann, J. Zhang, J. Wagner, L. Ying, J. Hauch, N. Li, and C. J. Brabec, *Adv. Mater.*, **36**, 2300259 (2024).
21. J. Zhang, V. M. LeCorre, J. Wu, T. Du, T. Osterrieder, K. Zhang, H. Zhang, L. Lüer, J. Hauch, and C. J. Brabec, *Adv. Energy Mater.*, 2404957 (2025).
22. J. Wu, L. Torresi, M. Hu, P. Reiser, J. Zhang, J. S. Rocha-Ortiz, L. Wang, Z. Xie, K. Zhang, B.-w. Park, A. Barabash, Y. Zhao, J. Luo, Y. Wang, L. Lüer, L.-L. Deng, J. A. Hauch, D. M. Guldi, M. E. Pérez-Ojeda, S. I. Seok, P. Friederich, and C. J. Brabec, *Science*, **386**, 1256 (2024).
23. N. Meftahi, M. A. Surmiak, S. O. Füller, K. J. Rietwyk, J. Lu, S. R. Raga, C. Evans, M. Michalska, H. Deng, D. P. McMeekin, T. Alan, D. Vak, A. S. R. Chesman, A. J. Christofferson, D. A. Winkler, U. Bach, and S. P. Russo, *Adv. Energy Mater.*, **13**, 2203859 (2023).
24. J. Zhang, B. Liu, Z. Liu, J. Wu, S. Arnold, H. Shi, T. Osterrieder, J. A. Hauch, Z. Wu, J. Luo, J. Wagner, C. G. Berger, T. Stubhan, F. Schmitt, K. Zhang, M. Sytnyk, T. Heumueller, C. M. Sutter-Fella, I. M. Peters, Y. Zhao, and C. J. Brabec, *Adv. Energy Mater.*, **13**, 2302597 (2023).