

융합연구리뷰

Convergence Research Review



물리학의 혁신이 차세대 컴퓨터로 이어지다
양자 컴퓨터

—

전기가 흐르는 플라스틱, 세상을 바꾸어가다
전도성 폴리머

목차

융합연구리뷰 | Convergence Research Review
2016 June vol.2 no.6

03 편집자주

물리학의 혁신이 차세대 컴퓨터로 이어지다

04 (리뷰) 양자 컴퓨터

전기가 흐르는 플라스틱, 세상을 바꾸어가다

32 (리뷰) 전도성 고분자: 40년의 연구, 그리고 유기 전자 재료의 미래

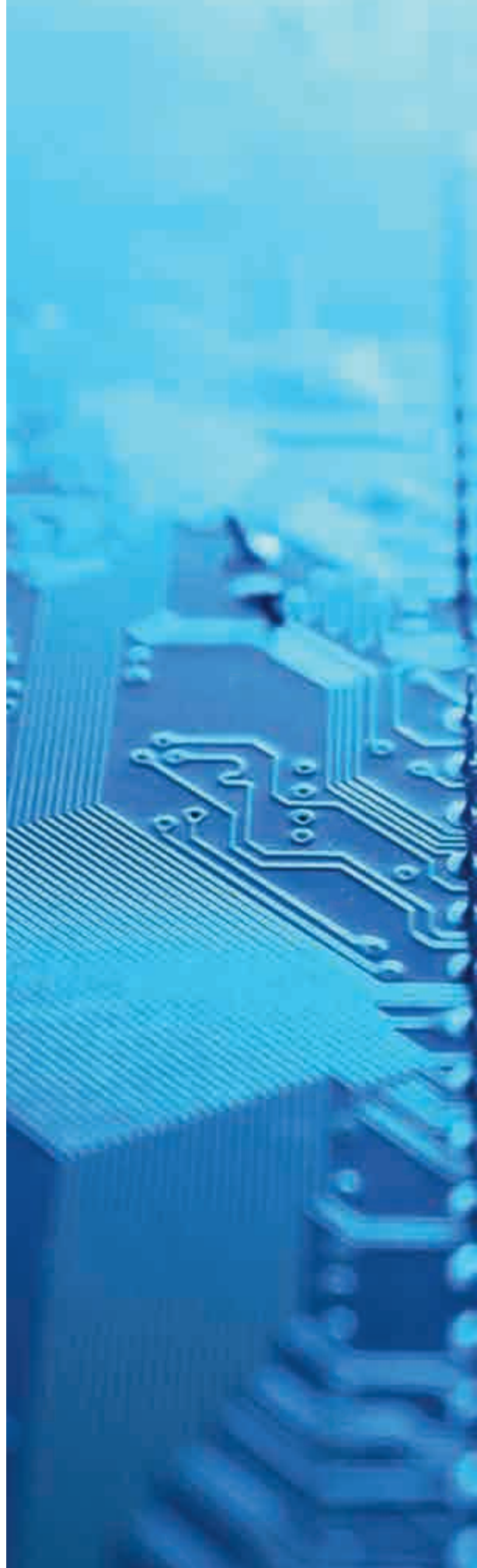


발행일 2016년 6월 7일

발행인 하성도

발행처 한국과학기술연구원 융합연구정책센터
02792 서울특별시 성북구 화랑로 14길 5
tel. 02-958-4984 | <http://crpc.kist.re.kr>

편집 (주)디자인플럼 tel. 051-202-9201



| 편집자주 |

물리학의 혁신이 차세대 컴퓨터로 이어지다 양자컴퓨터

20세기 최고의 과학적 성과 중에 하나로 꼽히는 양자역학은 전통적인 물리학의 개념을 완전히 뒤집으며 기초과학 연구의 새로운 장을 열었다. 양자역학이 학문적으로 자리를 잡아가면서 많은 이들은 양자역학을 활용하였을 때의 큰 사회적 변화들을 예측하였다. 양자컴퓨터가 그 대표적인 예로 개념적인 내용은 이미 1980년대에 정립되었다. 하지만 이를 구현할 수 있는 기술들은 21세기에 접어들어 서야 나노 기술을 비롯한 활발한 융합연구 하나 둘씩 개발되어가고 있다. 양자 컴퓨터는 기존의 디지털 컴퓨터와는 경쟁이 되지 않는 혁신적인 기술이기 때문에 향후 비대칭 기술 전력이 될 수 있는 만큼 선진국을 중심으로 많은 투자가 이루어지고 있으며 우리나라에서도 양자컴퓨터 개발을 위하여 R&D 사업을 추진 중에 있다.

이에 이번 호의 1부에서는 양자 컴퓨터의 기본적인 원리 및 연구개발 동향, 그리고 근본적인 양자컴퓨터 구현을 위해 극복해야 하는 한계점 등을 소개함으로써, 향후 과학기술 발전은 물론 산업분야의 비대칭 기술 전력으로 활용될 양자컴퓨터 개발을 위한 융합연구가 더욱더 활발히 이루어져, 현재 슈퍼컴퓨팅 분야에서 고전하고 있는 우리나라가 반전의 기회를 만들어 나갈 수 있기를 기대해 본다.

전기가 흐르는 플라스틱, 세상을 바꾸다 전도성 폴리머

19세기 말 최초로 등장한 합성 폴리머인 플라스틱은 그 등장만으로도 세상에 혁명을 가져왔다. 최초에는 당구공에 사용되던 상아를 대체하기 위해 개발되었던 플라스틱은 점점 생활 속 용품에 활용되던 금속, 세라믹 등의 소재들을 대체해 나갔고, 이제는 플라스틱이 없는 세상은 상상도 못하게 되었다. 이러한 플라스틱을 통한 생활의 혁명은 전기가 통하는 플라스틱의 개발로 새로운 전기가 마련되었다. 전도성 폴리머는 이미 유기 태양전지, OLED 등으로 이미 우리 생활에서 직접적으로 활용되는 제품으로도 마주할 수 있으며, 향후 이들을 활용한 응용제품은 과거의 플라스틱이 그러했던 또 한번 이 세상의 변화를 가져올 것이라 예상되고 있다.

이에 이번 호의 2부에서는 전도성 폴리머에 대한 개념 및 역사, 연구 동향, 현재의 기술적 한계 등에 대해 알아봄으로써, 이 세상에 많은 변화를 가져올 수 있는 전도성 폴리머의 기술 경쟁력 향상을 위한 새로운 융합연구가 활발히 이루어지고, 이를 바탕으로 전도성 폴리머를 통한 세상의 변화가 우리나라를 시작으로 이루어지기를 기대해 본다.

물리학의 혁신이 차세대 컴퓨터로 이어진다
양자 컴퓨터

QUANTUM COMPUTERS

양자 컴퓨터

• 듀크대학교 전기컴퓨터공학과 안병현 박사 (seyene@gmail.com)

서론

우리가 일상생활에서 사용하는 컴퓨터는 대략 수 GHz의 처리 속도를 갖는다. 그러나 CPU 제작공정의 한계로 인해 더는 빠른 속도의 CPU를 만드는 것이 쉽지 않게 되었다. 여러 개의 CPU를 연결하는 방법이나 아키텍처(architecture)를 개선하는 방법으로 컴퓨터의 속도는 꾸준히 증가해 왔지만, 이러한 방법도 곧 한계에 부딪힐 것이다. 좀 더 복잡한 문제, 좀 더 어려운 문제를 풀기 위해서는 많은 양의 계산이 필요한데, 여기에 빠른 컴퓨터는 큰 자원이 될 수 있다. 이런 이유로 최근에는 기업들도 고전적인 한계를 벗어날 수 있는 양자 컴퓨터의 개발에 참여하고 있다. 다른 기업보다 100배 빠른 컴퓨터를 보유하고 있다면, 경쟁에서 훨씬 유리한 위치에 올라설 수 있으니, 양자 컴퓨터에 관심을 가지는 것은 당연한 일 일 것이다. 본 글에서는 양자 컴퓨터의 역사, 양자 컴퓨터의 기본 원리와 알고리즘, 그리고 연구 동향을 살펴보고자 한다.

양자 컴퓨터의 시작

양자 컴퓨터는 1982년 리처드 파인만(R. Feynmann)의 제안으로 시작되었다¹. 당시 여러 가지 물리 계산을 위해서 많은 복잡한 계산이 필요하였는데, 트랜지스터를 기반으로 한 현대 컴퓨터로는 계산에 많은 시간이 필요하였다. 파인만은 양자계(quantum system)의 모사(simulation)를 위해서는 양자계 그 자체를 이용하는 것이 가장 효율적일 것이라는 생각을 하였다. 하지만 인텔과 IBM의 주도하에 눈부신 발전을 이룬 현대 컴퓨터와 비교하면, 양자 컴퓨터는 이론적인 제안에 머무르며 크게 관심을 끌지 못했다. 그 후 1994년 현재 사용되는 암호화 기술을 무용지물로 만들 수 있는 양자 알고리즘이 제안되면서², 다시 주목을 받기 시작했다. 또한, 나노 기술의 발달과 반도체, 레이저의 발전으로 양자 상태(quantum states)를 더 잘 제어(control)할 수 있게 되었고, 양자 컴퓨터의 구현에 한 걸음 더 다가가게 되었다.

양자 컴퓨터를 이해하기 위해서는 기본적으로 양자 역학에 대한 이해가 뒷받침되어야 한다. 하지만, 양자 역학까지 모두 다루는 것은 본문의 범위를 넘어서므로, 여기서는 양자 컴퓨터에서 중요한 양자 상태(quantum state)와 중첩(superposition), 양자 얽힘(entanglement)을 주로 다루도록 하겠다.

양자 컴퓨터의 기본 요소 | $\psi \rangle$

1) 양자 상태(quantum states)

상태라는 말의 사전적 정의를 보자.

· **상태** 어떤 사물이나 현상 따위가 일정한 때에 처해 있는 형편이나 모양
(The particular condition that someone or something is in at a specific time)

과학에서는 일반적으로 어떤 물리계(physical system)를 서술하는 방법이라고 볼 수 있다. 특별히 양자 상태는 양자계(quantum system)을 서술하기 위해서 사용되는 요소이다. 이를 특별히 구분하는 이유는 고전역학에서 다루는(거시세계를 다루는) 상태와 양자역학에서 다루는(미시세계를 다루는) 상태가 서로 다르게 기술되기 때문이다. 그래서 양자역학은 직관적으로 이해할 수 없다.

고전 컴퓨터^가에서는 0과 1로 이루어진 bit로 정보를 표현한다. 반면 양자 컴퓨터에서는 $|0\rangle$ 또는 $|1\rangle$ ^나로 이루어진 qubit(quantum bit)으로 정보를 표현한다. 고전 컴퓨터와 다른 점은 $|0\rangle + |1\rangle$ 과 같은 형태의 양자 상태가 존재한다는 것이다(디지털에서는 0과 1의 중간 상태 같은 것은 존재하지 않는다). 엄밀히 말해 $|0\rangle + |1\rangle$ 는 0.5와 같은 0과 1의 중간 상태를 의미하는 것도 아니다. 우리가 쉽게 상상할 수 있는 상태가 아니기 때문에 비유적으로 표현하기 어렵다. $|\psi\rangle$ 와 같은 양자 상태는 그림 1과 같은 구(bloch sphere) 위에 표시하기도 한다. 이 구면 위의 점은 $|0\rangle$ 와 $|1\rangle$ 뿐 아니라, $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ 와 같은 임의의 중첩 상태도 표현할 수 있다.

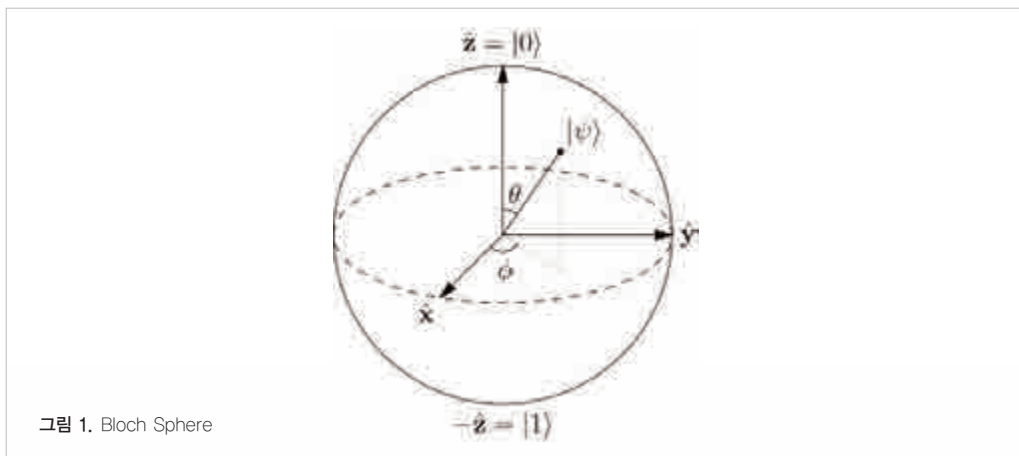


그림 1. Bloch Sphere

가 여기서 고전 컴퓨터란 현대 우리가 사용하는 컴퓨터를 일컫는 것으로 CPU를 가지는 폰 노이만식 컴퓨터를 말한다. 이러한 컴퓨터는 양자 역학의 도움 없이 모든 동작이 설명되므로 앞으로 고전 컴퓨터라 부르겠다.

나) 양자 상태는 일반적으로 $|\psi\rangle$ 이라는 기호로 나타낸다.

2) 양자 중첩(quantum superposition)

양자 중첩(superposition)은 서로 다른 2개 혹은 N개의 양자 상태들이 서로 조합된 상태를 말한다. 일반적으로 중첩된 상태 $|\psi\rangle$ 를 다음과 같이 나타낸다.

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$$

여기서 $|0\rangle$ 과 $|1\rangle$ 은 기본 양자 상태들이고, α 와 β 는 $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ 을 만족하는 값이다.

우리는 3차원 공간 안에서 살고 있다. 이는 내가 있는 곳의 위치를 표현하는데 3개의 변수가 필요하다라는 의미이다. 일반적으로 (x, y, z) 좌표로 표시한다. 또는 (r, θ, ϕ) 의 좌표로 표시할 수 있다. 현재 지구 상에 내가 있는 위치를 좌표로 표현할 때 (r, θ, ϕ) 의 좌표를 이용하여 표시한다. 지구 반지름에 비해 r 의 변화는 매우 미미하므로, (θ, ϕ) 만으로 표현하고, 이것을 위도, 경도라고 부른다. 다시 말해 2개의 변수로 현재 위치를 표현할 수 있다. 두 사람의 위치는 4개의 변수로 표현할 수 있고, 좀 더 확장하여 N명의 위치는 2N개의 변수로 표현할 수 있다. 사람의 위치에 비유하였지만, 데이터를 기술하는 고전적인 상태로 바꿔말하면, N개의 상태로 대략 $\sim 2N$ 차원을 표현할 수 있다는 의미이다.

이를 양자 상태로 바꿔 말하면 어떻게 될까? 다음과 같은 3개의 양자 상태를 보자.

$$|\psi_1\rangle = \alpha_1 |0\rangle + \beta_1 |1\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = \alpha_2 |0\rangle + \beta_2 |1\rangle$$

$$|\psi_3\rangle = \alpha_3 |0\rangle + \beta_3 |1\rangle$$

이 세 양자 상태의 중첩은 다음과 같이 표현된다.

$$|\psi\rangle = \alpha |000\rangle + \beta |001\rangle + \gamma |010\rangle + \delta |011\rangle + \varepsilon |100\rangle + \zeta |101\rangle + \eta |110\rangle + \theta |111\rangle$$

3개의 양자 상태로 8개의 변수가 표현되는 8차원을 기술할 수 있다. 즉 N개의 양자 상태로 2^N 차원을 표현할 수 있다.(엄밀히 말해 계수들 간의 의존성이 있고, 복소수로 기술되기 때문에 정확히 2^N 차원이라고 할 수는 없지만, N이 커지면, 예를 들어 $N > 20$ 이면, 그런 효과는 무시해도 될 정도로 작다)

3) 양자 얽힘 (quantum entanglement)

2개의 qubit $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ 가 서로 중첩된 상황을 생각해 보자.

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \alpha_1 |0\rangle + \beta_1 |1\rangle \\ |\psi_2\rangle &= \alpha_2 |0\rangle + \beta_2 |1\rangle \\ |\psi_1\psi_2\rangle &= \alpha_1\alpha_2 |00\rangle + \alpha_1\beta_2 |01\rangle + \beta_1\alpha_2 |10\rangle + \beta_1\beta_2 |11\rangle \end{aligned}$$

이와 같은 중첩은 두 qubit $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ 가 서로 독립적인 상태임을 보여준다. 하지만 다음과 같은 특별한 상황을 생각해 보자.

$$|\psi\rangle = \alpha |00\rangle + \beta |11\rangle$$

이 같은 경우를 2개의 qubit이 얽혀있다(entangle)고 표현한다. $|\psi_1\psi_2\rangle$ 의 차이는 1개의 qubit을 측정했을 때, 그 결과를 바탕으로 나머지 다른 하나의 qubit 상태를 알 수 있느냐의 여부다. $|\psi_1\psi_2\rangle$ 의 경우에는 첫 번째 qubit의 상태가 $|1\rangle$ 임을 측정하였다 하더라도 두 번째 qubit의 상태는 여전히 $|0\rangle + |1\rangle$ 의 중첩 상태로 남아있다. 첫 번째 qubit과 두 번째 qubit의 상태는 서로 독립인 것이다. 반면에 $|\psi\rangle$ 의 경우에는 첫 번째 qubit의 상태가 $|0\rangle$ 이면 두 번째 qubit의 상태는 측정하지 않아도 $|0\rangle$ 임을 알 수 있다. 첫 번째 qubit의 상태가 $|1\rangle$ 이면 두 번째 qubit의 상태는 $|1\rangle$ 이다. 이는 공간적으로 2개의 qubit이 서로 떨어져 있어도 성립한다. 이 부분에 대한 깊은 이해는 양자 역학의 local realism이라는 철학적인 개념과 관련이 있다³.

양자 컴퓨터에서는 이와 같은 양자 중첩과 양자 얽힘을 이용하여 양자 알고리즘을 설계하고, 고전 알고리즘으로는 불가능한 일들을 수행한다.

4) 양자 게이트(quantum gates)와 양자 회로(quantum circuit)

일반적인 논리 연산을 다루는 AND, OR 게이트 또는 NOT 게이트에 대해서 한 번씩은 들어보았을 것이다. AND 게이트는 2개의 boolean 입력을 받아 둘 다 1일 경우 1을 출력하고, 나머지 경우에 대해 0을 출력하는 게이트이다. NOT 게이트는 1개의 입력값을 받아 그 반대값을 출력한다. 현재 우리가 사용하고 있는 컴퓨터는 모두 이런 게이트들의 조합으로 연산을 하고 있다. 이론적으로 AND 게이트와 NOT 게이트만 있으면, 더하기, 빼기, 곱하기, 나누기 등 모든 연산을 구현할 수 있다. 이와 같은 게이트의 집합을 universal gate set이라고 한다. OR 게이트와 NOT 게이트 역시 이에 해당한다. 양자 컴퓨터에서도 비슷한 게이트들이 존재한다.

양자 상태의 행렬 표현

앞서 살펴본 $|0\rangle$ 또는 $|1\rangle$ 와 같은 양자 상태를 다음과 같은 행렬을 이용하여 표현할 수 있다.

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

이와 같은 표현을 이용하면, $\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ 와 같은 상태를

$$\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

로 나타낼 수 있다. 또한, 게이트들을 행렬로 표현할 수 있다는 장점이 있다.

Pauli 게이트

Pauli 게이트는 그림 1의 X, Y, Z 각각의 축으로 현재 양자 상태를 회전한 연산을 의미한다. 1개의 qubit에 작용하는 single qubit gate이다. 행렬로 표현하게 되면

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

와 같다. $|0\rangle$ 의 상태에 σ_x 의 연산을 행하게 되면, $|1\rangle$ 의 상태가 된다.

Phase shift 게이트

양자 상태를 표현할 때 사용했던 α, β 와 같은 계수들은 복소수(complex number)이다. 그래서 $e^{i\phi}$ 와 같은 phase 항을 갖는데, 이와 관련된 연산이 phase gate이다. 행렬 표현은,

$$R_\phi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

이다. $R_\pi = \sigma_z$ 임을 알 수 있다.

Hadamard 게이트

Pauli 게이트와 Phase shift 게이트의 조합으로 표현할 수도 있지만, 양자 회로에서 가장 많이 사용되는 게이트이기 때문에 따로 이름을 가진다. 행렬 표현은,

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x + \sigma_z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

와 같고, 일반적으로 기호 H로 나타낸다.

CNOT(Controlled NOT) 게이트

지금까지의 게이트들은 모두 하나의 qubit을 대상으로 하는 single qubit 게이트들이었다. CNOT 게이트는 2개의 qubit을 입력으로 받는 two qubit 게이트이다. 첫 번째 qubit의 상태에 따라 두 번째 qubit의 상태가 바뀌는 연산이다. 간단한 예를 들면,

$$\begin{aligned} |00\rangle &\mapsto |00\rangle \\ |01\rangle &\mapsto |01\rangle \\ |10\rangle &\mapsto |11\rangle \\ |11\rangle &\mapsto |10\rangle \end{aligned}$$

와 같다. 이를 행렬로 표현하면,

$$\text{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

와 같다. 2개의 입출력을 가지므로 4×4 행렬로 표현된다.

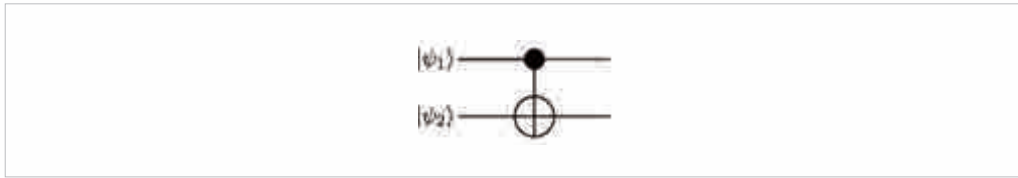


그림 2. 양자 회로에서의 CNOT 게이트

기호로는 그림 2와 같이 나타내며, 양자 회로를 구성하는데, 가장 중요한 게이트라고 볼 수 있다.

양자 회로

이 이외에도 3개의 qubit을 대상으로 하는 Toffoli gate 같은 것들이 있다. 하지만 지금까지 살펴본 single qubit 게이트들과 CNOT 게이트는 universal gate set을 이루므로, 이들로 임의의 양자 회로를 구성할 수 있다. 현재 single qubit 게이트들은 비교적 잘 구현되어 있고, 많은 연구자들이 신뢰도 높은 CNOT 게이트 구현을 위해 노력하고 있다. 그림 3은 고전 논리 회로와 양자 회로의 예를 보여준다.

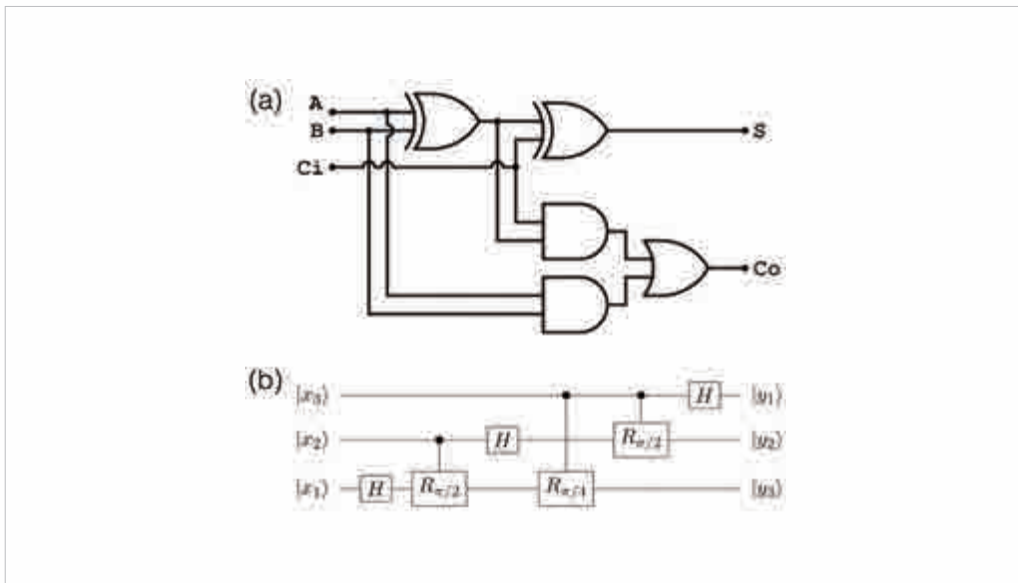


그림 3. (a) 고전 컴퓨터에서 사용되는 논리 회로의 예 (b) 양자 회로의 예

양자 알고리즘⁴

알고리즘이란 어떤 문제를 해결하는 일련의 순서 또는 방법을 말한다. 많은 양의 데이터에서 특정 데이터를 찾을 때, 또는 데이터들을 순서대로 정렬할 때, 우리는 알려진 알고리즘을 사용하여 문제를 해결한다. 이때 주어진 입력 데이터의 크기와 문제를 해결하는 데 걸리는 시간과의 관계를 시간 복잡도(time complexity)라고 부른다. 주어진 입력 데이터가 많다면 당연히 원하는 데이터를 찾는 데 많은 시간이 걸릴 것이다. 예를 들어, 100만 개의 데이터에서 내가 원하는 것을 찾는다면, 평균적으로 50만 번의 확인이 필요하다. 입력 데이터의 크기를 n 이라고 하면, 대략 $n/2$ 번의 확인이 필요한 것이다. 이를 시간 복잡도가 $O(n)$ 이라고 표현한다. n 의 계수와는 상관없이 주어진 입력의 크기와 문제 해결 시간의 함수 관계만 표시한다. 현재 일상적으로 사용되는 알고리즘들은 모두 고전 컴퓨터를 기반으로 구현되어 있다.

양자 알고리즘이란 양자 컴퓨터를 이용하여 사용할 수 있는 알고리즘을 말한다. 특별히 양자 컴퓨터의 특징을 사용하여, 일반 컴퓨터에서는 구현되지 않는 알고리즘을 가리킨다. Deutsch 알고리즘, Simon 알고리즘, Shor 알고리즘, Grover 알고리즘 등이 있다. 각각의 알고리즘은 양자 역학의 이해를 바탕으로 선형대수학을 사용하여 표현하는데, 이를 구체적으로 기술하는 것은 이 글의 범위를 넘어서므로, 여기서는 의미가 있는 몇 가지 양자 알고리즘을 고전 알고리즘과 비교하여 설명하도록 하겠다.

1) Deutsch's Algorithm⁵

이 알고리즘은 일반 컴퓨터에서는 구현되지 않는, 양자 컴퓨터를 이용하여 구현할 수 있는 첫 번째 양자 알고리즘이다. 다음과 같은 함수 f 를 생각해 보자.

$$f: \{0,1\} \mapsto \{0,1\}$$

이와 같은 함수 f 를 Boolean function이라고 부른다. 0과 1 대신 True, False를 사용해도 상관없다. 함수 f 는 모두 4가지 경우의 수밖에 없다. 4가지 함수를 모두 표현해 보면,

$$\begin{aligned} f_1(a) &= a \\ f_2(a) &= \text{not } a \\ f_3(a) &= 1 \\ f_4(a) &= 0 \end{aligned}$$

이다.

함수 f 는 입력 값을 그대로 반환하는 함수 f_1 , 입력 값과 반대의 값을 반환하는 함수 f_2 , 항상 1을 반환하는 함수 f_3 , 항상 0을 반환하는 f_4 중에 하나일 것이다. 그림으로 보면 좀 더 확실히 알 수 있다. (그림 4)

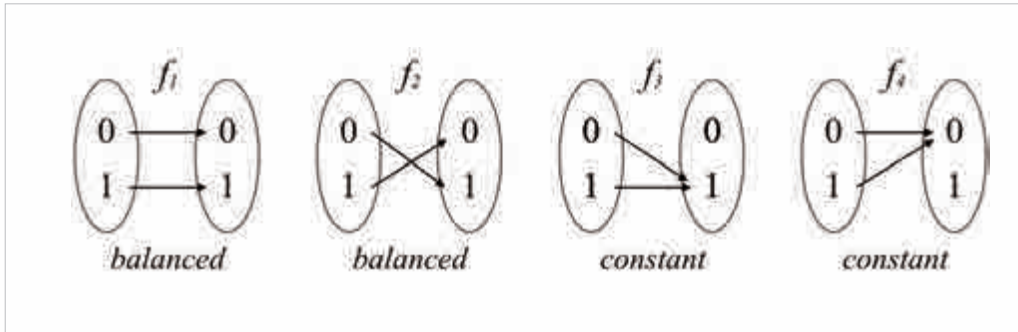


그림 4. 함수 $f:\{0,1\}\rightarrow\{0,1\}$ 의 4가지 경우의 수.

그림 4에서와같이 f_1, f_2 와 같은 함수를 *balanced function*이라고 하고, f_3, f_4 와 같은 함수를 *constant function*이라고 한다. 여기서 어떤 함수 f 가 *balanced function*인지, *constant function*인지 확인하려면 함수 f 를 몇 번 테스트해야 할까? $f(0)$ 의 값이 0이었다면, f_1 또는 f_4 중의 하나일 것이고, 1이었다면 f_2 또는 f_3 중의 하나일 것이다. 한 번의 테스트로 함수 f 가 *balanced*인지 *constant*인지 단정할 수 없다. $f(1)$ 의 값을 테스트한다 해도 마찬가지이다. 결국, 최소한 2번의 테스트를 거쳐야 함수 f 가 *balanced*인지 *constant*인지 확인할 수 있다. 이러한 알고리즘은 일반 컴퓨터를 기반으로 한 알고리즘이다.

Deutsch가 1985년에 제안한 양자 알고리즘⁵은 한 번의 테스트만으로 함수 f 가 *balanced function*인지 *constant function*인지 확인할 수 있다. 고전 컴퓨터에서 두 번 만에 알 수 있는 결과를 양자 알고리즘을 이용하여 한 번에 알 수 있다는 것이 그리 큰 장점이 아닐 수도 있다. 하지만, 이 알고리즘은 일반 컴퓨터로는 불가능한 일을 수행하는 첫 번째 알고리즘이라는 데에 그 의미가 있다. 이후 이 알고리즘은 더 큰 의미가 있는 Deutsch-Jozsa 알고리즘⁶으로 확장된다. Deutsch 알고리즘을 수행하는 양자 회로는 그림 5와 같이 구현된다. 회로 각각의 요소에 대한 설명보다는 한 번의 측정만으로 함수 f 의 특성을 확인할 수 있다는 점을 강조하고자 한다.

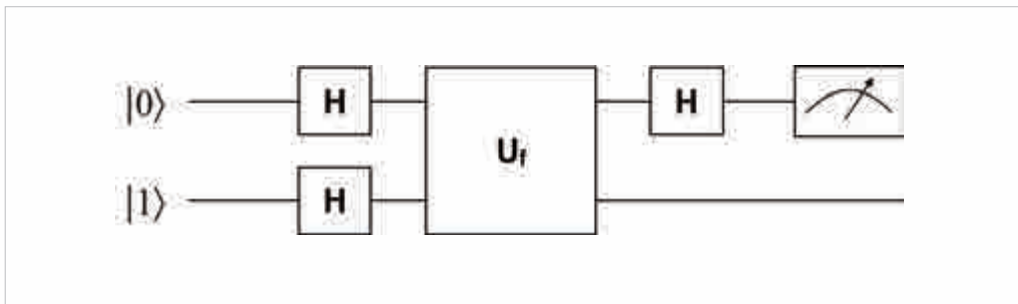


그림 5. Deutsch 알고리즘을 수행하는 양자 회로

2) Deutsch-Jozsa's Algorithm⁶

Deutsch 알고리즘이 좀 더 확장된 것이다. 다음과 같은 함수 f 를 생각해 보자.

$$f: \{0,1\}^n \rightarrow \{0,1\}$$

Deutsch 알고리즘의 경우와 달리 도메인이 n 차원으로 확장되었다. 함수 f 가 balanced인지 constant인지 확인하는 고전적인 알고리즘은 $O(2^n)$ 의 시간 복잡도를 갖는다. 즉 대략 2^n 번의 테스트를 거쳐야(실제로는 그보다 약간 작다) 함수 f 가 balanced인지 constant인지 확인할 수 있다. Deutsch-Jozsa의 양자 알고리즘은 한 번의 측정만으로 이를 확인할 수 있다. 시간 복잡도가 $O(1)$ 인 것이다. $n=30$ 이라고 가정하면, 일반 컴퓨터로는 10억 번의 테스트를 거쳐야 알 수 있는 사실을 양자 컴퓨터를 이용하면 1번의 테스트만으로 확인할 수 있다. 이는 양자 컴퓨터에서만 가능한 일이다. 이러한 테스트의 효율성이 실질적으로 잘 다가오지 않을 것이다. 그러면 일상생활에 큰 영향을 미칠 수 있는 알고리즘을 살펴보자.

3) Shor's Algorithm²

1980년대 리처드 파인만이 양자 현상을 이용한 양자 컴퓨터를 제안하였지만, 세상의 주목을 받지 못하였다. 하지만, P. Shor가 이 알고리즘을 1994년 학회에서 발표한 후, 양자 컴퓨터는 그 가능성을 인정받아 새로운 시대를 맞이하게 되었다. 현재 우리가 사용하고 있는 공개키 암호 체계는 모두 RSA(Rivest, Shamir, Adleman) 방식을 기반으로 한다. 이 암호체계는 암호 해독의 원천적 불가능(fundamentally safe)을 보장하는 것이 아니라, 계산불가능성(computational safe)에 기반을 둔다. 암호를 해독하는 것이 불가능한 것이 아니라, 단지 시간이 오래 걸릴 뿐이다. 하지만 정보라는 것은 일정 시간 이내에만 의미가 있으므로, 해독하는 데 100만 년이 걸리는 암호라면, 암호의 기능을 충분히 수행한다고 볼 수 있다.

RSA 방식은 아주 큰 수의 소인수분해에 많은 시간이 걸린다는 사실을 기반으로 한다. 두 소수(prime number) A 와 B 의 곱 $A \times B = C$ 를 계산하기는 쉽지만, C 를 소인수분해 하는 데에는 슈

퍼컴퓨터를 사용하더라도 아주 오랜 시간이 걸린다. n 자리 숫자의 소인수분해를 하는데 걸리는 시간 복잡도는 $O(2^{n^{1/3}(\log n)^{2/3}})$ 로 알려져 있다. 이보다 더 빠른 알고리즘이 존재하지 않는다는 것이 수학적으로 증명되지 않았기 때문에, 시간이 흐르면 더 빠른 알고리즘이 등장할 가능성은 있지만, 오랫동안 풀리지 않는 난제 중에 하나로 남아있다. 이 소인수분해 문제를 Shor가 제안한 양자 알고리즘으로 풀게 되면 시간복잡도가 $O(n^3)$ 가 되게 된다. 고전 알고리즘보다 획기적으로 빠른 속도이다. 비교를 위해 자릿수에 따라 소인수분해에 걸리는 시간을 표현한 그림 6을 보자.

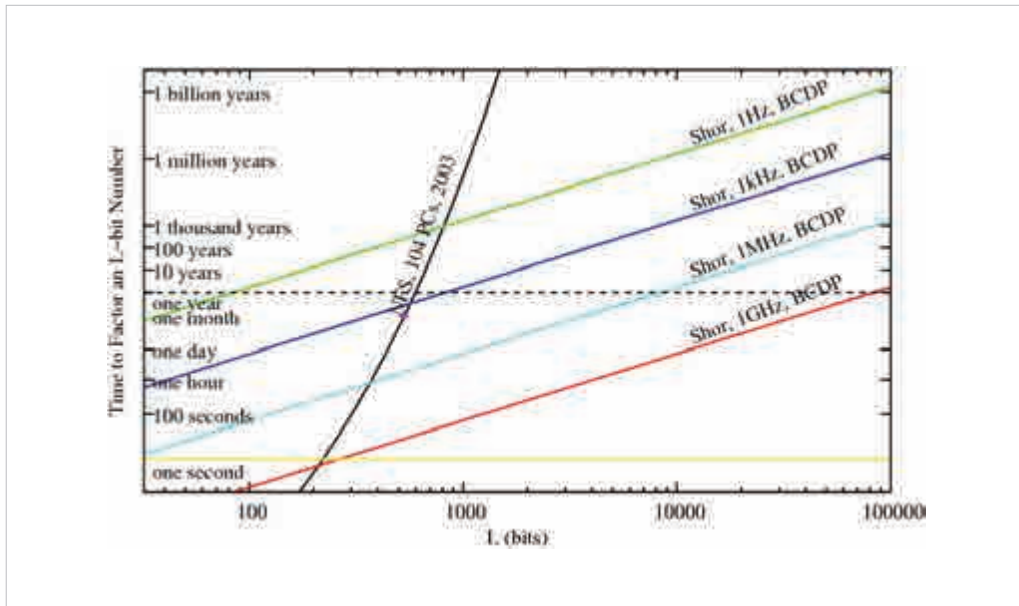


그림 6. 고전 알고리즘을 이용한 방법과 양자 알고리즘을 이용한 소인수 분해의 시간 복잡도

대략 1,024bit의 숫자를 소인수 분해를 하는 데에는 2003년의 104대 컴퓨터로 약 100만 년의 시간이 걸린다. 2016년 현재 컴퓨터가 무어의 법칙에 따라 대략 20배 빨라졌고, 500대의 컴퓨터를 사용한다고 가정하면, 만 년의 시간이 필요하다. 최근 많이 사용되는 숫자 길이 2,048bit

를 가정하면, 아무리 빠른 슈퍼컴퓨터를 사용하더라도, 100만 년의 시간은 기본이라고 볼 수 있다. 하지만, 1MHz의 속도를 갖는 양자 컴퓨터에 Shor 알고리즘을 적용하면, 한 달 안에 소인수 분해를 끝낼 수 있다. 이는 한 달 안에 현재 쓰이는 암호를 해독할 수 있다는 의미이다. 더욱이 이 결과는 양자 컴퓨터의 BCDP 아키텍처를 기반으로 한 것인데, 보다 개선된 형태인 D, AC 아키텍처를 사용하면 같은 계산을 1초 안에 끝낼 수 있다. 이 정도면 자릿수를 늘리는 방식으로 보안을 유지할 수 없게 된다. 다행히 이와 같은 성능의 양자 컴퓨터는 아직 등장하지 않았기 때문에, 아직은 안전하게 RSA를 기반으로 한 암호시스템을 사용할 수 있다.

그러면 이러한 양자 알고리즘은 일반 컴퓨터를 기반으로 한 알고리즘과 어떤 차이가 있는 걸까? 고전적인 알고리즘의 경우에는 소인수 분해를 위해 모든 수의 곱을 하나씩 탐색해야 한다. 하지만 양자 알고리즘의 경우에는 중첩의 특성을 이용하여, 한 번에 많은 숫자의 특성을 파악할 수 있다. Deutsch-Jozsa 알고리즘에서 보았듯이 고전 알고리즘에서 여러 번 해야 하는 일을 양자 알고리즘에서는 한 번의 테스트로 확인할 수 있는 특성을 이용하는 것이다. 이를 양자 병렬성(quantum parallelism)이라고 부른다.

4) Grover's Algorithm⁸

1996년에 발표된 이 양자 알고리즘은 Shor 알고리즘과 함께 가장 대표적인 양자 알고리즘이다. 기본적인 검색 알고리즘으로, 고전 알고리즘에서 $O(n)$ 의 검색 시간복잡도를 $O(\sqrt{n})$ 로 줄인다. 100만 건의 데이터 중에 우리가 원하는 정보를 찾기 위해서는 평균적으로 50만 번의 검색이 필요하지만, 양자 알고리즘으로는 대략 1000번 만에 원하는 정보를 찾을 수 있다. 이 역시 양자 병렬성을 기반으로 동작하는 알고리즘이다.

양자 컴퓨터의 연구 동향

1) 다양한 양자 컴퓨터의 구현 방법

지금까지 살펴본 양자 컴퓨터를 구현하기 위해서는 $|0\rangle$ 와 $|1\rangle$ 을 표현하는 양자 상태와, 이를 조절할 수 있는 도구들만 있으면 된다. 원자핵의 스핀을 양자 상태로 이용하는 NMR 방법⁹, 원자 또는 이온의 에너지 상태를 이용하는 방법¹⁰, Josephson junction을 이용한 초전도 방법¹¹, 단일 광자의 편광을 이용하는 방법¹², 양자점의 전자 스핀을 이용하는 방법¹³, 다이아몬드의 NV center를 이용하는 방법¹⁴ 등 많은 구현 방식들이 존재한다. 각각의 장단점이 있지만, 모두 $|0\rangle$ 과 $|1\rangle$ 의 양자 상태를 조작하고 측정하는 방식으로 기본적인 원리는 모두 같다.

NMR을 이용한 방법⁹

2000년대 초반 가장 많이 이용된 방법 중 하나다. 핵자기공명(NMR)을 이용하여 원자핵의 스핀을 매우 정확하게 조절하며 측정할 수 있었고, 여러 qubit으로 구성된 양자 회로의 구성에도 성공하였다. 작은 숫자의 소인수분해에도 성공하였지만, 더 이상 qubit의 개수를 늘리는 것이 불가능하여 지금은 많이 연구되고 있지 않다.

이온의 에너지 상태를 이용하는 방법^{10, 15-17}

하나의 이온을 전기적 potential well에 가두어 놓고, 레이저를 이용하여 게이트 연산과 측정을 한다. 이온이 전하를 띠고 있기 때문에 원자를 이용하는 방법보다 상대적으로 가두기(trapping) 쉽지만, 전기적 잡음(electrical noise)과 발열(thermal noise)로 인한 단점이 있다. 하지만 qubit의 수를 크게 늘릴 수 있으므로 최근에 많이 연구되는 방법 중 하나다. 그림 7은 이온을 트랩 할 수 있는 장치 사진이다.

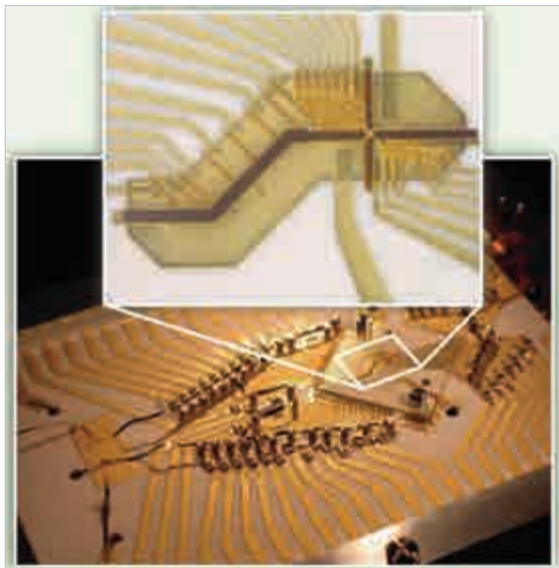


그림 7. 이온 트랩을 이용한 양자 컴퓨터⁸

Josephson junction을 이용한 초전도 방법^{11, 19-21}

이온 트랩을 이용한 방법과 함께 가장 많이 연구되는 방법 중 하나다. Josephson junction의 비선형성(non-linearity)을 이용하여 qubit을 만드는 방법으로, 전하(charge)를 이용하거나, 플럭스(flux)를 이용하여 양자 상태를 표현한다. 매우 낮은 온도의 초전도 상태에서 전하의 행동을 전압과 전류를 통해 제어하고 측정한다. 나노 제작 기술(nano fabrication technology)의 도움으로 매우 작은 회로들을 제작할 수 있게 되면서 발달하게 되었고, 결맞음(coherence) 유지에 큰 장점을 가지고 있다. 그림 8은 이를 구성하는 부분의 사진이다.

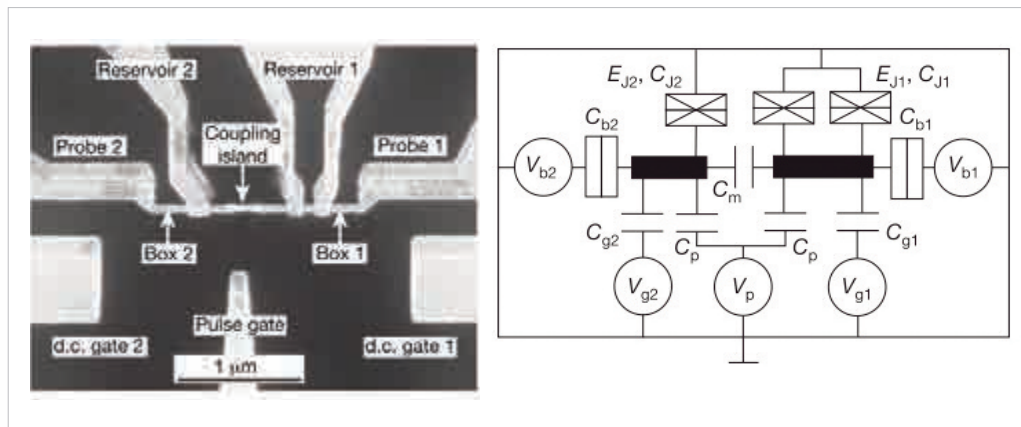


그림 8. Superconducting을 이용한 양자 컴퓨터⁹

양자점을 이용한 방법

양자점을 이용한 방법은 양자 컴퓨터의 소형화를 이룰 수 있다는 장점이 있다. 다른 방법들은 qubit의 개수가 늘어날수록 물리적인 크기가 매우 커질 수밖에 없는데, 양자점을 이용한 방법은 지금의 소형 CPU와 같이 양자 회로를 집적할 수 있는 특성을 갖고 있다¹³. 또한, 양자 상태를 멀리 전달하기 위해서는 빛을 이용해야 하는데, 단일 광자를 이용하는 방법은 이에 큰 장점을 갖는다². 다른 양자 상태와 광자의 양자 상태를 서로 변환하는 과정이 쉽지 않기 때문에, 광자의 양자 상태를 그대로 양자 컴퓨터에 응용하는 것 역시 좋은 방법이다.

2) 양자 컴퓨터 구현의 어려움

그러면 현재 많은 연구자들이 겪고 있는 공통적인 어려움을 살펴보자.

1. 신뢰성(fidelity) 유지: 양자 회로를 구성하기 위해서는 초기 상태(initial state)를 매우 잘 정의해야 한다. 원하는 계산의 입력값이 정확해야 출력값을 예상할 수 있다. 일반적으로 초기 상태를 $|0\rangle$ 로 정의하는데, 다른 상태들은 이 초기 상태로부터 게이트 연산을 통해 만들 수 있다. 어떤 양자 상태 $|\psi\rangle$ 가 그 상태를 유지하는 정도를 coherence라고 부른다. 원하는 연산이 끝날 때까지 양자 상태의 coherence를 유지하는 일은 매우 중요하다. 하지만 양자 상태는 주변 환경과 항상 영향을 주고받기 때문에 coherence를 유지하는 일이 쉽지 않다. 대부분의 양자 컴퓨터 구현이 저온에서 연구되는 이유가 여기에 있다. 또한, 우리가 사용하는 single qubit 게이트나 CNOT과 같은 two qubit 게이트의 정확성도 중요하다. 현재 사용하는 single qubit 게이트의 정확도가 99.9%라면, 100개의 연산을 거치면, 정확도가 90%가 된다. 1+1과 같은 연산을 하는데, 10%의 확률로 오류가 발생한다면, 실생활에 응용하기에는 어려움이 따른다. 이처럼 주어진 초기 상태와 게이트 정확성을 고려한 구현의 정확도를 신뢰성(Fidelity)이라고 부른다. 고전 컴퓨터에서는 1이 0.9가 되어도 1로 해석하기 때문에 큰 문제가 없다(이것이 디지털의 장점이다). 그럼에도 불구하고 고전 컴퓨터는 $10^{-16}\sim 10^{-20}$ 의 확률로 오류가 발생한다. 반면 현재 양자 컴퓨터의 오류율은 약 $10^{-3}\sim 10^{-5}$ 정도이다²²⁻²³.

2. 에러 보정(error correction): 고전 컴퓨터에서도 에러가 발생한다. 그래서 에러를 보정하기 위한 여러 방법들을 사용한다. 예를 들면, 8bit의 여유 공간이 있을 때, 7bit는 정보 표현에 사용하고, 나머지 1bit는 정보의 유효성을 검증하는 데 사용하는 식이다. 이 경우 1bit의 추가 bit를 사용하여 정보의 신뢰성을 높이는 것이다. 서버에 사용되는 CPU나 RAM의 경우 이와 같은 에러 보정 알고리즘이 사용된다. 양자 컴퓨터에서는 에러율이 비교적 높기 때문에 많은 수의 qubit이 추가로 에러 보정에 사용된다. 모두 양자 상태의 decoherence나 양자 게이트의 오류를 보정하기 위해 사용되는 것이다. 현재 이를 위해 여러 가지 보정 알고리즘이 연구되고 있다.

3. 확장성(scalability): 실질적인 응용이 가능한 양자 컴퓨터를 만들기 위해서는 40~50개의 qubit이 필요하다. 2~3개의 qubit으로 연산에 성공하였다 하더라도, qubit 개수를 늘리는데 제한이 있다면, 양자 컴퓨터의 구현에 어려움이 따른다. NMR로 구현된 양자 컴퓨터가 이에 해당한다고 볼 수 있다.

4. 학문의 융합: 고전 컴퓨터의 구성을 보면, CPU, RAM, 저장장치와 같은 하드웨어가 있고, 이 하드웨어 위에 운영체제(OS)라는 소프트웨어가 있으며, 그 둘 사이에는 장치 드라이버(device driver)가 서로를 연결하고 있다. 운영체제 위에서는 각종 어플리케이션(application)들이 실행되며 임무를 수행한다. 양자 컴퓨터도 비슷한 구성을 가진다. 양자 상태를 구현하는 하드웨어가 있고, 그 하드웨어와 운영체제를 연결하는 장치 드라이버 같은 존재가 있어야 하고, 운영체제와 실제 양자 알고리즘을 수행할 수 있는 어플리케이션이 있어야 한다. 이와 같은 구성을 이루기 위해서는 양자 역학의 이해를 바탕으로 수학, 물리학, 컴퓨터과학, 전자공학, 재료공학 등의 지식이 총체적으로 필요하다. 한 사람 또는 한 그룹이 이 지식을 모두 소유할 수는 없으며, 여러 그룹과의 협업으로만이 양자 컴퓨터의 구현이 가능하다. 2개의 qubit으로 CNOT 게이트를 구현하는 것은 한 그룹이 연구할 수 있지만(이것도 쉬운 일은 아니다) 실질적으로 동작하는 양자 컴퓨터의 구현을 위해서는 많은 그룹이 함께 연구하는 방식이 반드시 필요하다.

이러한 공통적인 어려움 외에 각 구현 방법마다 가지고 있는 어려움들도 있다. 사용하는 qubit과 양자 게이트의 구현 방식이 모두 다르기 때문에 극복해야하는 기술적인 어려움도 다를 수밖에 없다.

현재 qubit의 제어와 양자 게이트의 신뢰도를 고려했을 때 가장 실용적, 또는 가장 먼저 양자 컴퓨터를 구현할 수 있는 것으로 기대되는 방식은 이온 트랩을 이용한 방식과 초전도를 이용한 방식이다. 넓은 범주에서 이 두가지 방식이 가장 앞서고 있고, 나머지 방식들은 2세대 양자 컴퓨터 구현으로서의 가능성이 있다. 이 범주 안에서도 구체적인 구현 방식에 따라 극복해야 할 문제가 모두 다르다.

예를 들면, 이온 트랩의 경우, 어떤 종류의 이온을 트랩하여 qubit으로 사용하느냐에 따라 문제가 다르다. 주로 Yb, Ca, Sr, Ba 등등의 이온들이 사용되는데, 각각의 이온이 모두 장단점이 있다. 모든 면에서 이 이온이 최고다라고 할 수 있는 이온은 없다. 어떤 이온은 자기장에 민감하게 반응하기도 하고(이 경우는 자기장 밀폐에 큰 노력을 들여야 한다), 어떤 이온은 가시광선(파장 400nm~700nm) 영역의 레이저로 제어할 수 있지만, 자외선(파장 400nm 이하) 영역의 레이저가 필요한 경우도 있다. 가시광선으로 제어 및 측정을 하게 되면, 현재 상용화된 광학 기

기를 사용할 수 있기도 하고, 비선형 현상을 이용하여 적외선 영역(광통신에서 사용하는 파장)으로 변환해 현존하는 통신시스템으로 전송이 가능하기도 하다. 자외선으로 제어하는 경우는 초기 상태 준비, 게이트 연산, 마지막 상태 측정의 과정에서 신뢰도가 높은 편이다. 자외선을 이용해야 하는 경우에는 관련 광학 장치들(레이저, 렌즈, 거울, 검출기 등등)을 대부분 자체 개발해야 한다. 가시광선이나 적외선에 비해 일반적인 수요가 많지 않고 산업에서 많이 쓰이지 않기 때문에, 정밀 실험에 사용할 수 있는 상용 제품의 고효율 광학 기기들이 없다. 자외선 영역에서의 초고반사 거울을 위해서는 고수준의 코팅 기술이 필요하고(설계는 실험실에서 직접 하지만, 제작을 위해서는 코팅 전문 회사가 있어야 한다), 자외선 레이저와 제어 장치, 검출기 제작 역시 자체 개발이 필요하다. Yb+ 이온의 경우 369.5261 nm 파장의 레이저가 필요하다. 소수점 모두 유효숫자(일반적으로 MHz 단위로 표현한다)임을 감안한다면 아주 중요한 레이저 안정화 및 제어 기술도 개발해야 한다. 어떤 부분은 재료 공학과 맞닿아 있고, 전자 공학과 맞닿아 있는 부분도 있으며, 산업 현장의 도움이 필요한 부분도 있다. 이렇게 각 분야의 최첨단 기술의 집약과 관련 산업과의 협업이 있어야만 양자 컴퓨터라는 완제품을 볼 수 있다.

이온 트랩을 어떤 방식(Paul trap, Surface trap 등)으로 구현하느냐에 따른 장단점들도 있다. 잡음에 강한 방식, 측정 효율에 강한 방식, 확장성에 강점을 가지는 방식 등 여러 가지 방식들이 존재한다. 이처럼 이온 트랩의 한 가지 구현 방식에도 여러 세부 기술들이 있고, 각각이 다른 어려움을 가지고 있다. 전세계(선진국 몇 개의 국가들 뿐이지만)의 연구자들은 주기적으로 모여 각각의 구현 방식에 대한 기술 발전과 문제 해결 방법들을 서로 공유한다.

지금까지 양자 컴퓨터의 하드웨어 측면을 살펴보았다면, 에러 보정(error correction)은 소프트웨어적 접근이다. 하드웨어에서 발생할 수 있는 오류를 소프트웨어적 접근을 통해 보정하는 기술로, 컴퓨터 과학과 수학의 도움이 필요하다. 하드웨어를 제작하는 입장에서는 사용할 수 있는 qubit의 개수를 계속해서 늘리는 확장성(scalability)의 작업을 하고 있고, 소프트웨어를 연구하는 입장에서는 적은 수의 qubit으로 효율적인 에러 보정을 할 수 있는 알고리즘을 계속 개발 중이다. 이 양쪽의 접근이 만나는 지점에서 실용적인 양자 컴퓨터가 탄생할 것이다.

양자 컴퓨터와 미래 사회

양자 컴퓨터는 언제쯤 완성될 것인가? 많은 사람들이 궁금해하는 내용이다. 하지만 벌써 양자 컴퓨터를 상업용으로 파는 회사로 D-Wave²⁴가 있다(그림 9). 이를 구매한 고객들의 명단을 보면, 구글, NASA, 록히드 마틴, Los Alamos 연구소로 아주 굵직한 회사 또는 연구소들이다. 구글은 일반컴퓨터보다 1억 배 빠르다는 양자 컴퓨터를 공식 발표까지 하였다²⁵. 그러면 이것은 지금까지 논의한 양자 컴퓨터 구현의 어려움을 모두 극복한 것일까? 이와 관련된 내용을 살펴보자.

먼저 이 상황을 이해하기 위해서는 양자 컴퓨터의 정의부터 살펴보아야 한다. 전통적으로 양자 컴퓨터를 연구하는 사람들은 DiVincenzo의 요건을 기준으로 양자 컴퓨터를 정의한다²⁶. 이 요건은,

1. qubit의 개수를 늘릴 수 있도록 확장 가능해야 한다.
2. 초기 상태(initial state)를 잘 정의할 수 있어야 한다.
3. 필요한 양자 게이트를 구현할 수 있어야 한다.
4. 양자 상태의 coherence를 유지해야 한다.
5. 마지막 결과를 측정할 수 있어야 한다.

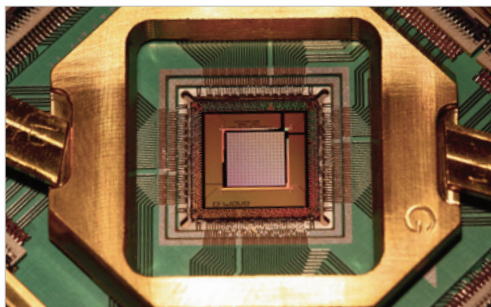


그림 9. D-Wave의 양자 컴퓨터²⁴

이다. 모두 지금까지 다루었던 내용들이다. 한마디로 요약하면, 양자 컴퓨터란 양자 게이트를 이용하여 연산한 결과를 측정할 수 있는 신뢰성 있는 컴퓨터라고 볼 수 있다. 양자 컴퓨터를 연구하는 대부분의 연구자들은 이 기준에 따라 <양자 컴퓨터>라는 용어를 사용한다.

하지만 D-Wave라는 회사의 양자 컴퓨터의 정의는 조금 다르다. 양자 상태를 이용한 연산이면 양자 컴퓨터라는 정의를 사용한다. 양자 게이트에 관한 부분이 없다. 맞고 틀리고를 논할 수 있는 성격의 것은 아니지만, 비전문가들이 들을 때는 많은 혼동을 느낄 수 있다. 전통적인 양자 컴퓨터 연구자들은 D-Wave의 장치를 양자 어닐러(quantum annealer)라고 부른다²⁷. 이 장치들은 양자 게이트 연산을 하지는 않지만, 양자 상태를 이용해서 특정 문제를 풀 수 있다. 특별히 복잡한 함수의 최소값 또는 최대값을 구하는데 큰 성능을 보일 것으로 기대되며, 구글이 이를 테스트하여 1개의 CPU를 가지는 컴퓨터보다 1억 배 빠른 연산을 검증하였다고 발표했다

다.²⁸(구글의 논문은 2016년 4월 현재 리뷰 중이다) 하지만 이 양자 어닐러는 1개의 CPU를 가지는 컴퓨터보다 약 100만 배 비싸고, 비슷한 수준의 계산은 지금의 슈퍼컴퓨터로도 가능하기 때문에 큰 의미를 갖지는 못한다는 발표도 있다²⁹. 그럼에도 곧 슈퍼컴퓨터의 성능을 넘어서는 결과를 보여줄 것으로 예측되기 때문에 큰 회사와 연구소들이 많은 돈을 들여 연구하고 있다. 덧붙여 최대최소값을 구하는 문제는 머신러닝(machine learning) 문제의 핵심이기 때문에 많은 회사들이 연구하고 있는 분야이다.

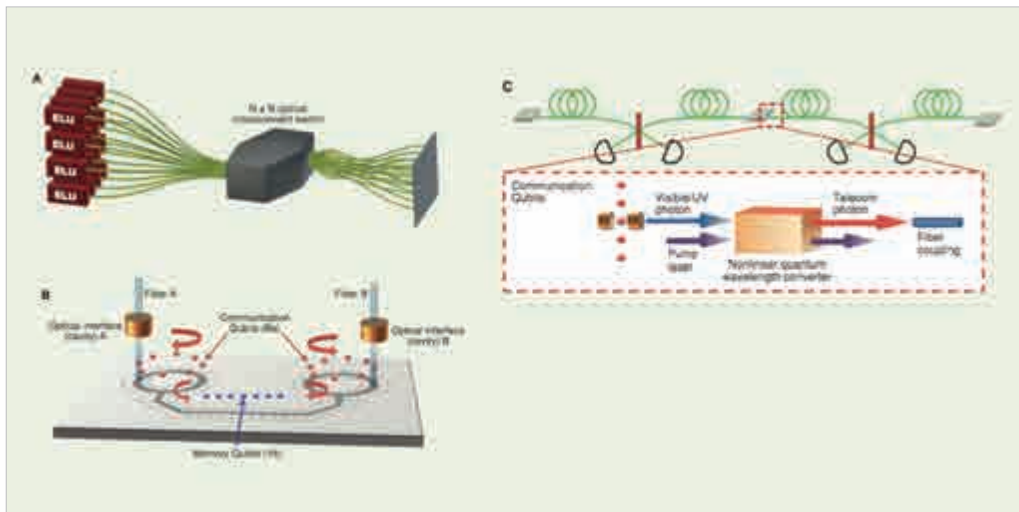


그림 10. 양자 기술로 구현되는 양자 정보 장치들²⁸

양자 컴퓨터의 등장은 현대 사회의 보안에 큰 위협이 될 수 있다. 하지만 그 전에 양자 암호를 이용한 양자 통신 기술이 발달할 것이기 때문에 큰 사회적 혼란은 없을 것으로 생각한다. 양자 통신이 보급되기 위해서는 중간에 신호를 증폭할 수 있는 양자 리피터(quantum repeater)라는 장치가 필요한데³⁰, 이는 아주 작은 버전의 양자 컴퓨터라고 볼 수도 있다. 양자 통신이 보급되면, 양자 상태를 전송할 수 있는 양자 전송(quantum teleportation) 기술도 발달할 것이다³¹.

이처럼 양자 기술(quantum technology)을 기반으로 한 여러 장치들은 미래 사회의 모습을 많이 바꾸어 놓을 수도 있다. 그러나 현대의 디지털 기술보다 양자 기술의 국가 간 격차는 더 심해질 것이다. 양자 컴퓨터를 가장 먼저 개발한 국가는 다른 모든 국가의 공개키 암호를 해독할 수 있게 되고, 이는 국가 안보에 큰 위협이 될 수 있다. 여러 선진국들이 천문학적인 돈을 양자 컴퓨터 연구에 투자하는 이유가 거기에 있다.

결론

지금까지 양자 컴퓨터의 기본 원리와 알고리즘, 그리고 양자 컴퓨터의 다양한 구현 방법과 그에 따른 어려움에 대해 살펴보았다. 실질적인 양자 컴퓨터의 개발을 위해서는 기초 과학과 응용과학이 잘 융합되어야 하며, 많은 인력과 연구비의 투자가 필요하다. 투자 대비 성과가 다른 분야에 비해 크지 않기 때문에 소수의 선진국만이 연구를 진행하고 있고, 그 이외의 국가들은 양자정보 기술 연구에 많이 뒤쳐져 있는 실정이다.

양자 컴퓨터의 개발은 우주 기술의 개발과 비슷하다. 천문학적인 돈이 투입되지만, 당장 눈에 보이는 결과를 얻기는 힘들다. 또한 여러 분야의 광범위한 지식이 필요하기도 하며, 각 분야의 지식 공유가 필수적이다. 그리고 국가들 간의 기술 격차는 매우 크고 그 기술은 공유되지 않을 것이다. 47년 전 미국이 달에 갔다고 해서, 우리가 지금 달에 갈 수 있는 기술을 보유한 것은 아니다. 지금부터 개발을 시작한다 해도(시작한 것으로 알고 있다) 많은 돈과 시간과 노력이 들어갈 것이고, 그 과정 중간에 눈에 보이는 성과(논문)를 내는 것은 쉽지 않을 것이다. 한국의 양자 컴퓨터의 연구는 아직 미흡한 상황인데, 학제 간 융합을 통해 주도적인 연구를 수행하는 날이 오기를 기대해 본다.



안병현

Ahn, Byeong-Hyeon

학 력

- KASIT 물리학과 박사
- KASIT 물리학과 학사

경 력

- 現) Duke University 전기컴퓨터공학과 박사후 연구원

참고문헌

1. Feynman, Richard, "Simulating Physics with Computers," *International Journal of Theoretical Physics* 21 (6-7), 467-488 (1982)
2. Peter W. Shor, "Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring," *Proceedings of the 35th IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*, pp. 124-134 (1994)
3. 김상욱, 정보의 물리, *융합연구리뷰* Vol 1, No 1 (2015)
4. M. A. Nielsen, I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000)
5. David Deutsch, "Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer," *Proceedings of the Royal Society of London A* 400, 97 (1985)
6. David Deutsch and Richard Jozsa, "Rapid solutions of problems by quantum computation," *Proceedings of the Royal Society of London A* 439, 553 (1992)
7. Rodney Van Meter, Kohei M. Itoh, and Thaddeus D. Ladd, "Architecture-Dependent Execution Time of Shor's Algorithm," *arXiv:quant-ph/0507023*
8. Lov K. Grover, "A fast quantum mechanical algorithm for database search," *Proceedings of the Twenty-Eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, pp. 212-219 (1996)
9. L. M. K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood, and I. L. Chuang, "Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance," *Nature* 414, 883-887 (2001)
10. D. Kielpinski, C. Monroe, D. J. Wineland, Architecture for a large-scale ion-trap quantum computer. *Nature*. 417, 709-711 (2002)
11. L. DiCarlo, J. M. Chow, J. M. Gambetta, L. S. Bishop, B. R. Johnson, D. I. Schuster, J. Majer, A. Blais, L. Frunzio, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, "Demonstration of two-qubit algorithms with a superconducting quantum processor," *Nature* 460, 240-244 (2009)

참고문헌

12. E. Martín-López, A. Laing, T. Lawson, R. Alvarez, X.-Q. Zhou, and J. L. O'Brien, "Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using qubit recycling," *Nature Photon.* 6, 773-776 (2012)
 13. D. Press, T. D. Ladd, B. Zhang, and Y. Yamamoto, "Complete quantum control of a single quantum dot spin using ultrafast optical pulses," *Nature* 456, 218-221 (2008)
 14. P. Neumann, N. Mizuochi, F. Rempp, P. Hemmer, H. Watanabe, S. Yamasaki, V. Jacques, T. Gaebel, F. Jelezko, and J. Wrachtrup, "Multipartite Entanglement Among Single Spins in Diamond," *Science* 320, 1326-1329 (2008)
 15. R. Blatt, D. Wineland, Entangled states of trapped atomic ions. *Nature.* 453, 1008-1015 (2008)
 16. J. D. Jost, J. P. Home, J. M. Amini, D. Hanneke, R. Ozeri, C. Langer, J. J. Bollinger, D. Leibfried, and D. J. Wineland, "Entangled mechanical oscillators," *Nature* 459, 683-685 (2009)
 17. K. R. Brown, C. Ospelkaus, Y. Colombe, A. C. Wilson, D. Leibfried, and D. J. Wineland, "Coupled quantized mechanical oscillators," *Nature* 471, 196-199 (2011)
 18. C. Monroe and J. Kim, "Scaling the Ion Trap Quantum Processor," *Science* 339, 1164-1169 (2013)
 19. Y. A. Pashkin, T. Yamamoto, O. Astafiev, Y. Nakamura, D. V. Averin, and J. S. Tsai, "Quantum oscillations in two coupled charge qubits," *Nature* 421, 823-826 (2003)
 20. A. J. Berkley, "Entangled Macroscopic Quantum States in Two Superconducting Qubits," *Science* 300, 1548-1550 (2003)
 21. I. Chiorescu, P. Bertet, K. Semba, Y. Nakamura, C. J. P. M. Harmans, and J. E. Mooij, "Coherent dynamics of a flux qubit coupled to a harmonic oscillator," *Nature* 431, 159-162 (2004)
 22. R. Noek, G. Vrijsen, D. Gaultney, E. Mount, T. Kim, P. Maunz, and J. Kim, "High speed, high fidelity detection of an atomic hyperfine qubit," *Opt. Lett.* 38, 4735 (2013)
-

-
23. J. Benhelm, G. Kirchmair, C. F. Roos, and R. Blatt, "Towards fault-tolerant quantum computing with trapped ions," *Nature Phys.* 4, 463-466 (2008)
 24. D-Wave, <http://www.dwavesys.com/>
 25. <http://googleresearch.blogspot.ca/2015/12/when-can-quantum-annealing-win.html>
 26. D. Loss and D. P. DiVincenzo, "Quantum computation with quantum dots", *Phys. Rev. A* 57, p120 (1998)
 27. M. W. Johnson et al., "Quantum annealing with manufactured spins," *Nature* 473, 194-198 (2011)
 28. V. S. Denchev, S. Boixo, S. V. Isakov, N. Ding, R. Babbush, V. Smelyanskiy, J. Martinis, and H. Neven, "What is the Computational Value of Finite Range Tunneling?," arXiv:1512.02206 (2015)
 29. T. F. Ronnow et al., "Defining and detecting quantum speedup," *Science* 345, 420-424 (2014)
 30. M. Harlander, R. Lechner, M. Brownnutt, R. Blatt, and W. Hänsel, "Trapped-ion antennae for the transmission of quantum information," *Nature* 471, 200-203 (2011)
 31. S. Olmschenk, D. N. Matsukevich, P. Maunz, D. Hayes, L. M. Duan, and C. Monroe, "Quantum Teleportation Between Distant Matter Qubits," *Science* 323, 486-489 (2009)

국가 R&D 현황 분석

최근 3년간(2011~2013년) 양자 컴퓨터와 관련된 연구개발사업을 분석해보았다.

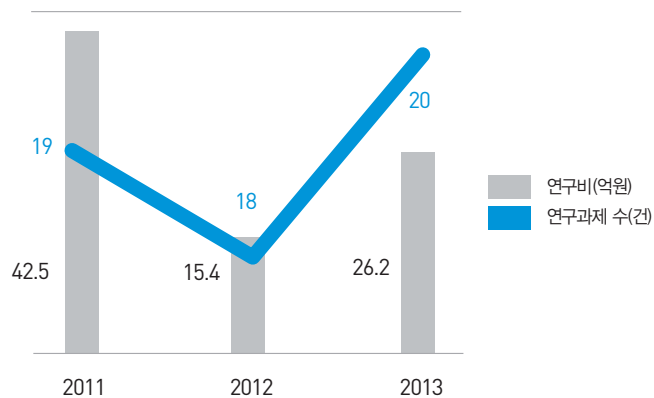
과제 선별 기준

(양자) and (컴퓨터)

분석 결과 최근 3년간 총 57건의 과제에 84억원의 연구비가 투자됨

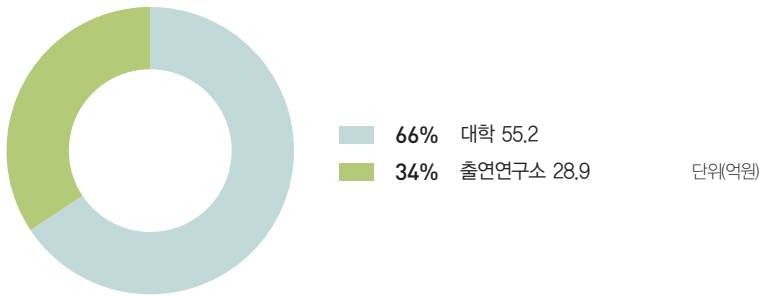
- 연구비와 연구과제 수 모두 약간의 증감이 있었던 것으로 나타남
 - 2011년에 42.5억원에 달하던 연구비가 2012년 15.4억으로 급감한 이유는 양자 컴퓨터 관련 인재 양성 사업으로 지원된 BK21 사업이 종료 됨에 따라 나타난 현상으로 실질적인 양자컴퓨터 R&D 지원은 소폭 상승하는 트렌드를 보임
 - 또한 최근 양자컴퓨터 개발을 목적으로 국책연구사업이 기획되고 있는 만큼 향후 R&D 투자는 더욱 확대될 것으로 기대됨
- 하지만 최근 양자컴퓨터에 대한 전세계적인 관심과 향후 파급효과가 막대하다는 점을 고려해 보았을 때 전체적인 양자컴퓨터 연구비 규모가 충분치 않은 것으로 사료됨

연도별 연구비와 연구과제 건수



연구수행주체 양자컴퓨터 연구는 대학이 주도적으로 수행하고 있으며, 대기업, 중견기업, 중소기업 등은 관련 과제를 수행하지 않는 것으로 나타남

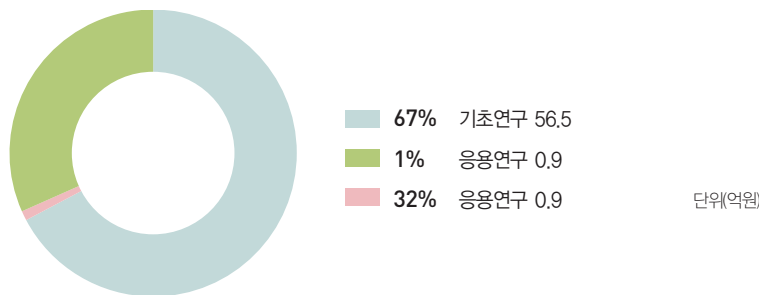
- 대학(55억원, 66%)과 출연연(29억, 34%) 주도로 모든 연구가 이루어지고 있음
 - 대학의 연구 비율이 65.6%로 일반적인 연구개발 주제에 비하여 현격히 높게 나타났으며, 기업이 양자컴퓨터를 수행하는 과제가 전무하여 이제 막 기초연구가 시작된 단계임을 알 수 있음



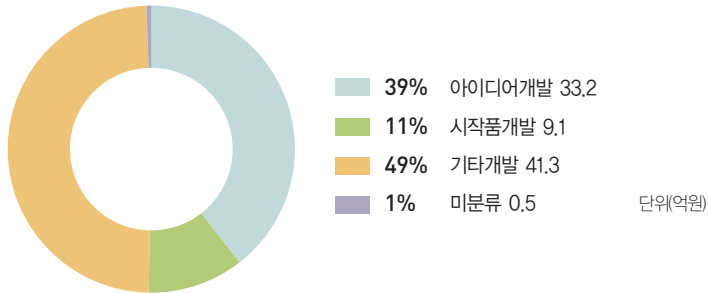
연구수준 양자컴퓨터와 관련된 연구는 연구개발단계 중 기초단계에 집중되어 있는 것으로 나타남

- 개발단계별로는 기초연구(67%), 개발연구(32%)가 절대다수를 차지하는 것으로 나타났으며, 과제 수로는 기초연구(55개)가 개발연구(1개)에 비해 압도적
- 연구개발성격 측면에서는 아이디어 개발(33억원, 32개), 기타 개발(41억원, 15개)에 편중되어 나타남
- 기술수명주기적 측면에서는 성장기(34억원) 및 도입기(15억원) 중심으로 연구가 이루어지고 있는 것으로 나타남

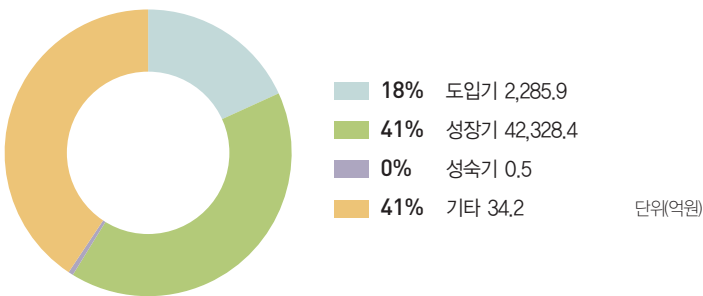
연구개발단계



연구개발성격

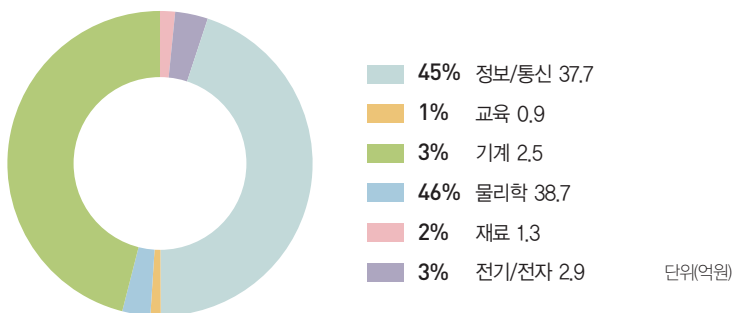


기술수명주기



연구분야 국가과학기술표준분류와 미래유망 신기술분류(6T), 국가기술지도분류(NTRM)를 분석한 결과 물리학(39억원, 46%)과 정보통신(38억, 45%) 중심의 IT(48억원, 57%), NT(25억원, 30%) 연구로 크게 편중되어 나타남

연구분야 [국가과학기술표준분류]



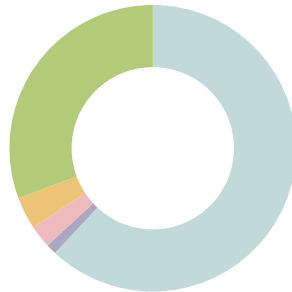
연구분야 [6T]



57% IT 48.1
30% NT 24.8
13% 포함되지 않음 11.1

단위(억원)

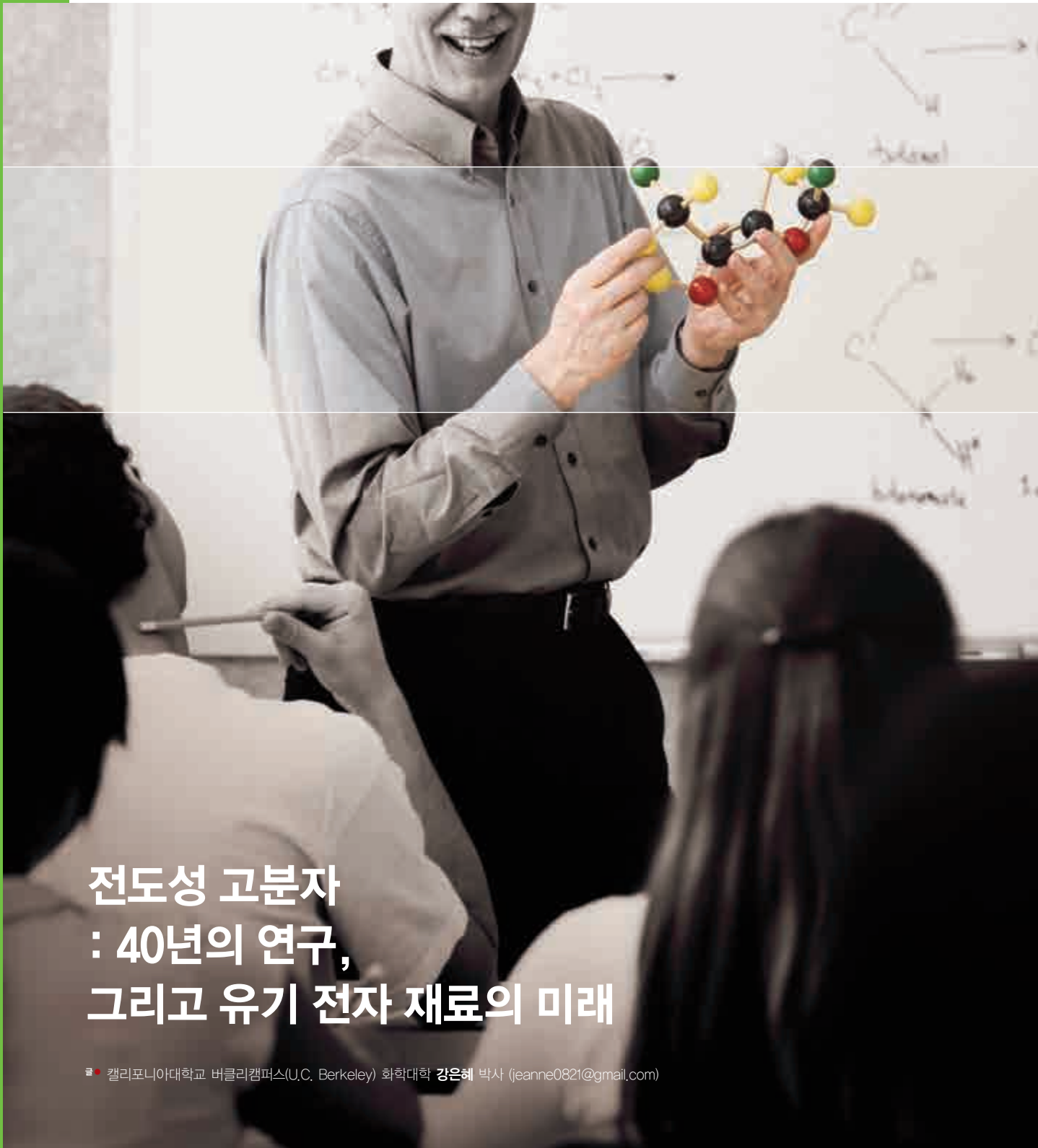
연구분야 [NTRM]



62% 정보/지식/지능화 사회 구현 52.0
1% 환경/에너지 프론티어 진흥 1.0
2% 기반주력산업 가치창출 2.1
4% 포함되지 않음 3.1
31% 기타 25.8

단위(억원)

- 물리학(39억원, 46%)과 정보통신(38억, 45%) 분야에서 대부분의 연구가 이루어짐
 - 아직 초기 단계에 있는 기술의 특성상 타 분야의 연구에서 활용하기 쉽지 않아 융합기술임에도 관련 연구분야가 한정적인 것으로 나타남
- 6T 기준에서는 IT(48억원, 57%), NT(25억원, 30%) 두 분야에 편중되어 있는 것으로 나타남
 - 이는 양자컴퓨터 구현을 위한 기술 개발 중심으로 이루어졌기 때문에 나타난 현상으로 사료됨
- NTRM 분석 결과는 정보-지식-지능화 사회 구현(52억, 62%)를 중심으로 연구가 이루어지고 있는 것으로 나타남
 - 양자컴퓨터 연구는 새로운 개념의 컴퓨터를 구현하는 것을 목표로 하므로 정보-지식-지능화 사회 구현과 연관성이 깊으며, 차후 기술이 성숙되면 다른 NTRM 분야로 확장 가능할 것으로 전망됨



전도성 고분자 : 40년의 연구, 그리고 유기 전자 재료의 미래

☞ 캘리포니아대학교 버클리캠퍼스(U.C. Berkeley) 화학대학 강은혜 박사 (jeanne0821@gmail.com)

서론: 유기 전자 재료 - 왜 고분자여야 하는가

텔레비전과 퍼스널 컴퓨터(PC)가 각종 스마트 폰과 웨어러블 기기, 태블릿 PC로 진화하기까지 반도체 소자의 개발은 20세기와 21세기에 걸쳐 엄청난 업적을 이루어 내어왔다. 실리콘 웨이퍼로 대변되는 반도체의 역사는 이제 유기물질을 이용한 전자 소재의 프레임으로 진입 중이다. 이미 OLED는 소비자들에게 대중적인 키워드가 되었고, 휘어지거나 접히는 디스플레이는 올 해 안으로 폴더블(foldable) 스마트 폰의 형태로 양산이 될 것이라는 전망이 미디어를 통해 속속들이 전해진다. 전자 소재의 진화가 목표하는 바는 뚜렷하다. 가볍고, 탄성 및 강도가 뛰어나 충격에 강하며, 투명한 동시에 좋은 전기적/광학적 성질을 갖는 재료를 요구한다. 뿐만 아니라 소자 제작 과정이 단순하고 비용이 절감되기를 원한다. 그렇기 때문에 사람들은 고분자를 전자 재료로서 활용할 수 있다는 가능성을 발견한 시점부터 끊임없이 연구를 지속해 왔으며, 현재까지도 전도성 고분자 연구는 고분자 학문 분야의 중요한 한 축을 담당하고 있다.

나무, 유리, 금속과 같은 고전적인 재료와 완전히 다른 물성을 보이는, 합성 고분자 재료가 불러온 플라스틱 혁명은 20세기 소재 역사의 한 획을 그었다. 익히 알고 있는 고분자 제품의 성질 중 가장 먼저 떠올릴 수 있는 것은 연성과 탄성이다. 이를 구현하는 근본은 고분자의 긴 사슬 구조에 있다. 고분자 사슬들이 실타래와 같이 엉겨있는 있는 형태(morphology)에서의 분자 간 상호작용은 금속과 유리 내부의 원자 간 또는 분자 간 상호 작용과는 분명히 차이가 있으며, 그러한 특색 때문에 물리적 성질을 조절하기 용이하다. 때문에 같은 유기 소재라 하더라도 작은 유기 분자를 사용하는 것과 고분자를 사용하는 것은 전혀 다른 차원의 이야기인 것이다. 통상적으로는 유기 전자 소재라고 부르지만 그 안에서는 단분자 소재와 고분자 소재 간의 구획이 명확하며, 세부적인 응용 측면에서 필요로 하는 지식 및 기술의 차이가 크다고 할 수 있다. 유기 단분자 전자 소재가 이미 훌륭하게 개발 되어있지만 이를 고분자 소재로 바꾸어 적용할 수 있을 때 얻을 수 있는 부가가치 또한 상당하다. 고분자의 탄성과 연성, 충격 강도 등은 유기 단분자 결정 구조에서는 얻기 힘든 것들이며, 진공 증착이 필요 없고 패터닝이 쉬운 고분자 소재는 박막 제조 공정 비용 절감 및 과정 단순화에 유리하게 작용한다.

전도성 고분자는 금속이나 반도체와 비슷한 전기 전도도를 갖는 탄소 기반의 고분자들을 총칭한다. 전기가 통하는 플라스틱이라는 신 개념은 인류에게 많은 변화를 가져올 것으로 기대되어 연구자들에게 영감과 구체적인 청사진을 그릴 수 있는 기회를 제공하였고, 그 업적을 인정받아 2000년 노벨 화학상이 수여되었다. 수상자 중 한 명인 Alan J. Heeger 교수는 그의 노벨상 수상 기념 강연에서 배터리, 전극, 전선, 발광 다이오드(LED), 트랜지스터, 태양 전지 등 다양한 응용 분야에 대한 전도성 고분자의 발전을 기대하였다. 그로부터 16년이 지난 현재까지 여전히 매 년 전도성 고분자 연구 결과는 증가하고 있으며, 최신 연구와 산업의 동향이 다양한 방면에서 분석되고 있다. 사실 우리는 몇 가지 간단한 키워드를 통해 전도성 고분자에 대한 수 많은 보고서와 리뷰들을 인터넷과 책을 통해 쉽게 찾을 수 있지만, 자연과학과 공학을 아우르는 방대한 연구 분야를 속속들이 이해하기는 쉽지 않다. 본 리뷰에서는 합성 화학을 전공한 저자의 관점에서 전도성 고분자 연구에 대한 일반적이고 개괄적인 이해를 도모하려 한다. 우선 전도성 고분자의 기본 원리에 대한 개념적 접근과 방대한 연구 분야를 이해하기 위한 가이드라인을 제시한다. 이를 토대로 전도성 고분자가 응용되고 있는 각종 연구 분야의 역사와 최근 동향이 어떠한지 살펴보고, 특히 고분자 합성 분야에서 어떤 이슈를 중심으로 연구 전략을 세워 나가는지 기술하도록 한다.



전도성 고분자의 등장: 폴리아세틸렌

일반적인 합성 고분자 수지는 보통 탄소-탄소의 단일 결합을 기반으로 하는 소재이기 때문에 전기가 통하지 않는 부도체이며, 이러한 특성을 이용해 전자제품의 케이스, 전기 절연체 등으로 활용될 수 있었다. 그러나 1970년대 후반 등장한 전기 전도성 고분자의 개념은 금속과 비금속 물질을 도체와 부도체로 구별하는 고전 과학에 물음표를 던지며, 유기 재료 역사의 새로운 장을 열게 되었다. 전도성 고분자 연구의 본격적인 시작점은 아세틸렌(acetylene) 기체를 중합한 폴리아세틸렌(polyacetylene) 필름의 높은 전기 전도도의 발견이라 할 수 있다^{2,3}. 1950년대 중반은 Ziegler-Natta 촉매로 폴리프로필렌(polypropylene)을 중합하는 연구가 산업에 유용하게 적용되는 시기였고, 아세틸렌 역시 같은 촉매 시스템으로 중합이 가능하다는 점이 보고되고 있었다^{4,5}. 그러나 불용성의 불안정한 검은색 가루만 얻어져 고전하던 중, 1974년 Ikeda 교수진에 속해있던 Shirakawa가 폴리아세틸렌 필름을 제작하는데 성공하였다⁶. 이를 계기로 Shirakawa는 당시 금속성을 갖는 유기 물질 연구에 관심이 있었던 MacDiarmid 및 Heeger와 공동 연구의 기회를 마련하게 되었다. 1977년, 이들은 반도체 수준(10^{-4} S/cm)에 머물렀던 폴리아세틸렌 필름의 전도도가 아이오딘(I₂)을 비롯한 할로젠 원소에 의한 도핑(doping)으로 38 S/cm까지 증가한다는 사실을 발표하였다^{7,8}. 이후 도펀트(dopant)의 다양화, 지속적인 촉매 반응 개선 및 고분자 사슬 구조의 스트레칭 등 다양한 시도 끝에 마침내 금속과 동등한, 10^5 S/cm가 넘는 전도도가 구현되었다^{9,10}. 다만 공기 중에서 폴리아세틸렌이 쉽게 산화되는 문제가 있어 직접적인 실용화는 어려웠지만¹¹, 이러한 놀라운 연구 결과들을 바탕으로 전도성 고분자에 대한 초기 연구는 활발하게 이루어 졌다고 할 수 있다. 그 결과 폴리아세틸렌 연구를 핵심적으로 진행하였던 Alan J. Heeger, Alan G. MacDiarmid, 그리고 Hideki Shirakawa에게 2000년 노벨 화학상이 수여되었다.

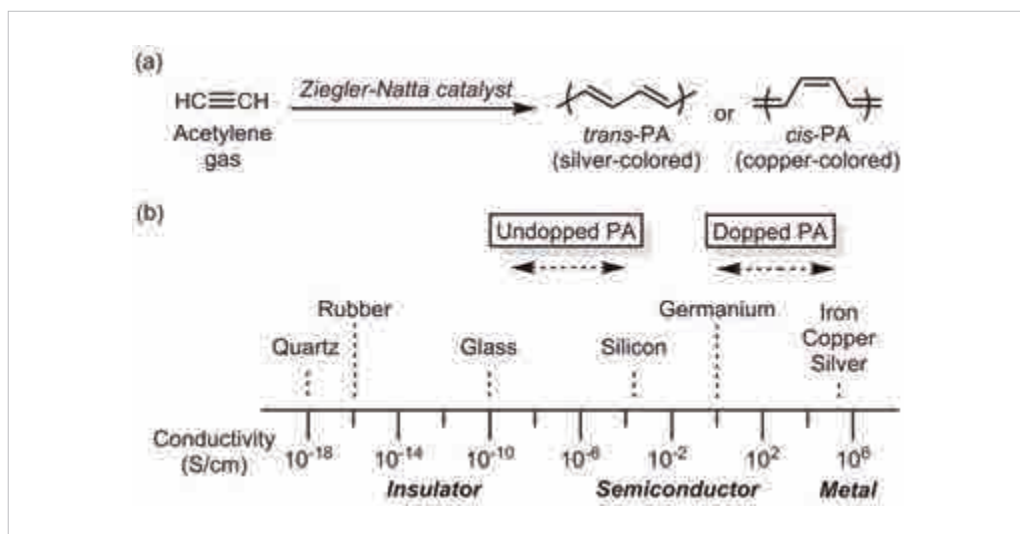


그림 1. (a) 폴리아세틸렌(PA)의 중합 및 화학 구조 (b) 여러 물질과 폴리아세틸렌의 전도도

전도성 고분자의 구조: 반도체성과 전도성

전도성 고분자가 활발하게 연구되기 시작한 1980년대부터 노벨 화학상이 수여된 2000년까지 폴리아세틸렌 이외에도 폴리아닐린(polyaniline; PANI), 폴리피롤(polypyrrole; PPy), 폴리티오펜(polythiophene; PT), 폴리파라페닐렌(poly(p-phenylene); PPP), 폴리파라페닐렌비닐렌(poly(p-phenylene vinylene); PPV) 등 수 많은 전도성 고분자의 기본 골격이 연구되었다(그림 2).

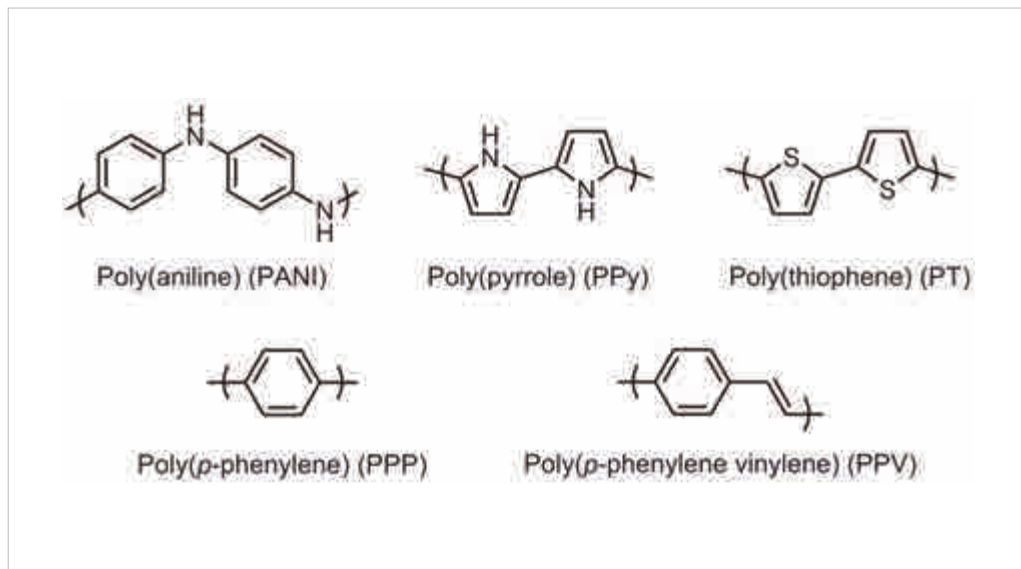


그림 2. 다양한 구조의 전도성 고분자

이러한 기본 구조에서 여러 변형을 거듭하여 현재까지 개발된 전도성 고분자의 구조는 수십 가지가 넘지만, 종류를 불문하고 그 기본 골격은 하나의 공통점을 갖는다. 탄소-탄소 이중 결합과 단일 결합이 반복되는 공액(conjugated) 구조가 바로 그것이다. 공액 구조의 특징은 sp^2 탄소의 p-오비탈에 존재하는 π -전자의 비편재화(delocalization) 현상이다. 고분자의 길이가 길수록 공액 구조의 평면에 대해 수직으로 존재하는 p-오비탈의 개수가 증가하면서, 전자가 위치한 π 밴드와 비어있는 π^* 밴드의 간격이 좁아진다. 가장 간단한 공액 고분자 구

조 모델인 폴리아세틸렌의 구조는 아세틸렌 분자의 sp 결합이 sp^2 결합과 sp^3 결합으로 바뀌면서 생성되며, 초기 전도성 고분자 연구에서 이론적인 접근을 하는데 좋은 연구 대상이었다¹². 폴리아세틸렌 사슬을 공명 구조로 이해한다면 밴드 이론(band theory)에 의해 밴드 갭이 없는, 금속과 같은 에너지 구조를 갖게 되고 전하 중립 상태에서도 높은 전도도를 가질 것으로 예상할 수 있다. 그러나 긴 고분자 사슬에서는 균일한 결합 길이의 공명 구조(resonance structure) 보다는 결합 길이가 길고 짧은 형태로 존재하는 상태(dimerization)가 더 안정(Peierls instability)하기 때문에 최종적으로는 최소 1.5 eV 이상의 밴드 갭을 갖게 된다는 것이 밝혀졌다(그림 3)¹. 때문에 모든 전도성 고분자들은 본래 상태에서는 전도성을 갖기 어려운 반도체와 같다고 할 수 있다.

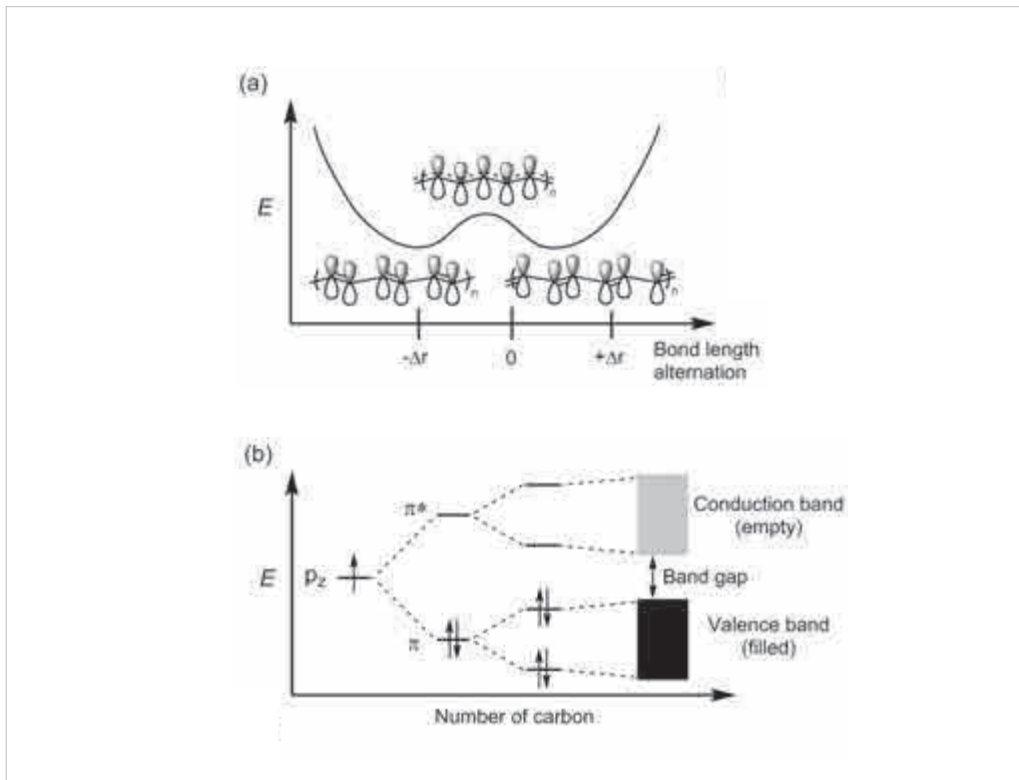


그림 3. (a) 폴리아세틸렌의 공명 구조와 dimerized 구조에 따른 에너지 다이어그램 (b) Dimerized 구조에 따른 p-오비탈의 비편재화 에너지 도식

전도성 고분자의 전하적 중성 상태(neutral charge)에서는 전류가 흐르기 어렵다. 그러나 반도체와 마찬가지로 추가적인 전하(전자 또는 정공)가 도핑을 통해 부여되면 충분한 전도도를 이끌어낼 수 있다. 다만 전도성 고분자의 전기 전도성 메커니즘은 반도체의 그것과는 구분되며, 고분자의 사슬 구조에 따른 도핑 및 전도 메커니즘도 조금씩 차이가 있다.

폴리아세틸렌의 전도도를 설명하는 가장 기초는 솔리톤(soliton)으로 이해되고 있는 공액 구조의 결함(defect)이다¹³⁻¹⁶. 그림 4(위) 와 같이 폴리아세틸렌 사슬의 결함(라디칼 또는 전하 생성)에 의해 공액 구조가 여러 개의 도메인으로 나누어지는 현상을 파동으로 이해할 수 있고, 이러한 고립파(solitary wave)에 대한 준입자(quasiparticle)인 솔리톤은 밴드 갭 사이에 존재하는 중간 갭 상태(midgap state)를 만든다.

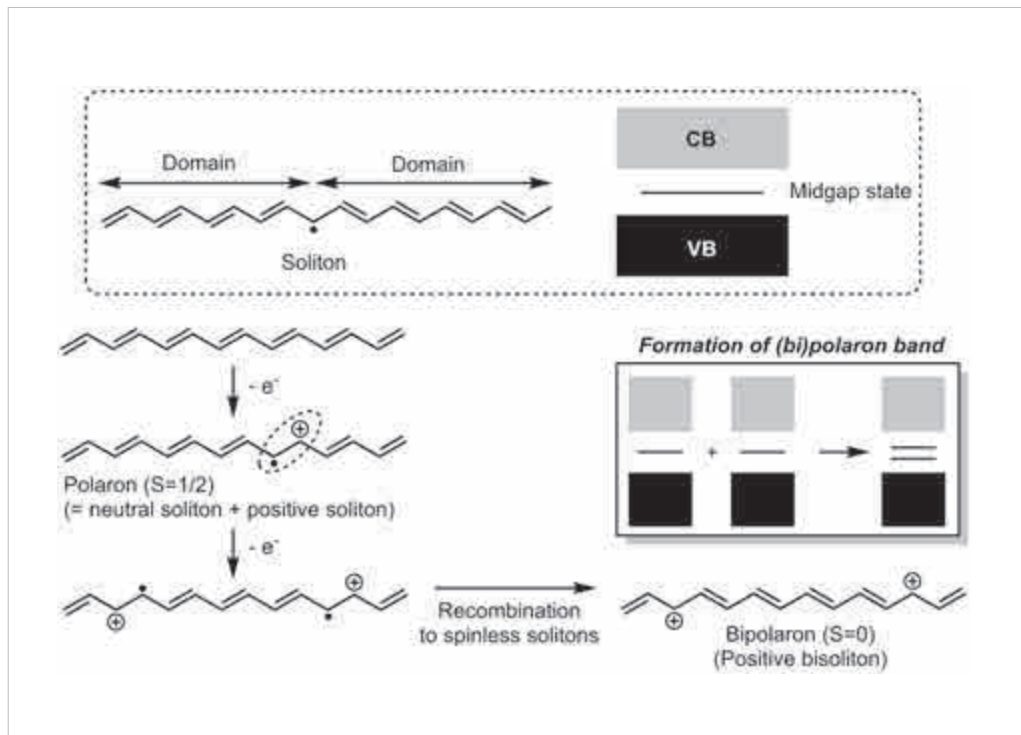


그림 4. 폴리아세틸렌의 솔리톤 및 도핑에 의한 폴라론, 바이폴라론 생성

아이오딘(I₂)으로 폴리아세틸렌을 도핑하면 아이오딘은 환원되어 I₃⁻ 이온이 되고, 고분자 사슬은 전자를 잃으며 양전하를 띠게 된다. 이 때 생성되는 라디칼 양전하를 폴라론(polaron)이라고 부르는데, 이는 주변 격자 구조의 뒤틀림(또는 화학 구조의 불연속성)을 수반하기 때문이며, 비편재화 구조에 변화를 가져온다. 또한 전자 하나를 더 잃음으로 인해 생성된 두 개의 폴라론은 스핀의 합이 0인 두 개의 양전하, 즉 바이폴라론(bipolaron)으로 재구성된다. 이러한 준입자들은 솔리톤의 조합으로 생각할 수 있고, 솔리톤 밴드간의 상호 작용에 의한 새로운 밴드가 형성된다. 방향족 고리 기반의 고분자는 바닥 상태보다 약간 불안정한 퀴노이드(quinoid) 형태로 변화하면서 폴라론과 바이폴라론이 형성되기 때문에 폴리아세틸렌의 전도성과 구별된다(그림 5).

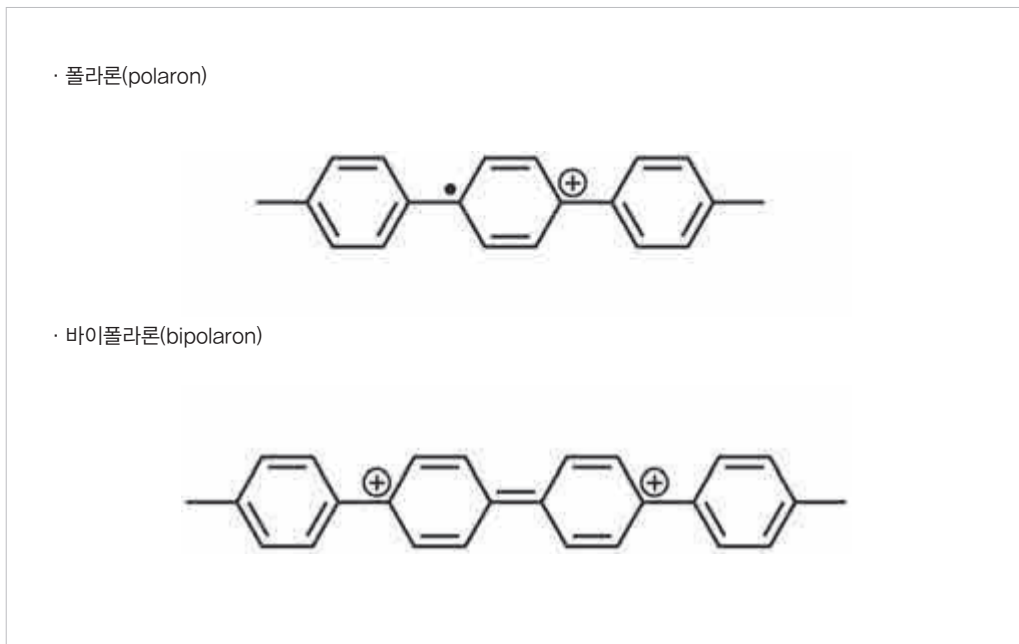


그림 5. 폴리파라페닐렌의 폴라론(위)과 바이폴라론(아래)

폴리아닐린의 도핑은 다른 전도성 고분자와 비교할 만한 부분이 있어 흥미롭다¹⁷. 보통 전자를 주거나 받는 산화-환원 형태로 도핑이 이루어지는 다른 전도성 고분자와는 달리, 폴리아닐린은 경우에 따라 산-염기 반응에 의한 폴라론 생성이 가능하다. 이를 이해하기 위해서는 먼저 폴리아닐린의 산화된 사슬 구조에 대하여 짚고 넘어갈 필요가 있다. 폴리아닐린은 그림 6과 같이 아닐린이 산화된 퀴노이드 형태의 구조를 포함할 수 있다. 에머랄딘 염기(Emeraldine base, EB)형태의 퀴논 이민(quinone imine)은 양성자 산(protonic acid)과 반응하여 이미늄염(iminium salt)을 생성하고, 사슬 내부의 산화환원 반응을 거쳐 라디칼 양이온의 폴라론이 고르게 분포된 형태로 비편재화 된다.

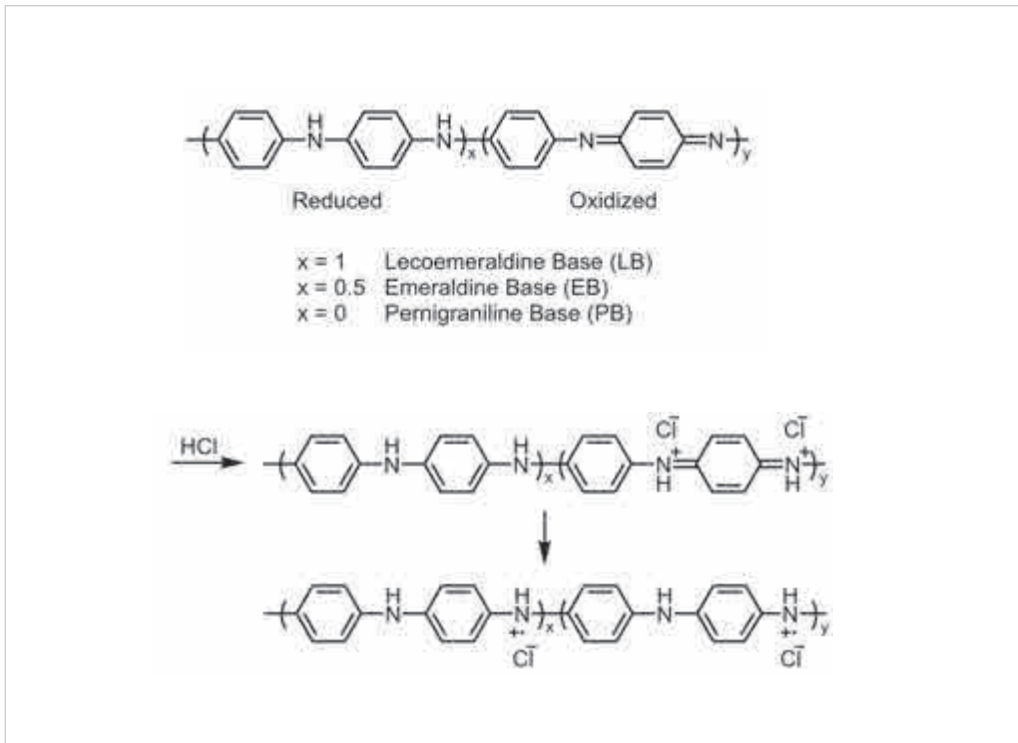


그림 6. 폴리아닐린의 산화/환원 구조와 양성자 산에 의한 도핑 및 폴라론(polaron) 구조

전도성 고분자 연구 분야의 이해

전도성 고분자의 응용 범위가 다양하게 기대되는 만큼 산업화를 위해서는 기초 과학과 공학의 다방면에서의 연구가 필수적이다. 고분자라는 학문이 기본적으로 화학, 물리, 공학에 걸쳐 다양한 지식을 요구하는 바 있으나, 비전도성 고분자와 비교하였을 때 전도성 고분자 연구에서 특이적으로 고려해야 할 요소들이 존재한다. 이를 이해하고 활용하기 위해 필요한 기본적인 접근 방향과 시각에 대해 다음과 같이 요약할 수 있다.

고분자 중합 및 가공성(Processibility) 연구

고분자 중합은 연속적인 유기 화학 또는 전기 화학 반응에 의해 단위체가 긴 사슬 구조를 만드는 과정이며, 합성 고분자 연구의 기본은 이러한 중합 시스템을 최적화 하는 것이다. 결합 생성 방법에 대해 고려해 볼 때, 주로 고전적인 유기화학 반응 메커니즘을 기반으로 하여 sp^3 탄소 간 또는 sp^3 - sp^2 탄소 간의 단일결합을 생성하는 비전도성 고분자와 달리 sp^2 탄소 간의 단일결합이나 이중결합을 생성하는 방법은 상당히 제한적이거나 복잡하다. 최근에는 현대 유기화학의 발전에 따라 복잡한 유기금속 촉매 반응을 활용할 수 있게 되어, 고전적인 방법으로는 합성하기 힘든 독특하고 유용한 공액 구조의 고분자를 중합하려는 노력이 많이 시도되고 있다.

고분자의 중합에서는 기본적인 단일 화학 반응의 효율 외에도 분자량 및 분포 조절, 사슬 이동(chain transfer) 반응의 제어, 중합 해체 반응(depolymerization) 억제, 점도 및 용해도 조절 등 고려 해야 할 요소가 많다. 특히 전도성 고분자를 활용하고자 하는 전자 소자 제작 공정을 단순화 시키기 위해서는 고분자의 높은 용해도 또는 분산도가 필수적이다. 고분자의 용해도는 사슬 구조와 분자량에 의해 크게 영향을 받는데, 전도성 고분자에서는 π -전자의 공액 구조가 유도하는 사슬 간 상호인력이 상대적으로 크기 때문에 다른 절연성 고분자들에 비해 용해도가 매우 낮아, 많은 경우 중합 과정에서부터 제대로 샘플을 얻지 못하거나 나중에 원하는 형태로 샘플을 가공하는 것이 어렵다. 때문에 이를 해결하기 위한 방안이 합성 단계에서부터 필수적으로 요구된다. 이에 대해서는 본 리뷰의 마지막 부분에서 다시 다루기로 한다.

고분자의 화학 구조와 성질 간의 관계 이해

전도성 고분자의 반복되는 단위 구조(repeat unit)는 고분자의 전기적, 광학적 성질에 직접적인 영향을 미친다. 예를 들어, 정공(hole; 양전하)을 전하 캐리어로 사용하는 p형 공액 고분자는 전자를 제공하기 쉬운 화학 구조의 단위체를 기반으로 한다. 반면 자유 전자가 전하 캐리어가 되는 n형 공액 고분자는 전자가 부족하여 자유 전자를 받아들이기 쉬운 단위 구조를 이용하여 합성한다. 기본적으로 공액 고분자는 빛에 의해 여기(excitation)되기 쉬운 π 전자와 전극 대비 적절한 HOMO(highest occupied molecular orbital) 에너지 준위를 바탕으로 하기 때문에 p형으로 주로 사용되지만, 고분자 사슬의 기능기(functional group)의 전자 밀도를 조절하여 n형 반도체를 구현하는 것이 가능하다¹⁸. 또 비슷한 형태의 방향족 구조의 단위체이지만 이형(hetero) 원소의 종류에 따라 광학적 성질이 달라질 수 있다^{19,20}. 그러므로 원하는 성질의 공액 고분자를 증합하기 위해 단위체의 미시 구조를 설계할 때는 화학 구조에 따른 성질을 예측할 수 있는 물리 유기화학 및 합성 유기화학의 지식이 뒷받침 되어야 한다.

고분자의 거시 구조 (모폴로지; morphology) 와 전기적/광학적 성질의 상관관계

앞서 언급한 바와 같이 전도성 고분자의 긴 공액 구조는 사슬 간 π - π 상호작용을 가질 수 있고, 이 때문에 때로는 사슬들이 일정한 방향으로 배향하거나 부분적인 결정 구조(semi-crystalline)를 형성하게 된다(그림 7). 또 이러한 결정 구조들의 특징은 고분자 사슬 내/외부에서 이동하는 전하 또는 에너지의 전달 효율과 연관이 있다. 일반적으로는 정렬되지 않고 서로 엉켜있는 공액 고분자 사슬보다 사슬들이 일정한 간격과 방향으로 정렬되어 평평하고 긴 공액 구조를 가질 때 밴드 갭이 낮고 전하 이동이 쉽다고 알려져 있다^{21,22}. 형광을 내는 고분자의 경우에는 사슬 간 거리가 가까울 때 에너지 이동에 따른 여러 광학 현상이 나타나는데, 이는 용매에 대한 용해도 차이 또는 사슬의 구조 차이에 따라 달라질 수 있다. 그림 8은 PPV 사슬이 용매에 잘 녹아 어느 정도 펼쳐진 구조를 가지는 경우와 나노입자 상태로 뭉쳐져 있는 경우를 비교한 사례이다²³. 때문에 고체 상 및 용액 상에서의 전도성 고분자의 사슬 구조와 그에 따른 성질의 상관관계를 이해하려는 연구가 지속되고 있다.

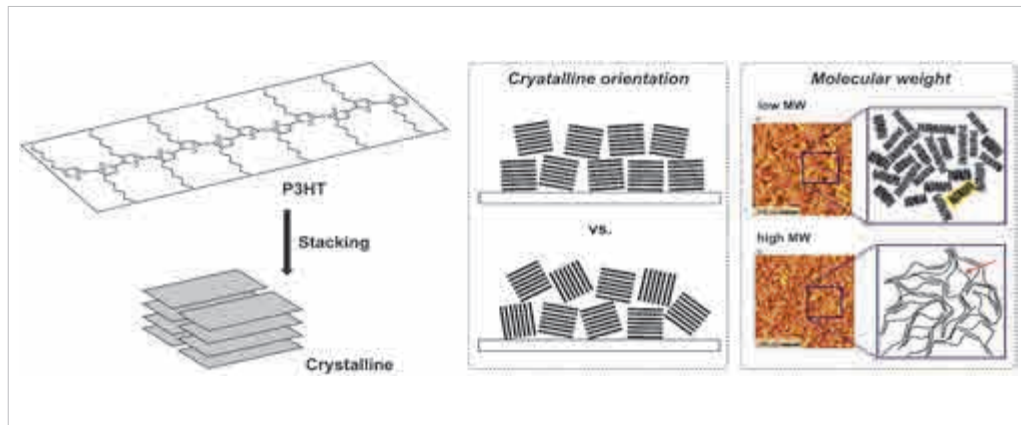


그림 7. 전도성 고분자(poly(3-hexylthiophene))의 부분 결정 구조와 모폴로지의 다양성²⁴

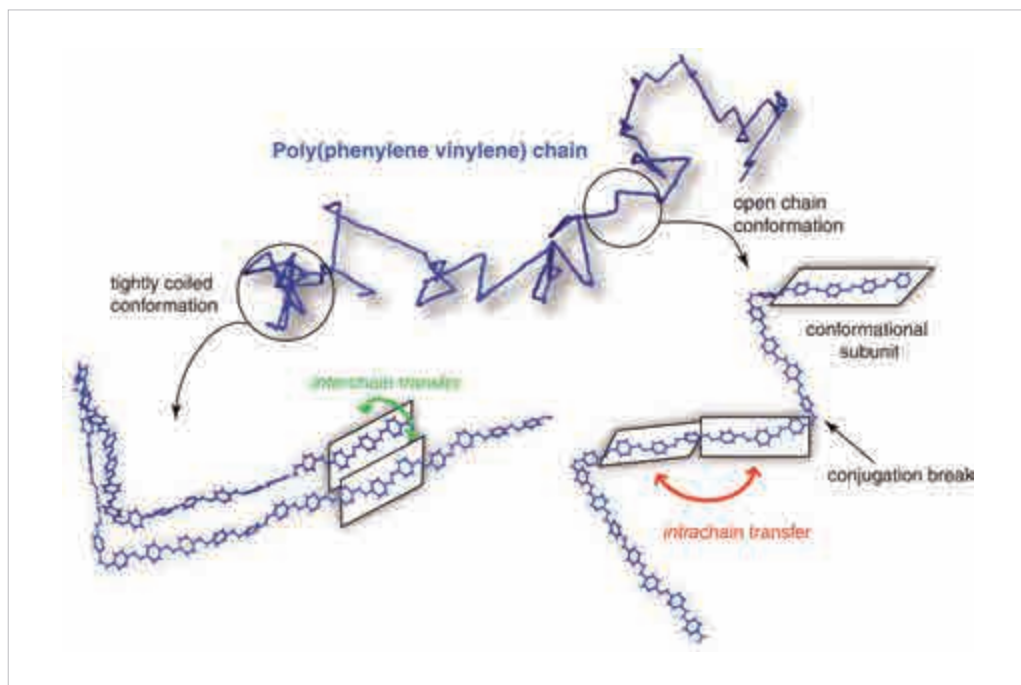


그림 8. PPV의 단일 사슬 구조에 따른 에너지 이동 모델²³

소자 엔지니어링 (Device engineering)

똑같은 고분자를 합성하였음에도 불구하고 이를 이용해 소자를 제작한 후 실제로 원하는 성능을 측정하는 과정에서 천차만별의 효율을 얻는 경우가 많다. 유기 태양 전지(organic photovoltaics; OPV)를 예로 들어 소자 구조와 효율에 대해 생각해보기로 하자(그림 9). 태양 전지 소자의 기본 구조는 빛을 받아 전자(electron)와 정공(hole)쌍을 생성하여 광전류(photocurrent)를 생성할 수 있는 활성 층(active layer)과 양 전극으로 이루어져 있다. 활성 층은 p형 전도성 고분자 도너(donor)와 n형 어셉터(acceptor; ex. 풀러렌 유도체)가 접촉면을 형성하며 섞여 있는데, 이 블렌드(blend)의 구조에 따라 전하 생성 효율 및 전하 이동도가 크게 영향을 받는다. 전자와 정공 쌍이 생성된 후 각각의 전극으로 효과적으로 이동하기 위한 이상적인 구조는 도너와 어셉터 물질이 매우 작은 크기의 균일한 막대 형태로 위아래로 맞물리는 형태이나 실질적으로 효과적인 구현이 어렵다. 가장 실용적인 모델로 많이 이용되는 것은 벌크 이종 접합(bulk-hetero junction; BHJ) 구조이며, 활성 층의 두께, BHJ 내부의 도너 고분자와 어셉터 물질의 분포 및 도메인 크기 등이 변수로 작용할 수 있다²². 뿐만 아니라 정공 수송 층(hole-transport layer; HTL)과 전자 수송 층(electron-transport layer; ETL)에 의한 전자-정공 쌍의 이동 효율 역시 소자 효율에 중요한 역할을 한다²⁵. 흡수 스펙트럼이 다른 여러 개의 다른 고분자를 사용한 탠덤 셀(tandem cell)도 소자 효율을 높이는 방법으로 이용되고 있다²⁶. 이러한 사례들을 볼 때, 전도성 고분자를 제작하는 일뿐만 아니라 전체적인 엔지니어링이 응용 연구에서 매우 중요함을 알 수 있다.

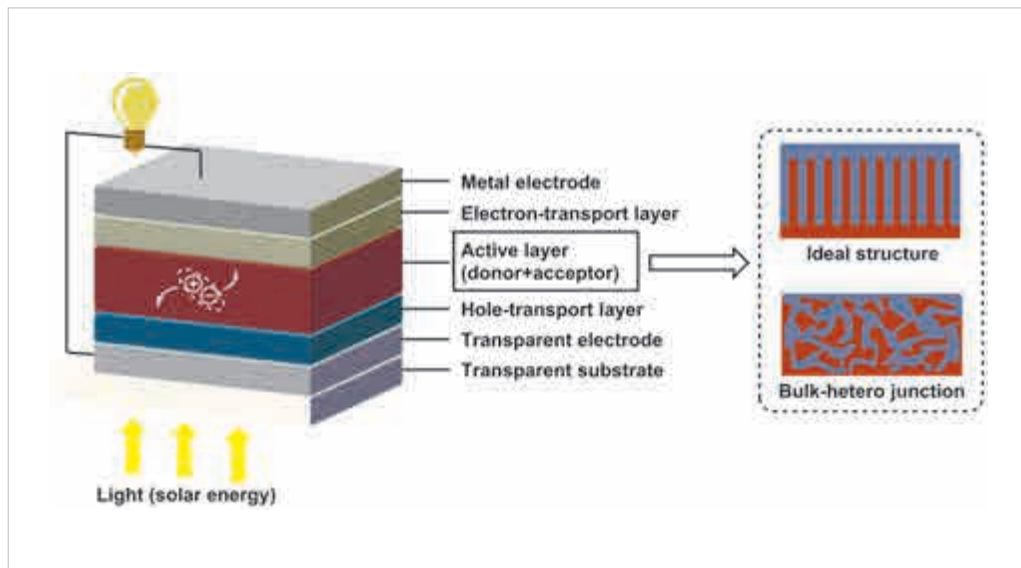


그림 9. 간단한 OPV 소자 모형 및 활성 층의 구조.

전도성 고분자의 종류와 응용 분야

전도성 고분자들은 구조에 따라 밴드 갭과 전기적 및 광학적 성질, 안정성 등에 차이가 존재하기 때문에 모든 전도성 고분자를 각종 응용 분야에서 동일하게 사용하기는 어렵다. 물론 특정 고분자를 제한된 범위에서만 이용할 수 있는 것은 아니며, 전도성 고분자가 응용될 수 있는 모든 분야에서 많은 종류의 고분자들의 응용 가능성이 꾸준히 탐색되어왔다. 다만 각 연구 분야를 주도적으로 이끌어 나간 사례들이 있기 때문에, 각각의 대표적인 고분자들에 대해 알아보고 그 응용성 및 최신 연구 동향을 이해하는 방향으로 소개하려 한다.

1) 안정한 고전도성 고분자^{2,27,28}: PANI, PPy, PEDOT

전도성 고분자의 응용 1세대는 높은 전기 전도성을 활용한 사례들로, 금속 대체재로서의 응용 가능성이 높게 평가되어 다양한 분야에서의 적용 시도가 이루어졌다²⁷. 전도성 고분자들의 연구 초기 단계 전도도를 비교해 보면, 폴리아세틸렌 외에도 폴리파라페닐렌이나 폴리파라페닐렌비닐렌(PPV) 등의 전기 전도도가 10^3 S/cm 수준으로 비교적 높았지만, 안정성과 가공성이 매우 떨어진다는 점에서 실제 산업화와는 거리가 멀었다²⁸. 대신 적절한 전도성($\sim 10^2$ S/cm)과 안정성, 가공성을 갖는 폴리아닐린, 폴리피롤, 폴리티오펜 계 전도성 고분자들이 실질적인 응용 연구 대상으로 자리 잡았으며 전 세계적으로 전도성 고분자 시장의 대부분을 차지하게 됨과 동시에 전도성을 증가시키기 위한 노력 역시 지속적으로 이루어졌다. 이들은 전기화학 중합으로 쉽게 제작할 수 있다는 장점이 있어 대량 생산에 있어서도 유리하다.

폴리아닐린(polyaniline, PANI)은 폴리아세틸렌의 전도성 연구와는 독자적으로, 1862년에 처음으로 보고되었을 만큼 상당히 오래 전부터 연구된 유기 고분자이다²⁹. 물론 고분자라는 개념이 정립되기 전이었기 때문에 고분자가 아닌 “aniline black”이라는 이름으로 보고되었고 산화/환원이 가능한 화학적 구조 정도만이 연구되었다. 1960년 후반이 되어서야 비로소 폴리아닐린의 전도성이 알려지기 시작하였고^{30,31}, 1980년대 Mac Diarmid에 의해 재조명 되어 현

대적인 의미의 전기 전도성 고분자로서 연구 및 응용될 수 있었다^{14,17,28,32,33}. 폴리아닐린의 사슬 구조와 도핑에 따른 용해도 차이가 크기 때문에 합성 방법, 가용성, 도펀트의 종류 등에 따라 천차만별의 전도도를 얻을 수 있어 목적성에 맞도록 증합 및 가공 방법을 정밀하게 최적화하는 연구가 여전히 많이 진행되고 있다. 폴리피롤은 헤테로 방향족(heteroaromatic) 기반의 첫 전도성 고분자로서, 역시 1960년대 몇몇 보고를 통해 전기 전도도의 가능성을 엿볼 수 있었다^{34,35}. 1970년대 후반 전도성 고분자의 연구가 흐름을 타기 시작하며 1970년대 후반 100 S/cm의 고전도성 폴리피롤이 보고 되면서³⁶ 폴리아닐린과 마찬가지로 전도성 고분자로서 활발히 연구되어 산업에서의 응용으로 이어지기 시작하였다³⁷⁻³⁹. 현재까지 지속적으로 이루어지고 있는 이 고분자들의 연구 결과에서는 최대 약 $10^3 \sim 10^4$ S/cm 수준까지 전도도를 구현할 수 있는 것으로 알려져 있다⁴⁰⁻⁴².

카보양이온(Carbocation)에 의한 불안정성이 폴리아세틸렌에서 문제가 되었다면, 에머랄딘 염기 기반 폴리아닐린은 양성자화(protonation)에 의한 도핑 메커니즘을 가지며 안정한 세미퀴논 라디칼 양이온을 생성하기 때문에 이를 피할 수 있다⁴³. 한편 피롤(pyrrole)은 이형 원소인 질소를 포함하는 오각형 방향족 고리 화합물이다. 전자를 공여하는(electron-donating) 이형 원소를 공액 사슬에 포함하게 되면 전자가 부족한 상태인 p-도핑 전도성 고분자의 불안정성을 보완할 수 있을 것으로 생각할 수 있다²⁸. 결과적으로 폴리피롤은 폴리아세틸렌에 비해 훨씬 뛰어난 안정성으로 실용화에 도달했다.

그러나 폴리피롤과 비슷한 시기에 연구되었던 폴리티오펜은 용해도가 훨씬 낮아 활용이 어려웠다. 이를 개선하고자 고분자에 용해도를 부여하는 동시에 산소에 의한 양이온 안정화 효과를 띠는 알콕시(alkoxy)⁴⁴ 및 디알콕시(dialkoxy)⁴⁵ 치환기가 3번과 4번 탄소 위치에 도입된 고분자들이 디자인 되었으나, 최종적으로는 독일의 Bayer사에서 개발한, 두 알콕시기가 육각형 고리구조로 묶인 PEDOT(poly(3,4-ethylenedioxythiophene))이 기존 고분자들의 문제점이었던 공기 중에서의 안정성(특히 도핑 후), 가공성, 입체장애 등의 문제점을 해결하면서 뛰어난 전도도를 구현하는데 성공하였다⁴⁶. 여기에 PSS(Poly(styrenesulfonic acid))를 도핑된 PEDOT의 카운터 이온 물질로 사용하면서 물에 잘 분산되는 고분자 전해질 복합체(PEDOT:PSS)가 마침내 완성되었고, 각종 제품으로 성공적으로 실용화 되었다(그림 10).

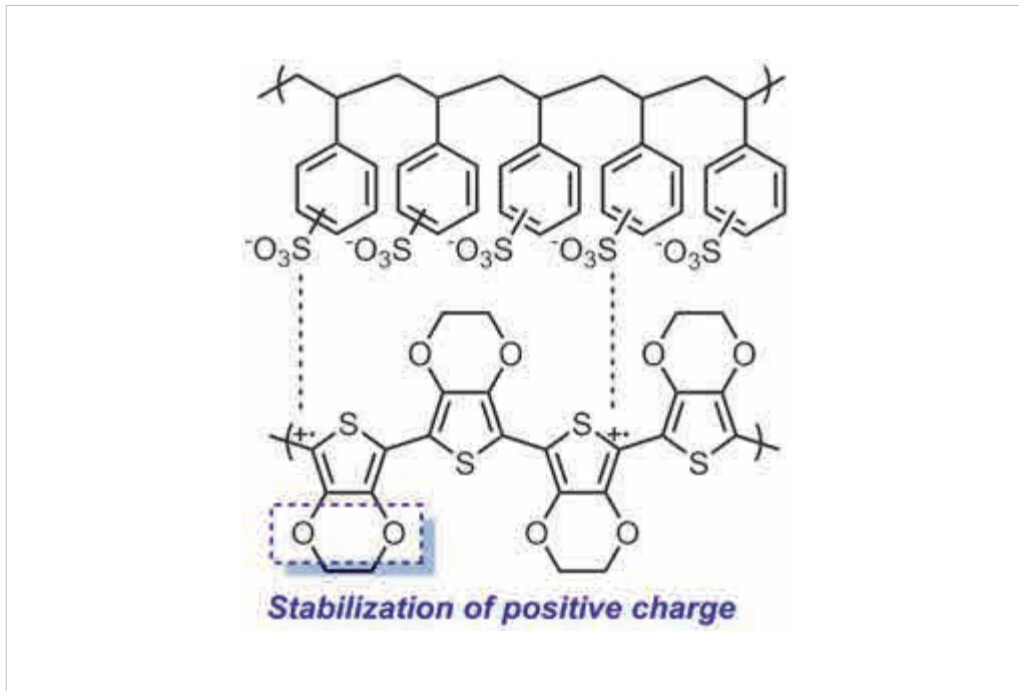


그림 10. PEDOT:PSS의 화학 구조

PEDOT의 응용 범위는 그야말로 광범위하다. 독일 Heraeus사의 Clevios™ 이라는 브랜드로 전도도가 1000 S/cm에 달하는 PEDOT:PSS의 많은 실용화 제품들이 나와있고, 또 아직 연구 중이지만 곧 실용화가 가능할 것으로 기대되는 응용 분야 역시 상당수 존재한다.

이러한 고전도성 고분자들의 실용화 현황을 보면, 전 세계적으로 PEDOT의 생산 및 응용 사례가 가장 많고, 그 뒤를 폴리피롤, 폴리아닐린이 따르는 것으로 알려져 있다²⁷. 많은 경우 금속 대체재로서 활용되고 있으며, 10^2 - 10^3 S/cm 정도의 전기 전도도 범위에서 충분한 성능을 보일 수 있는 사례들이다.

물론 위의 전도성 고분자들은 도핑 된 상태의 전도성 뿐만 아니라 비 도핑 상태에서의 반도체 소자 및 기타 다양한 응용 · 활용 가능성이 분야에서 지속적으로 탐구되고 있다.

■ PEDOT 응용사례

투명 전극 및 전하 수송 층: 투명하고 고전도성을 갖는 PEDOT:PSS의 장점을 극대화 시킨 사례로, 기존의 ITO(indium-titanium oxide) 박막 전극을 대체하는 차세대 플렉서블 전극 및 터치패널로 기대된다. OPV 및 OLED 소자에서는 정공의 수송을 돕는 층으로도 많이 사용되고 있다.

전해 콘덴서(electrolytic capacitor): 일찌감치 전도성 고분자를 실용화 할 수 있었던 사례로, PEDOT과 폴리피롤을 고체 전해질로 사용한 탄탈륨 및 알루미늄 기반의 솔리드 콘덴서가 상용화되어 시판되고 있다.

에너지 저장장치의 전극: 이차전지와 슈퍼 캐패시터 같은 에너지 저장 장치의 전극으로 전도성 고분자를 활용하려는 노력은 이미 1980년대에 시작되어 폴리아닐린을 전극으로 사용한 배터리가 출시되기도 하였다^{47,48}. 장기적인 안정성 때문에 무기물과의 복합물 형태로 주로 연구되고 있다.

전자파 차폐, 대전 방지, 금속 부식 방지: 전자파가 발생하는 물질을 전도성 물질로 코팅하면 도체 내부의 전기장이 0이 되는 원리에 의해 코팅 내부의 전자파 발생 물질로부터 외부로 차단할 수 있다. 정전기는 전하가 물질 표면에서의 마찰에 의해 축적되는 현상이므로 저항이 낮은 물질($10^8 \Omega \cdot \text{cm}$ 이하)로 코팅하여 정전기의 발생을 막을 수 있다. 금속 제품의 부식과 그에 따른 중금속의 유출을 막기 위해 전도성 고분자를 표면에 코팅하는 방법도 예전부터 많이 활용되어 오고 있다.

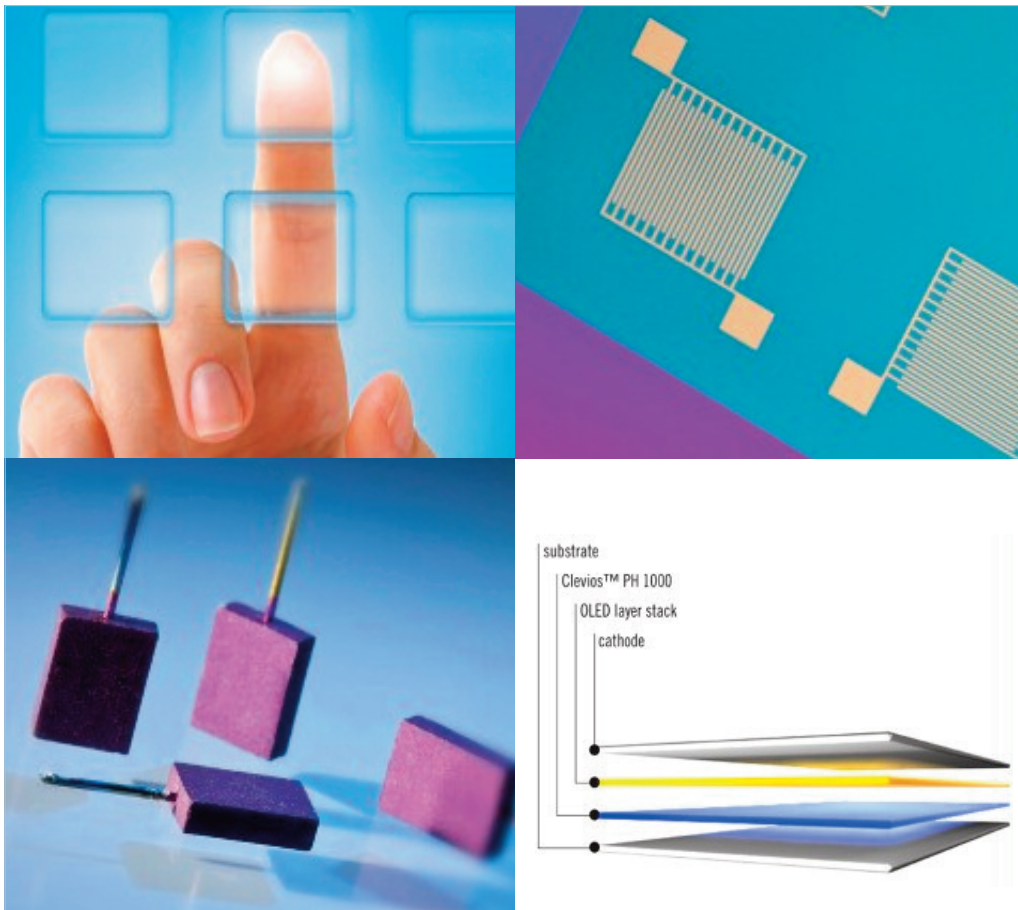


그림 11. 상용화된 PEDOT:PSS가 활용되고 있는 터치 패널, OFET, 커패시터, OLED 소자⁴⁹



2) 유기 발광 소재: 페닐렌 & 플루오렌 기반 전도성 고분자

전도성 고분자 연구의 많은 사례에서 안정성의 한계가 뚜렷해져 갈 무렵, 도핑 되지 않은 전도성 고분자의 반도체적 성질을 응용하려는 움직임이 대두되었다. 그 중 일찌감치 소자 응용 가능성이 대두되어 기업들이 연구 및 산업화를 시도했던 분야가 바로 OLED이다. 전계 발광(electroluminescence)은 외부에서 주입된 전기 에너지에 의해 전자와 정공이 발광체(반도체 물질)에서 만나 재결합하면서 물질의 밴드 갭에 해당하는 전자기파를 방출하는 현상이다. 이미 1970-80년대에는 작은 유기 단분자를 이용한 OLED 산업화가 기업들에게 큰 관심사였기 때문에, 전도성 고분자를 이용한 전기 발광이 1990년 처음 보고된 이후 이를 소자화 하는데는 오랜 시간이 걸리지 않았다⁵⁰. PPV를 시작으로⁵¹, 폴리파라페닐렌⁵², 알킬기를 포함하는 폴리티오펜(poly(3-alkylthiophene; P3AT)⁵³ 등에서 시작된 고분자 OLED 소자 연구는 불과 3년만에 0.05%에서 4%까지 양자 효율(external quantum efficiency; EQE)을 증가시켰다⁵⁴. Dow, Cambridge Display Technology, Sugimoto Chemicals, Covion 등의 회사들이 적극적으로 고분자 OLED 개발에 나섰고 현재는 5-10% 정도의 EQE와 수 천 시간 등의 수명 수준까지 소자 성능이 향상되었다⁵⁵.

폴리아세틸렌과는 달리 벤젠 고리를 포함하는 공액 구조의 고분자는 발광성이 매우 높다고 알려져 있는데, 이는 사슬 구조의 대칭성 차이에 근거한다⁵⁶. 고분자 OLED 연구에서 많이 활용되고 있는 사슬 구조는 그림 12와 같이 페닐렌(phenylene)과 플루오렌(flourene)을 기본 골격으로 하는 것들이 많다⁵⁷. LED는 특정 색(빨간색, 녹색, 파란색)을 구현하기에 적합해야 하는데, PPV계열의 사슬은 기본적으로 2.25 eV(551 nm)와 2.4 eV(520 nm)의 형광 피크를 가지며, 노란색-녹색 구간의 빛을 낸다. 이 단위체는 치환기를 도입하여 잘 녹는 고분자를 합성하기 쉽고, 치환기의 전자 밀도를 바꾸거나 두 개 이상의 다른 단량체로 공중합체의 형태를 만들어 발광 파장을 튜닝하는 것도 수월하다⁵⁸. 1998년 등장한 폴리플루오렌(polyfluorene)은 밴드 갭이 약 2.7-3.0 eV 사이에 존재하며, 열 안정성과 효율이 높아 매우 각광받는 2세대 OLED 고분자로서 자리매김하였다. 폴리플루오렌 역시 그림 12처럼 다른 방향족 분자와 공중합체를 형성하면서 성능이나 발광 파장을 튜닝할 수 있는데, 가시광선 전 영역에 달하는 튜닝이 가능하다는 점에서 가장 산업화에 가까운 소재라 할 수 있다⁵⁷. 또 공중합체의 단위체에 전자 친화적 또는 정공 친화적인 물질을 도입함에 따라 전하 이동도를 조절할 수 있다^{55,59}.

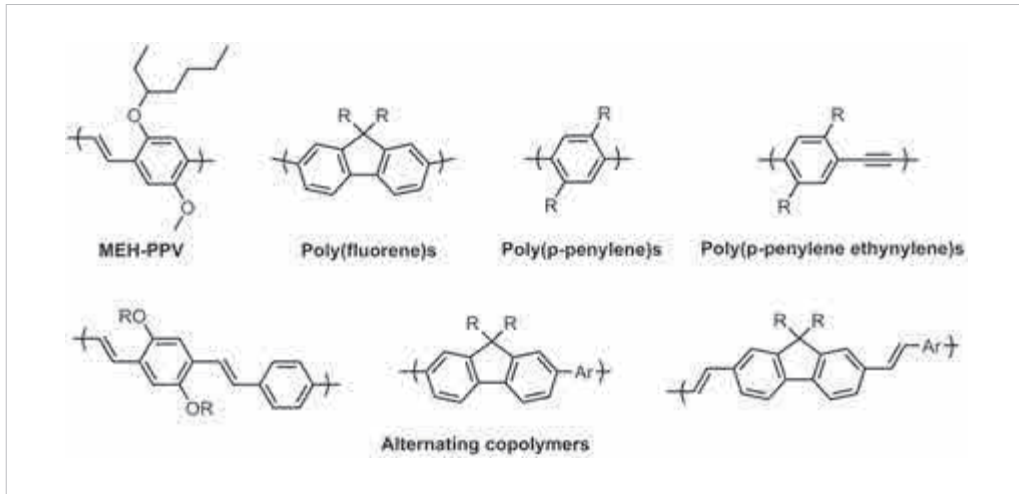


그림 12. 고분자 OLED에서 주로 연구되는 전도성 고분자 사슬 구조 및 공중합체 전략

그림 13의 사례들은 최근 발표된 전도성 고분자 기반의 플렉시블한 LED 및 용액 공정으로 제작된 LED들이다^{60,61}. 이를 통해 고분자 OLED 연구가 실제 산업에서 추구하는 이상적인 소자 제작에 점점 가까워지고 있음을 알 수 있다.

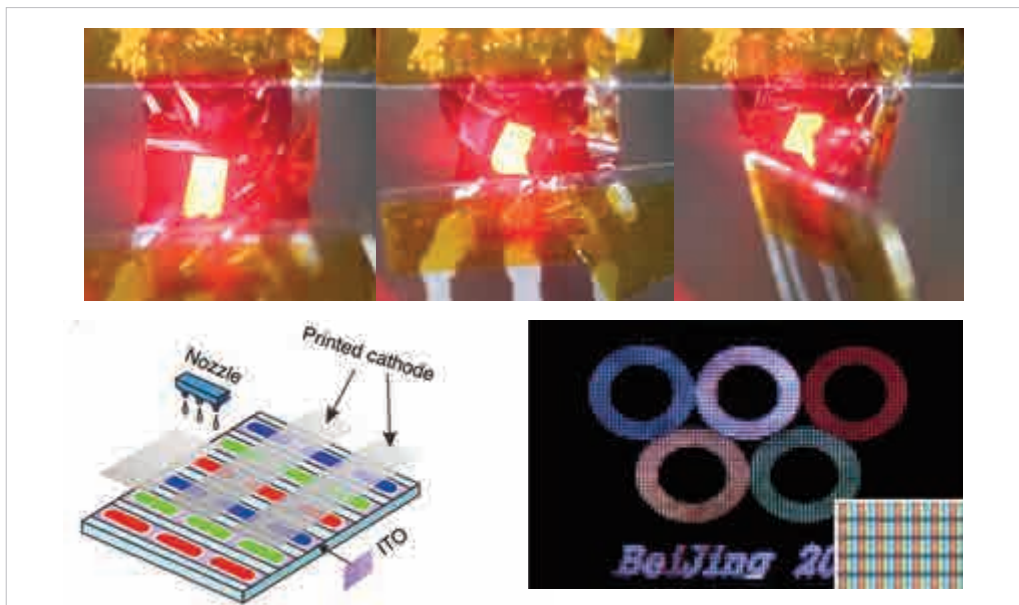


그림 13. (위) 유연한 박막 기판 위에 제작된 전도성 고분자 LED⁶⁰ (아래) 용액 공정으로만 제작된 전도성 고분자 LED⁶¹

3) 유기 태양 전지 (I): 티오펜 구조 기반 고분자

폴리티오펜은 유기 용매에 대한 용해도가 매우 좋지 않기 때문에 중합과 가공 측면에서 제한이 많다. 이를 개선하기 위해 치환기가 도입된 티오펜 단량체들을 중합하였는데, 그 중 현대 응용 연구에서는 P3HT(poly(3-hexylthiophene))가 가장 많이 사용되고 있다. 그 외에도 뷰틸(butyl; C4)이나 옥틸(octyl; C8), 도데실(dodecyl; C12) 등이 사용되므로 통칭 폴리알킬티오펜(PATs 또는 P3ATs)으로 불린다. 도핑 된 P3AT들은 좋은 전도성을 갖지만 공기와 물에 매우 취약하다는 단점이 있어, 반도체 성질을 최대한 이용하는 방향으로 연구가 발전하였다²⁸. P3HT의 반도체성을 이용할 수 있는 응용 분야 중 단연 독보적인 것은 OPV소자 연구로, 이를 다루고 있는 책과 리뷰만 수 십 편에 달할 정도로 연구의 범위와 깊이가 상당하다.

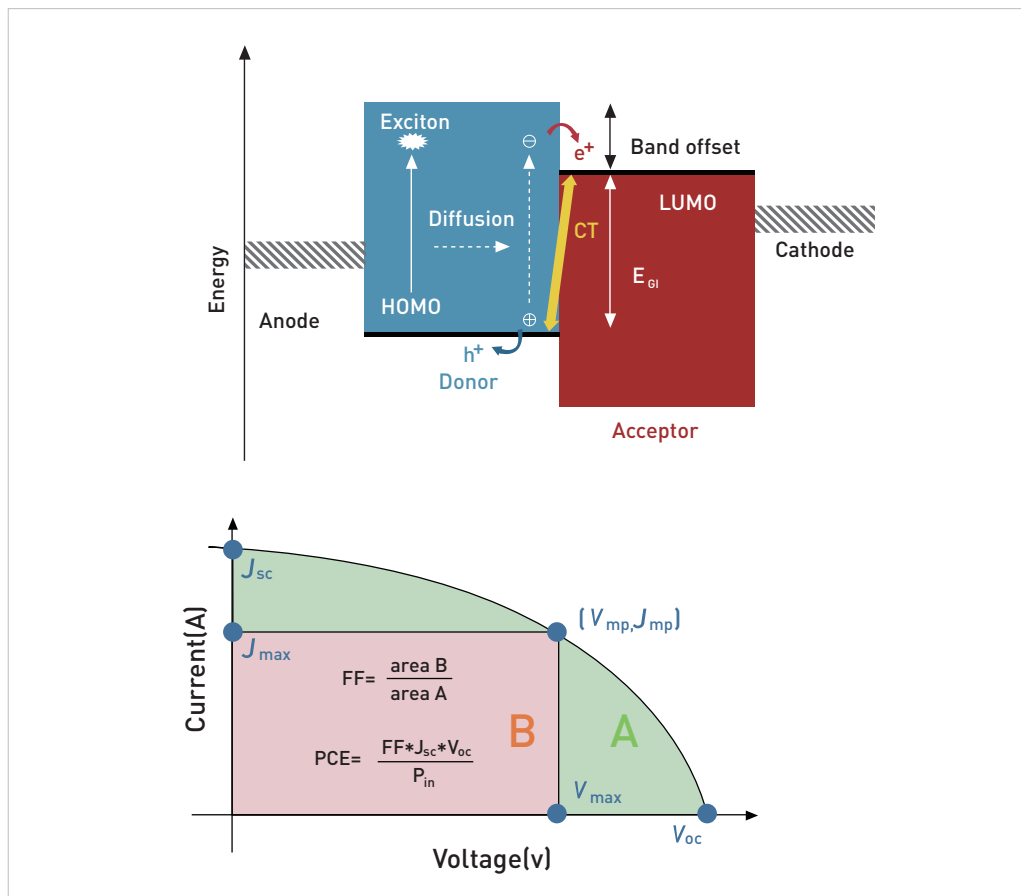


그림 14. (상) OPV 소자의 광전류 생성 과정 및 에너지 준위 (하) 소자 효율을 측정하는 전류-전압 곡선²⁾

앞서 그림 9에서 설명한 바와 같이, OPV소자의 기본 원리는 태양빛 에너지에 의해 생성된 전자와 정공을 각 전극으로 이동시켜 전류를 생성하는 것이다. 빛에 의해 들뜬 상태의 전도성 고분자에서 생성된 엑시톤(exiton)은 어셉터 물질과의 경계면에서 전하 분리를 일으킨다. 전도성 고분자는 전자가 빠진 후 생성된 정공을 수송하고, 어셉터 물질(보통 풀러렌 유도체)은 받아들인 전자를 반대 전극으로 수송한다. PCE(Power conversion efficiency)라 불리는 OPV의 효율은 전류-전압 곡선에 의해 계산된다(그림 14). J_{sc} (short circuit current)는 활성 층의 빛 흡수율, 전하 분리도 및 이동도, 전극의 전하 수집에 의존하며, V_{oc} (open circuit voltage)는 도너-어셉터 물질의 $HOMO_D-LUMO_A$ 차이에 의해 결정된다. 최대 일률은 곡선 내 직사각형의 면적(fill factor; FF)이 최대가 될 때 결정되므로, PCE를 높이기 위해 세 요소를 증가시키는 전략을 바탕으로 연구가 진행되고 있다.

연구 초기에는 PPV계열도 이용되었지만 P3HT가 PPV에 비해 흡수 스펙트럼의 영역이 넓고 정공 이동도도 뛰어나 OPV에서 도너 물질로 많이 이용되어왔다. 이에 풀러렌 유도체인 PCBM을 어셉터로 사용하는 P3HT:PCBM 소자가 수 많이 연구되었으며 보통 3-4% 가량의 PCE를 보이고 있다⁶². 그러나 P3HT의 밴드 갭은 태양광 흡수 효율 측면에서 여전히 충분하지 않고(1.9 eV), HOMO 준위가 높아 V_{oc} 를 높이는데 한계가 있어 이를 개선하기 위한 티오펜 기반의 전도성 고분자들이 많이 개발되었다(그림 15)^{63,64}.

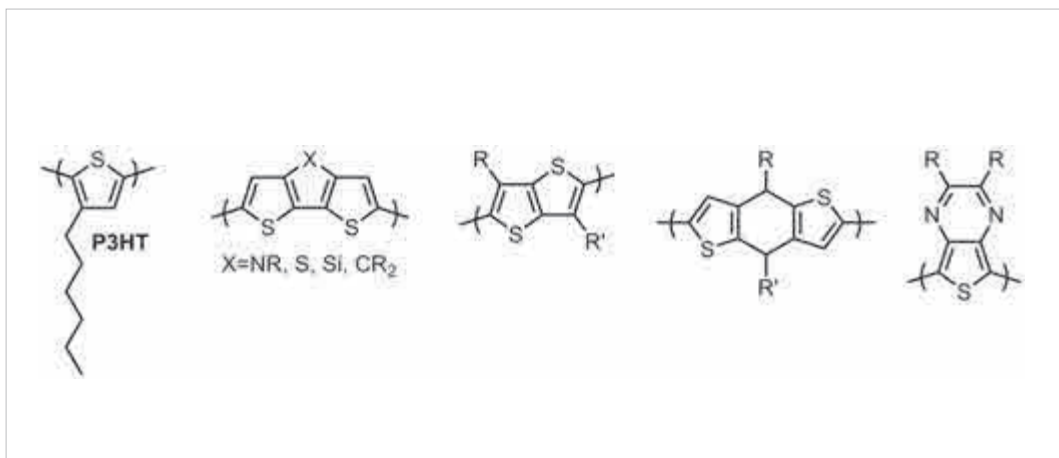


그림 15. OPV 연구를 위한 다양한 구조의 티오펜 기반 단위구조

4) 유기 태양 전지 (II): 낮은 밴드 갭(low-band gap) 고분자

태양광의 스펙트럼은 짧은 파장의 자외선부터 매우 긴 파장의 적외선 영역까지 넓은 영역에 걸쳐있지만 OPV에서 사용되고 있는 고전적인 전도성 고분자들의 흡수 파장은 가시광선의 약 600 nm 정도 까지로 제한된다. 이러한 한계를 넘기 위해 개발된 것이 긴 파장대의 흡수가 가능한 낮은 밴드 갭(low-band gap) 고분자이다⁶⁵. 이 고분자는 전자가 풍부한 단위체(donor)와 그렇지 않은 단위체(acceptor)가 반복되면서 오비탈의 섞임을 통해 밴드 갭이 낮아지는 원리를 바탕으로 디자인 되었다(D-A 타입 고분자). OPV에 사용하기 적합한 D-A 타입 고분자로서는 높은 광 전류 값을 위해서 1.2-1.6 eV 사이의 낮은 밴드 갭이 요구되지만, 밴드 갭이 너무 낮아 HOMO가 높거나 LUMO(Lowest Unoccupied Molecular Orbital)가 낮으면 적절한 전압이나 어셉터 물질로의 전자 전달에 문제가 생긴다. 그래서 -5.2 eV 가량의 낮은 HOMO 준위 및 -3.7 eV 보다는 높은 LUMO 준위의 범위를 지향한다⁶⁶. P3HT 기반의 소자가 최대 6-7% 정도의 효율을 보이는 반면 D-A 타입 고분자는 7-10% 정도의 효율을 무난히 달성하였다⁶³. 가장 최근에 공식 업데이트 된 유기 고분자 기반의 단일 셀 OPV 최대 효율(11.5%) 역시 D-A 타입의 낮은 밴드 갭 고분자에 의해 보고되었다^{67,68}.

낮은 밴드 갭 고분자가 특히 효과적으로 활용될 수 있었던 것은 탠덤 셀 구조의 OPV 소자이다^{26,70}. 태양광 스펙트럼 범위의 빛을 모두 잘 흡수하는 물질을 제작하기 어렵기 때문에 각 파장 대역에서 효과적으로 작용하는 두 가지 이상의 물질을 사용하여 여러 개의 활성 층을 만드는 것이 탠덤 셀 구조이다.



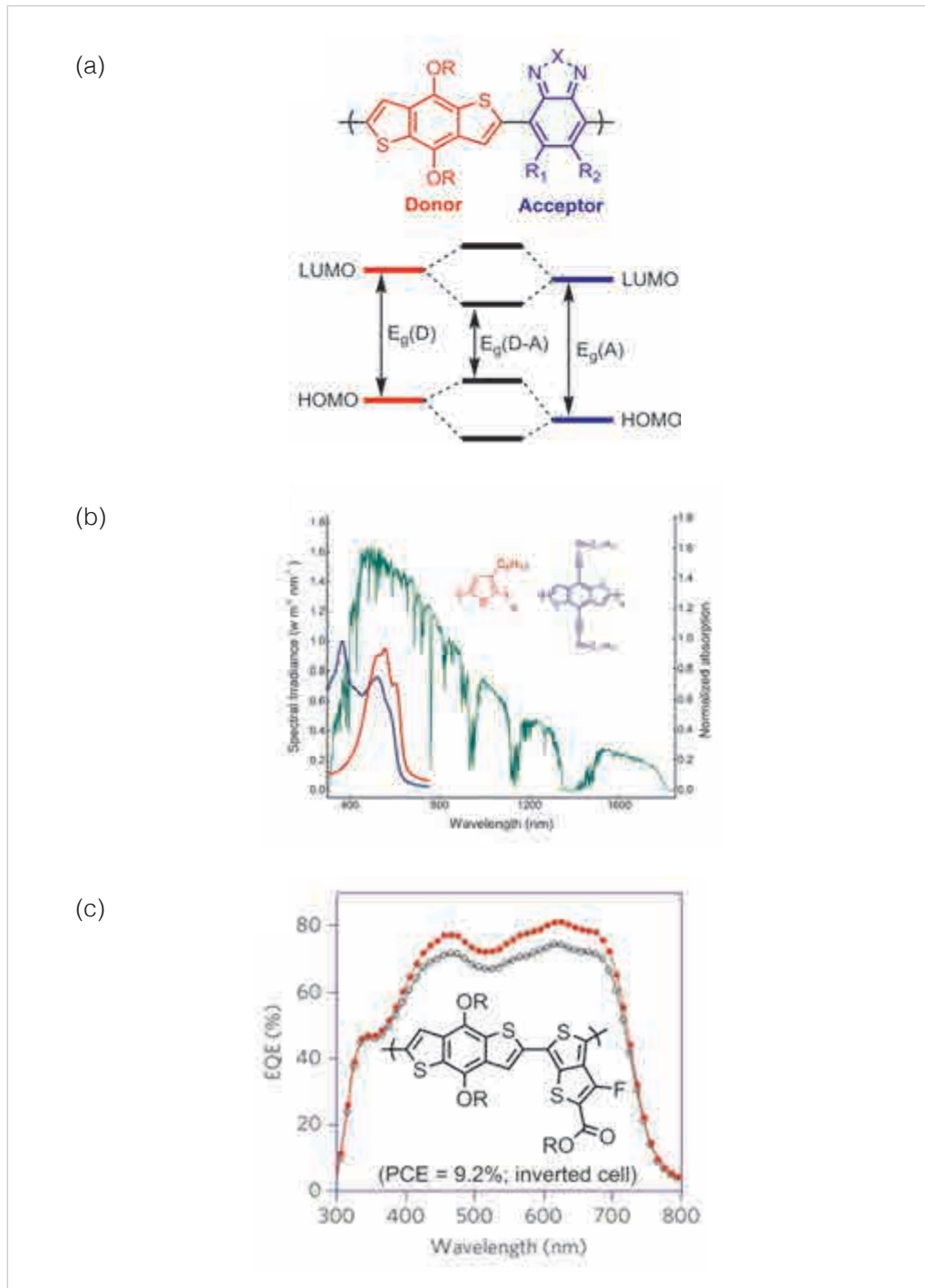


그림 16. (a) D-A 타입 저밴드갭 고분자의 예시 구조 및 오비탈 믹싱(mixing)에 의한 밴드 갭 감소 (b) 일반적인 전도성 고분자의 흡수 스펙트럼(red, blue) 과 태양광 스펙트럼(green)⁶⁸ (c) 9.2%의 효율을 보인 OPV에 사용된 D-A 고분자의 구조 및 태양광 흡수 효율 그래프⁶⁹

5) 유기 박막 트랜지스터: DPP 기반 고분자

전도성 고분자가 트랜지스터에 이용되기 위해서 가장 중요한 것은 높은 전하 이동도이다. 유기 박막 트랜지스터(Organic Thin-Film Transistor; OTFT) 또는 유기 전계효과 트랜지스터(Organic Field Effect Transistor; OFET) 로 불리는 소자 연구에서는 비결정질 실리콘 소자의 전계 효과 이동도(μ)인 $0.5\sim 1 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 를 목표로 해 왔으며 이미 단분자의 경우 이를 훨씬 상회하는 $10 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 이상의 이동도가 구현되었다⁷¹. 그러나 단분자 만큼 균일한 결정 구조를 갖기 어려운 고분자는 사슬이 휘어지거나 꼬이는 현상 때문에 훨씬 낮은 이동도를 갖는다. 1980년대 중반부터 2000년대 중반까지 연구된 전도성 고분자들의 이동도 중 가장 높은 값을 보이는 것은 폴리티오펜 계열이었다($0.1\sim 1 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$)⁷². 그런데 최근 몇 년 사이 매우 평평한 구조의 D-A 타입 고분자들이 등장하면서 2012년 Beng S. Ong의 논문을 시작으로 전하 이동도가 $10 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 에 육박하는 고분자 트랜지스터가 발표되기 시작했다^{73,74}. 대표적인 예가 diketopyrrolopyrrole(DPP) 분자를 포함하는 고분자들이다(그림 17)⁷⁵. 이를 기반으로 고분자 사슬이 휘어지거나 뒤틀리지 않고 평평한 구조를 유지하는 것이 전하 이동도에 매우 중요하다는 사실을 알아내어^{76,77}, DPP 외에도 다른 단단하고 평평한 공액 구조를 갖는 고분자들에서도 높은 이동도가 발표되었다^{78,79}. 이러한 사례들은 고분자 기반의 트랜지스터 연구에서 매우 획기적인 결과이기 때문에 앞으로의 결과가 매우 주목된다.

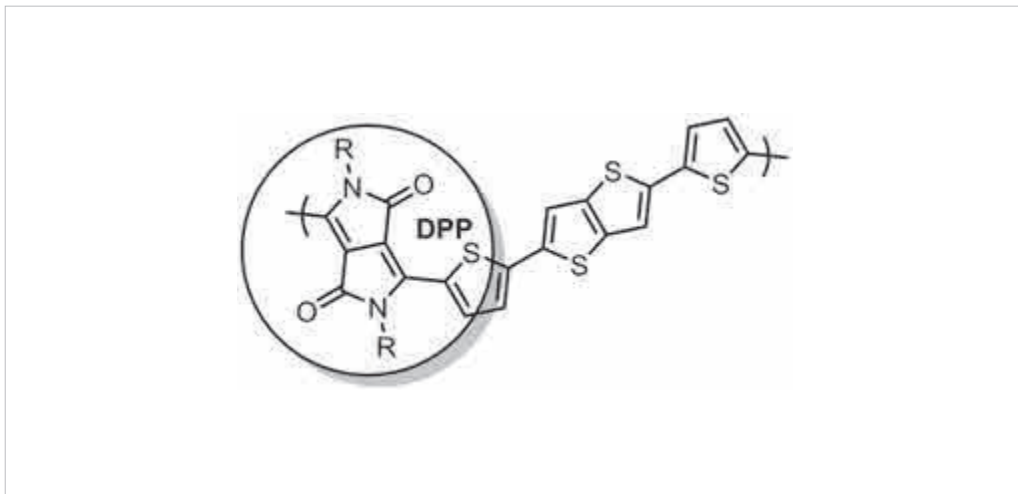


그림 17. 처음으로 $10 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 이상의 전하 이동도를 보인 DPP 기반의 D-A 타입 고분자⁷³

전도성 고분자의 합성법: 역사와 최근 연구 동향

다양한 응용을 위한 전도성 고분자 개발 과정을 살펴보았을 때, 합성 단계에서 고려해야 할 요소가 굉장히 많음을 알 수 있다. 특히 고분자의 물리적 성질 조절을 위해 수 많은 조합의 단위체들이 연구된 배경에는 고분자 중합 연구에서의 획기적인 발전들이 중추적인 역할을 했음이 여실히 드러난다. 전도성 고분자의 합성은 일반적으로 폴리올레핀이나 나일론, 폴리에스터와 같은 비전도성 고분자의 중합과는 다른 맥락에서 접근한다. 나일론을 합성하는 축합 중합의 경우 친핵성 치환 반응(nucleophilic substitution) 메커니즘으로 작용기를 잃으면서 결합을 생성하는데, 이중 결합을 갖는 할로젠화 비닐(vinyl halide)에서는 일반적으로 친핵체(nucleophile)에 의한 치환 반응이 일어나지 않는다. 방향족 물질은 제한된 경우 친핵성 치환 반응이 가능하지만 연속적인 공액 구조를 만들기 위한 친핵체를 도입하는 것이 어렵다. 첨가 중합의 경우에도 폴리올레핀 대신 아세틸렌 기반의 단량체를 사용하여 음이온, 라디칼, 양이온 중합을 시도한 경우가 있지만, 공액 구조의 π -전자 시스템이 갖는 특이적인 전자 환경 때문에 효과적인 중합 시스템으로 더 이상 발전하지는 못하였다⁸⁰⁻⁸⁵. 즉 전도성 고분자의 중합은 기본적인 화학 반응에서부터 비전도성 고분자의 중합과 차이가 있다고 할 수 있다.

이 절에서는 전통적인 전도성 고분자의 중합법과 현대 유기 화학 발전에 따른 변화, 그리고 전도성 고분자 합성 연구에서 초점을 맞추고 있는 중요한 요소들 및 최근 연구 동향에 대해 다루기로 한다.



1) 산화 중합(oxidative polymerization)

고전적으로 아닐린, 피롤, 티오펜 등의 방향족 고리 구조 단량체들은 전기적 또는 화학적 산화를 통해 중합되었다. 각 고분자마다 중합 메커니즘은 조금씩 다르고 확실히 밝혀지지 않은 것도 있지만 공통적으로 수소를 잃는 산화반응을 통한 축합 중합에 기반한다(그림 18). 폴리아닐린이나 폴리피롤 등 생성된 고분자들의 용해도가 좋은 편은 아니었기 때문에 중합 방법에 따라 얻어진 고분자의 전도성이 천차만별이었고, 비대칭 구조의 단량체의 경우 선택성이 낮은 고분자가 얻어지기도 하였다. 그러나 산업적 측면에서는 중합이 간편하고 대량 생산이 가능하다는 장점이 있어 원하는 성능과 분자량의 고분자를 합성할 수 있도록 중합 시스템이 최적화 되어있다.

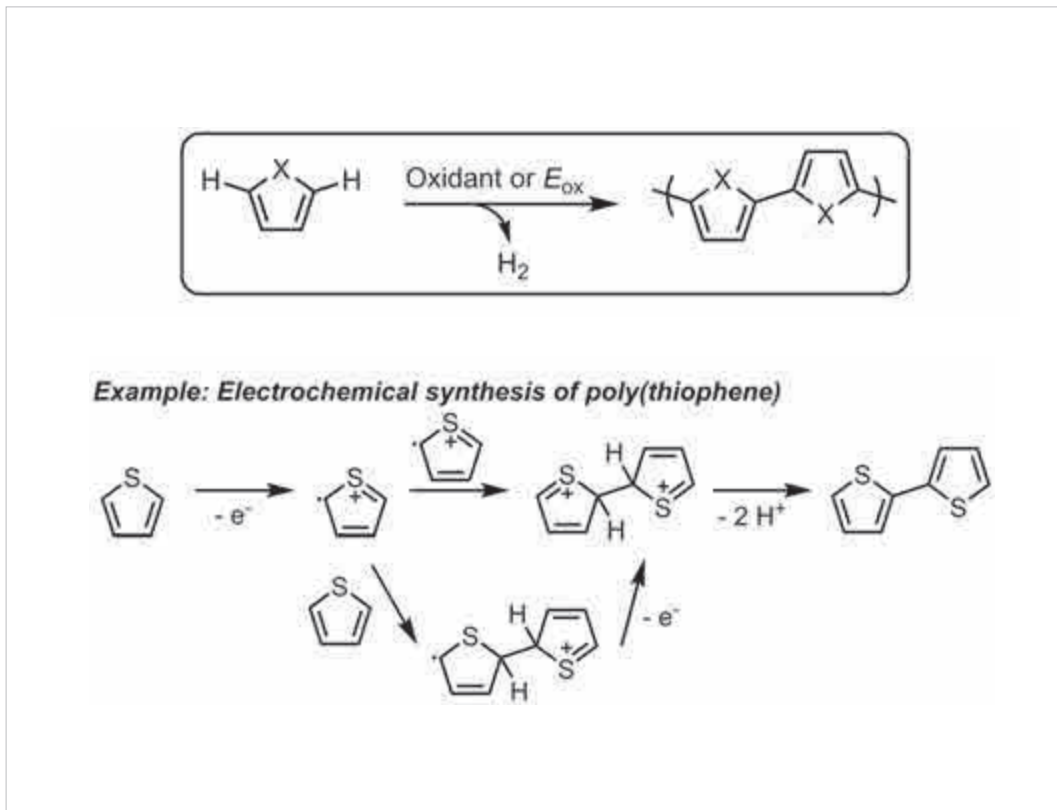


그림 18. 산화 중합의 개요 및 폴리티오펜의 전기화학 중합 메커니즘

2) 유기 금속 촉매를 이용한 탄소-탄소 결합 반응

현대 전도성 고분자 합성은 유기 금속 촉매 반응의 발달과 그 맥을 같이 한다. 앞서 언급한 바와 같이 할로젠 원소를 갖는 이중결합이나 방향족 구조는 친핵성 치환 반응을 할 수 없다. 그러나 전이금속 촉매 반응을 이용하면 그림 19와 같이 이러한 물질 간의 결합을 손쉽게 만들 수 있다. 2005년과 2010년 노벨 화학상으로 잘 알려진 “올레핀 복분해(olefin metathesis) 반응” 과 “교차 짝지음(cross-coupling) 반응”이 그것이다(그림 19). 특히 교차 짝지음 반응을 통해 구조적으로 균일한 P3HT의 중합이 가능해지면서 반도체 응용분야에 이용되는 고분자들의 연구가 크게 탄력을 받게 되었다^{86,87}. 3번 탄소 위치에 알킬기가 치환된 단량체를 고전적인 방식인 FeCl₃에 의한 산화 중합으로 합성하면 그림 20과 같이 head-to-tail(HT), head-to-head(HH), tail-to-tail(TT) 세 가지의 다른 반복 구조가 섞여있는 고분자를 얻게 된다. 그런데 이를 니켈 촉매를 이용한 짝지음 반응을 이용해 중합하면 매우 높은 비율로 HT 구조의 P3AT(HT-P3AT)를 얻을 수 있다. 이러한 방식을 잘 응용하면 단위체의 디자인에 따라 원하는 조합이 일정한 순서로 반복되는 복잡한 구조도 가능하다.

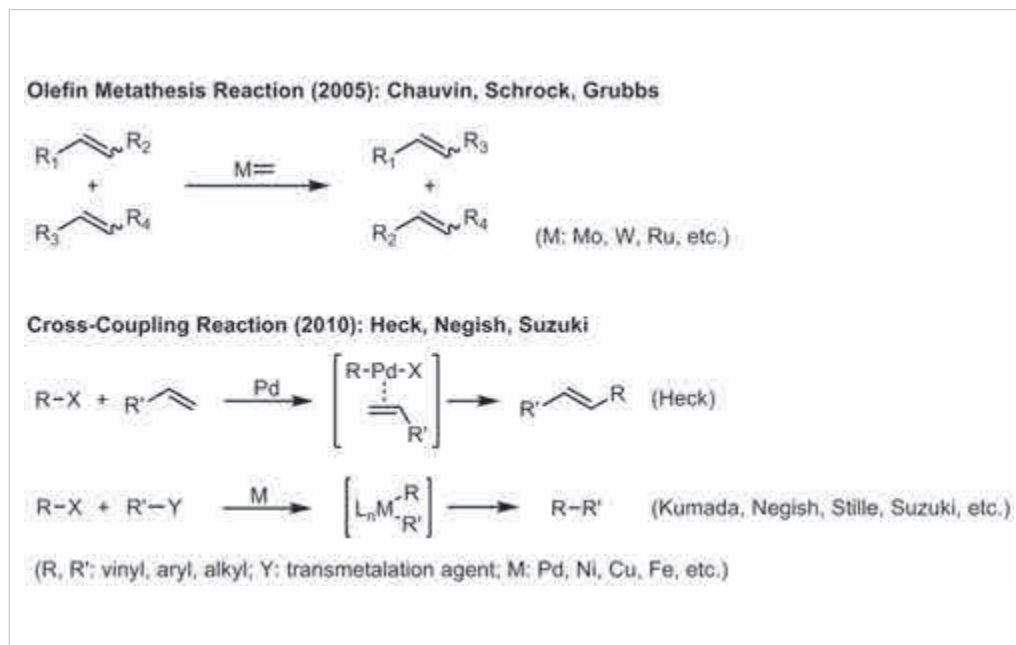


그림 19. 노벨 화학상을 수상한 올레핀 복분해 반응과 교차 짝지음 반응

• 전기가 흐르는 플라스틱, 세상을 바꾸어가다
 전도성 폴리머

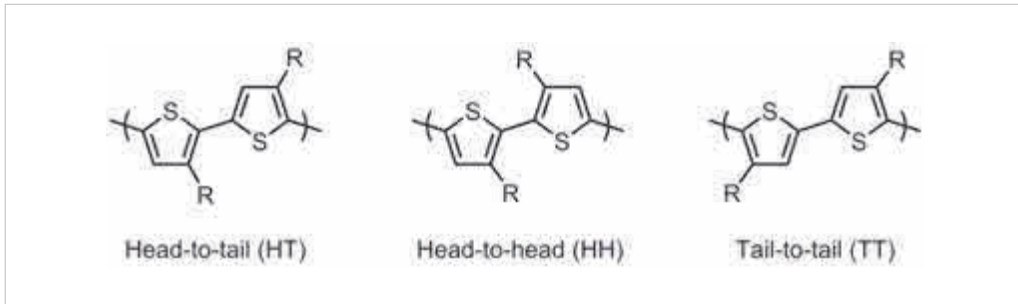


그림 20. 폴리티오펜의 치환기의 위치에 따른 사슬 구조 규칙성

규칙적인 구조의 P3AT는 그렇지 않은 고분자에 비해 자기조립 구조가 잘 형성되어 전기 전도성이 높다고 알려져 있다⁸⁸. OPV 소자에서도 마찬가지로, 높은 구조 균일성의 HT-P3HT가 랜덤한 P3HT보다 높은 전자 및 정공 이동도를 보인다(그림 21)⁸⁹.

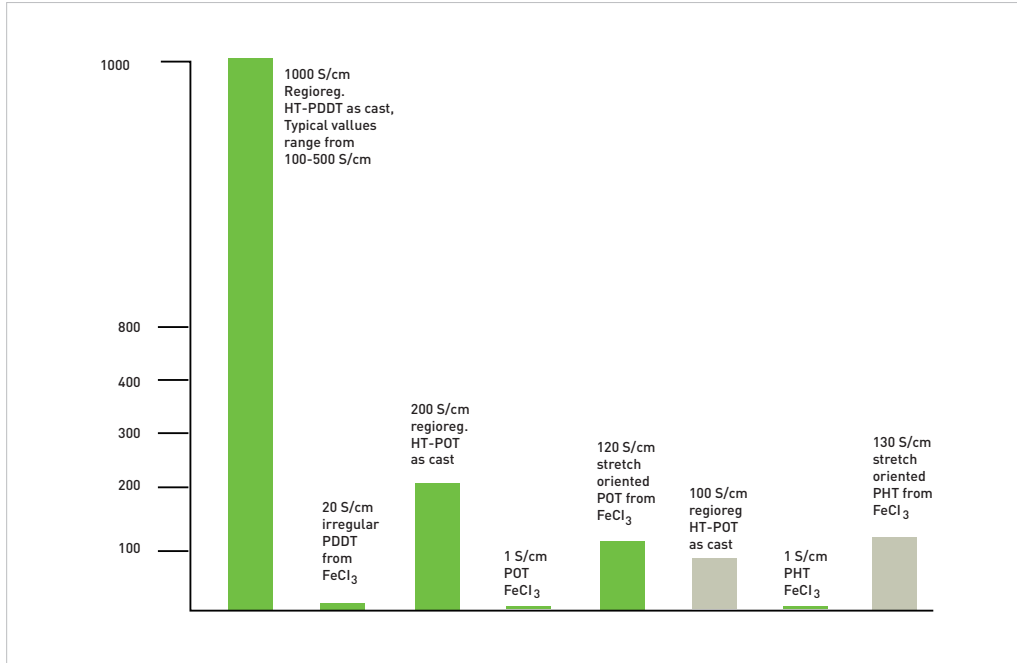


그림 21. Regioregularity에 따른 PA3T의 전기 전도성 차이⁸⁸

폴리파라페닐렌은 폴리피롤이나 폴리티오펜과 비슷한 구조임에도 교차 짝지음 반응을 통해 처음으로 중합될 수 있었던 전도성 고분자이다⁹⁰. 그 외에도 수 많은 방향족 고리 기반의 전도성 고분자들이 같은 방식을 통해 합성 될 수 있었고⁹¹, 이는 고분자 기반의 유기 전자 소자 연구의 귀중한 뒷받침이 되었다.

올레핀 복분해 반응은 탄소-탄소의 이중 결합을 끊고 새로운 이중 결합을 형성한다는 점에서 단위체에 비닐(vinyl)기를 갖는 전도성 고분자의 새로운 중합 방법을 많이 제시할 수 있었다. 대표적인 예로 1,3,5,7-cyclooctatetraene(COT)의 고리 구조를 열거나 아세틸렌 단량체의 중합을 이용한 폴리아세틸렌 유도체의 합성이 있다⁹²⁻⁹⁴. 또 단량체 양 끝의 이중 결합끼리 잇는 ADMET(acyclic diene metathesis polymerization)이나 이중결합을 갖고 있는 고리 구조의 단위체를 열어 중합하는 ROMP(ring-opening metathesis polymerization)을 이용해서 PPV 유도체들을 합성하는 연구가 최근에 속속들이 보고되어, 기존의 PPV 유도체 합성 연구의 관점을 새롭게 바꿀 수 있는 계기가 되었다(그림 22)⁹⁵⁻⁹⁸.

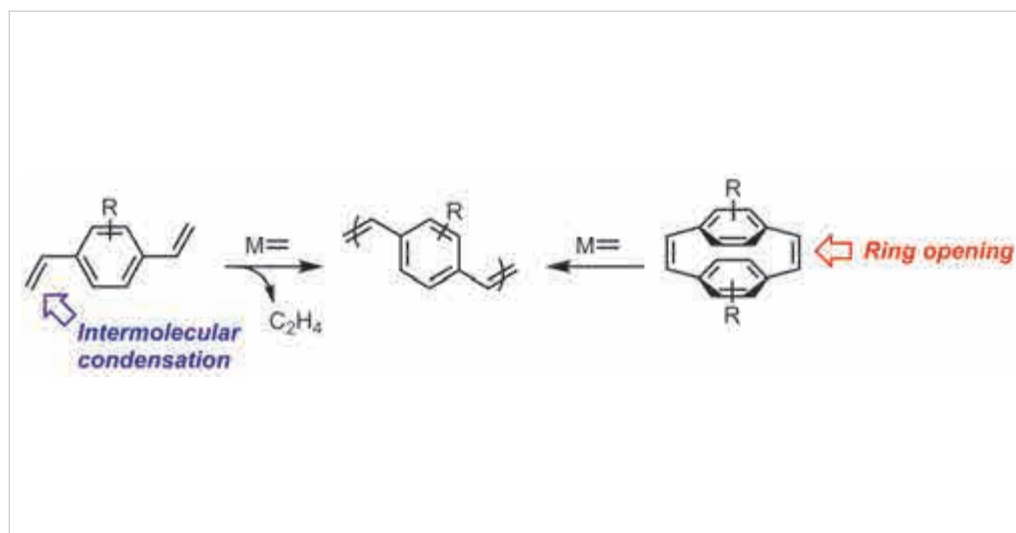


그림 22. 올레핀 복분해 반응을 이용한 PPV 유도체의 중합법

3) 단계 중합(step growth) vs. 사슬 중합(chain growth)

산화 중합법이나 전이 금속 촉매 반응을 이용한 전도성 고분자의 중합은 대개 축합 반응을 기반으로 하는 단계 중합 메커니즘을 따른다. 즉 단량체의 양 끝에 존재하는 두 반응기가 각각 다른 분자와 반응함으로써 고분자가 중합되는 방식이다. 그런데 이를 사슬 중합 메커니즘으로 바꾸면서 전도성 고분자 합성 연구에 중대한 전환점을 가져온 사례가 있다. McCullough에 의해 개발된 GRIM(Grignard metathesis) 중합이라는 이름으로 알려진 이 방법은, 앞서 언급한 규칙적인 구조의 P3HT를 합성하는 축합 반응을 연구하는 과정에서 개발되었다. 단량체 간의 결합이 마그네슘 할로젠 염을 내보내는 축합 반응이기 때문에 연구 초기 단계에는 단계 중합 메커니즘으로 추측하였으나, 2004년 Yokozawa 및 McCullough가 비슷한 시기에 분자량 및 분자량 분포 조절에 성공하면서 사슬 중합의 메커니즘이 확인되기 시작했다(그림 23)^{99,100}. 반응을 매개하는 촉매가 생성물에서 완전히 떨어져 나오지 않고 고분자 사슬과의 복합체를 유지하기 때문에 다음 단량체가 그대로 사슬 끝에서 반응하는 것이 특징이다. 이 반응은 P3HT뿐만 아니라 폴리파라페닐렌, 폴리플루오렌 등 다른 전도성 고분자들의 합성에서도 가능하다는 점이 밝혀졌다¹⁰¹. 또 Grignard 물질 뿐만 아니라 boronic ester를 이용한 반응으로도 연구가 되어, 전도성 고분자 합성 연구의 새로운 전환점을 가져왔다고 할 수 있다¹⁰².

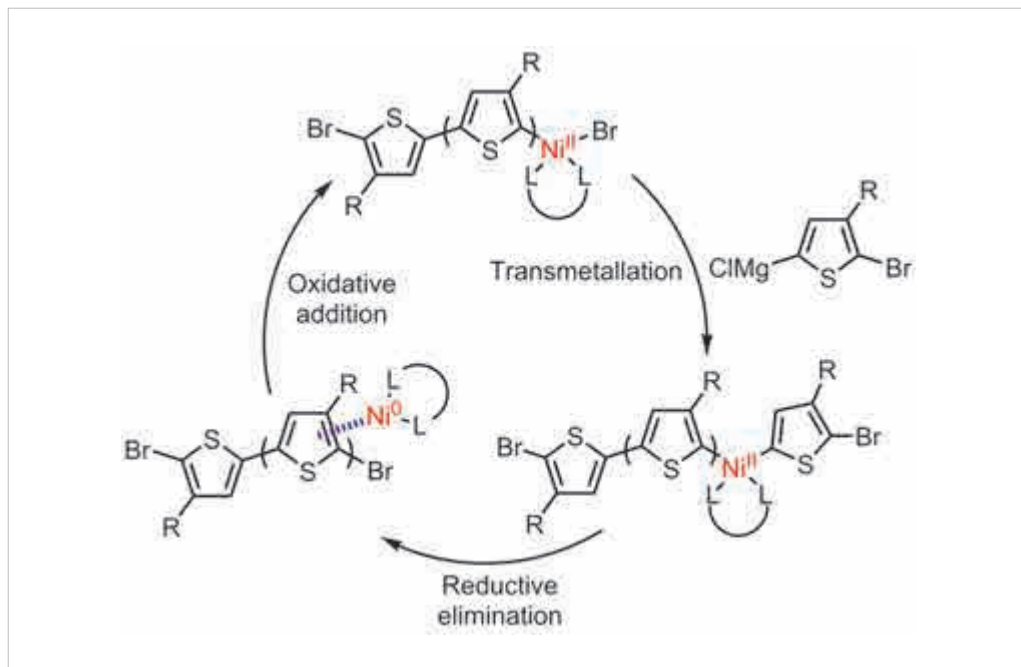


그림 23. GRIM 중합의 메커니즘

유기 반도체로서 널리 연구에 사용되는 여러 방향족 기반의 고분자를 사슬 중합 메커니즘으로 합성할 수 있다는 점이 시사하는 바는 대단히 크다. 일반적으로 고분자의 분자량이 조절되는 메커니즘은 단계 중합과 사슬 중합, 그리고 사슬 중합의 특별한 경우인 리빙 중합에 따라 각기 다르다. 중합 사슬의 끝이 계속 활성을 유지하는 리빙 중합은 분자량을 원하는 대로 조절하기에 적합할 뿐만 아니라 매우 좁은 분자량의 분포도를 구현할 수 있다(그림 24). 전기적/광학적 성질이 정교하게 조절되어야 하는 전도성 고분자의 활용 측면에서, 분자량과 그 분포의 조절은 소자의 성능과도 연결 되기 때문에 매우 중요한 이슈이다. 기관이나 탄소나노튜브 등의 표면의 전도성 고분자 브러시, 또는 다른 고분자의 치환기로 전도성 고분자를 도입한 그라프트(graft) 고분자들의 합성은 보다 다양한 형태의 기능성 물질을 제작할 수 있는 바탕이 된다(그림 25)¹⁰³⁻¹⁰⁶.

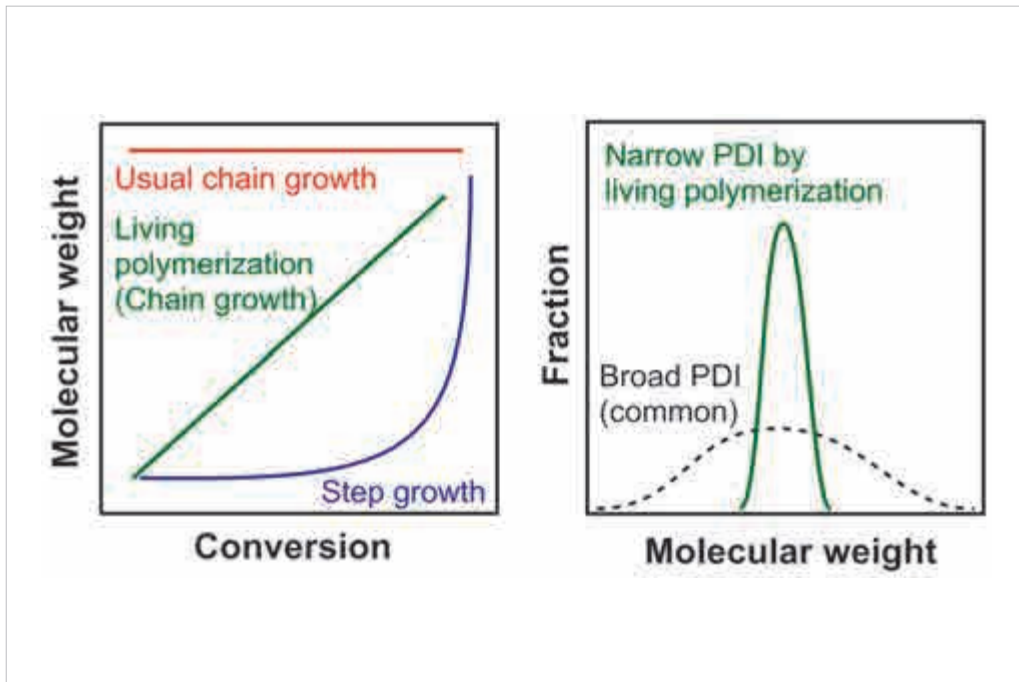


그림 24. 중합 방법에 따른 분자량 변화 및 분포

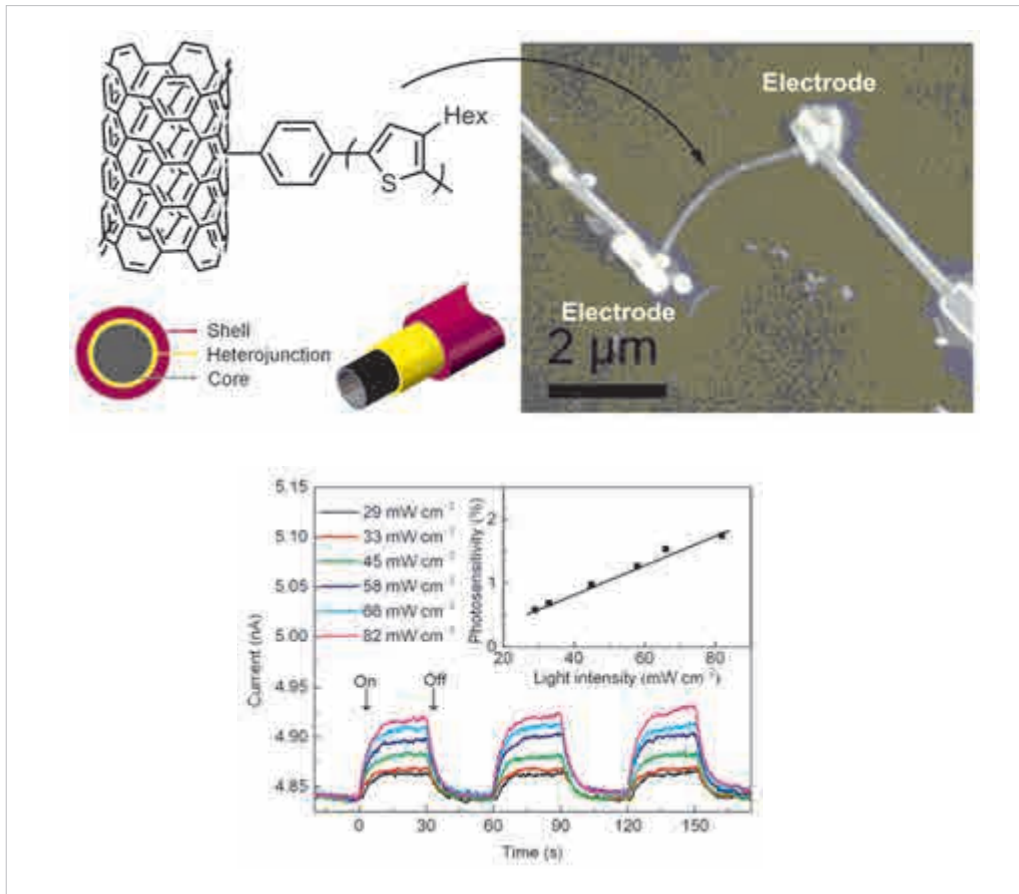


그림 25. 탄소나노튜브 위에 그래프팅된 P3HT와 빛의 유무에 따른 광전류(photocurrent)의 변화¹⁰⁶

4) 블록 공중합체(block copolymer) 및 자기 조립(self-assembly)

리빙 중합을 활용할 수 있는 예 중의 가장 대표적인 것이 블록 공중합체의 합성이다. 유기 전자 소자에서 고분자의 블록 공중합체를 이용하여 기대할 수 있는 효과 중 하나는 OPV 활성 층의 효율 증진이다. 즉 도너와 어셉터 물질의 블록 공중합체를 합성하여 두 물질이 섞여있는 구조(BHJ)와 전하 분리 및 이동도 등을 개선하는 것이다. OPV 소자에서 가장 많이 사용되고 있는 어셉터 물질은 풀러렌 유도체(PCBM)이다. 이를 도너 물질(전도성 고분자)과 섞어 BHJ 형태의 활성 층을 제작한 후 시간이 지나면 PCBM끼리 뭉쳐서 상분리가 일어나는 현상이 발생

하는데(phase segregation), 이는 소자의 장기적인 안정성 면에서 큰 결함이라고 할 수 있다. 상분리 현상은 근본적으로 두 물질이 섞여있는 상태가 에너지적으로 불안정하기 때문에 발생하는 것이므로, 이를 해결하기 위해 도너-어셉터 블록 공중합체를 적절히 이용하여 상분리를 막으려는 노력이 이루어졌다(그림 26)^{107,108}. PCBM의 분자 구조를 쉽게 변형하거나 합성하는 것이 어렵기 때문에 고분자 중합에 좀 더 적합한 형태인 페릴렌(perylene)이라는 분자를 어셉터로 사용한 블록 공중합체도 연구가 되었다^{109,110}. 이러한 블록 공중합체들은 그 자체로 활성층을 이루기도 하지만 도너와 어셉터 물질이 잘 섞이도록 도와주는 첨가제로 사용되기도 한다(그림 27)¹¹¹.

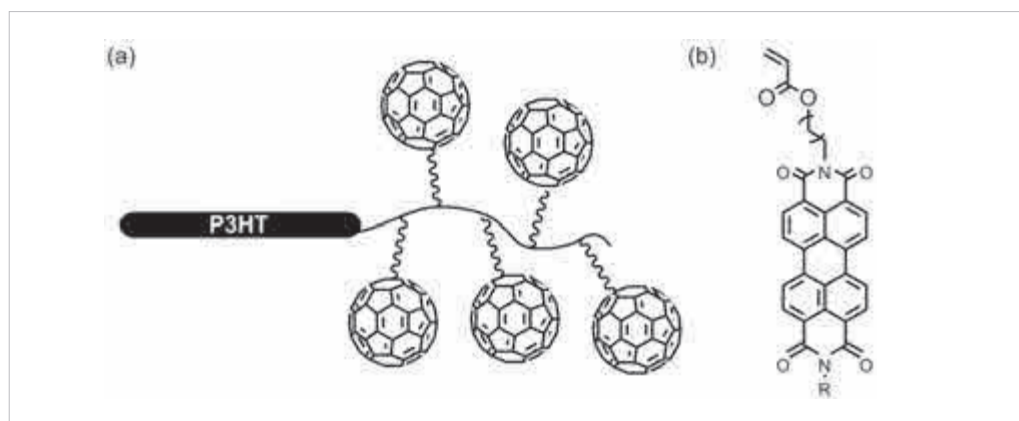


그림 26. (a) 도너-어셉터 블록 공중합체의 간단한 도식 (b) 페릴렌 단량체의 화학 구조

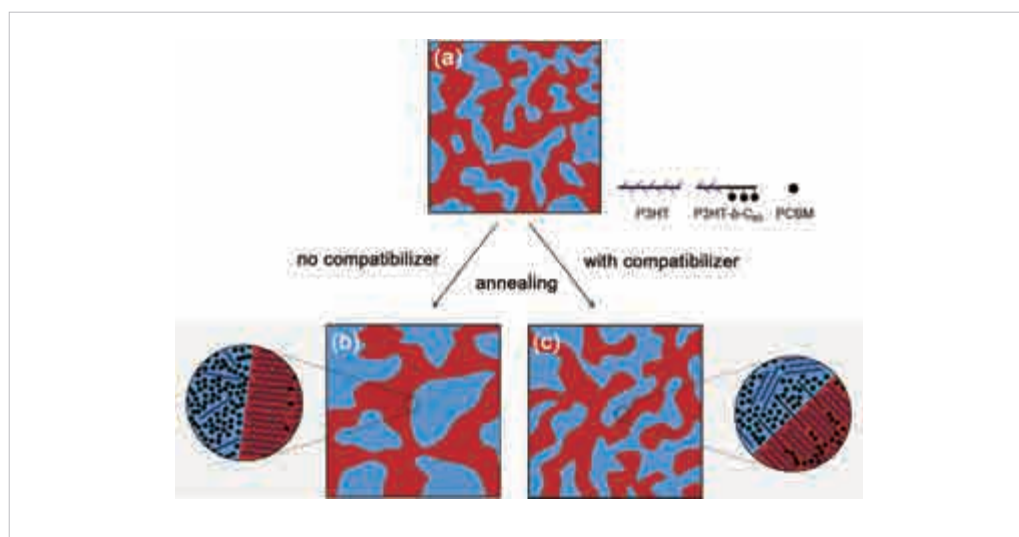


그림 27. 도너-어셉터 활성 층의 모폴로지에 블록 공중합체 첨가제가 미치는 영향의 모식도¹²

블록 공중합체의 큰 장점 중 하나는 마이셀(micelle), 베시클(vesicle), 라멜라(lamella) 등과 같은 자기조립 구조체를 형성할 수 있다는 점이다. 고분자의 자기조립에 의한 정교한 모폴로지 조절은 소자 효율 연구에서 장기적으로 추구해 나갈 방향이라 할 수 있다.

5) 용해도 및 치환기 효과

전도성 고분자 연구에서 중요한 이슈 중 하나는 용해도 문제이다. 잘 휘지 않는 사슬 구조와 강한 $\pi-\pi$ 상호작용 때문에 전도성 고분자들은 대체적으로 용매에 잘 녹지 않고, 가공이나 물성을 조절하기 어려운 경우가 많다. 그래서 보통 단량체에 용해도를 증가시킬 수 있는 치환기를 도입한 후 용액 상에서 중합하는데, 치환기의 종류에 따라서 사슬의 전자 밀도를 높이거나 낮추는 효과가 상당하다. 이 때문에 같은 중합법을 이용해도 단량체에 따라 중합 효율이 변하는 사례도 적지 않다. 고전도성 고분자들은 보통 치환기에 의한 전도도 감소율이 크기 때문에 잘 적용하지 않지만, 반도체 소자 연구에 응용되는 고분자들은 효과적인 가공성과 밴드 갭

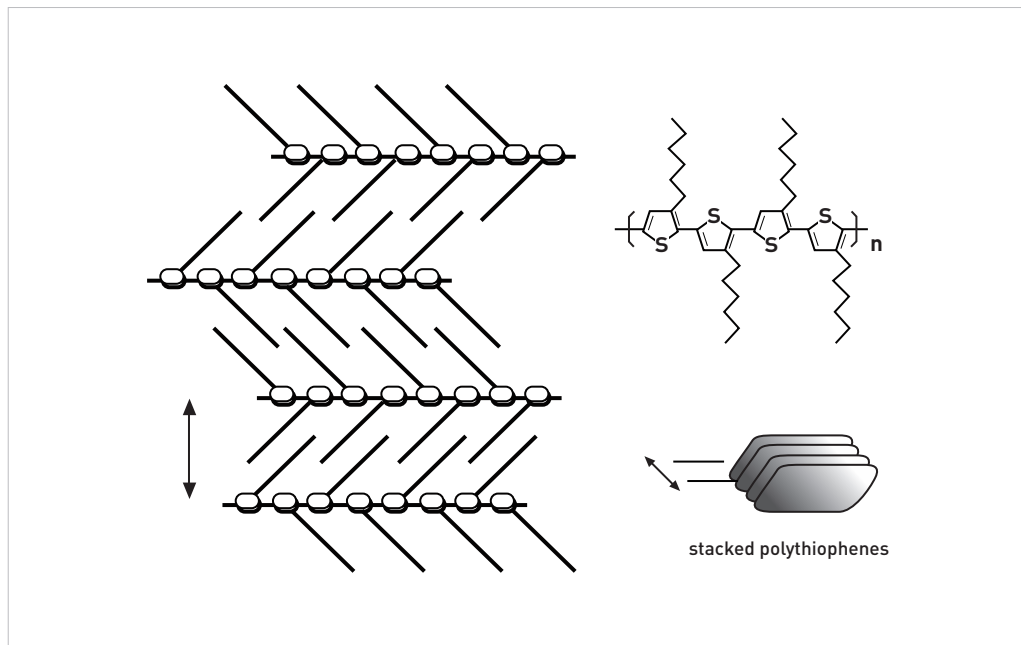


그림 28. 알킬기의 결정성에 따른 P3HT의 정렬 구조⁸⁸

및 모폴로지 조절 등을 위해 적절한 치환기를 도입하는 경우가 많다. 예를 들어 P3AT의 알킬 치환기는 유기 용매에 대한 고분자의 용해도를 증가시키기 위해 도입되었지만, 그림 28과 같이 고체 상태에서의 결정 구조 형성 및 자기조립 구조를 조절하는 역할도 갖는다.

단순한 용해도 증가를 넘어 기능성을 부여하는 치환기의 연구 전략도 활성화 되어있다¹¹³. 트리페닐아민(triphenylamine; TPA)이나 카바졸(carbazole)은 정공을 잘 생성하기 때문에 전자 공여체로서 OPV 등 소자 효율 증대를 꾀할 수 있다²¹. 때로는 부피가 매우 큰 덴드리머(dendrimer)나 고분자를 도입하여 고분자 단일 시슬의 구조 조절 및 효과적인 기능화 등을 도모하기도 한다¹¹⁴.

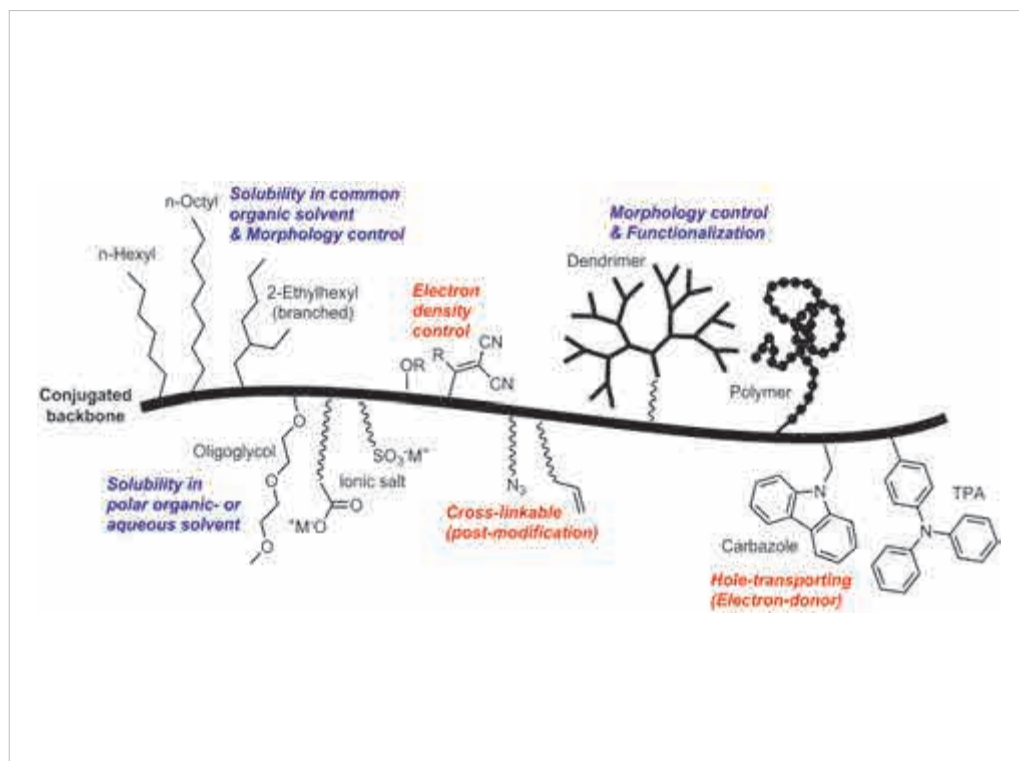


그림 29. 전도성 고분자 연구에서 응용되고 있는 다양한 치환기들의 목적 및 기능

맺음말: 전도성 고분자 연구의 한계와 전망

상업화를 위한 유기 태양 전지는 10%가 넘는 효율과 장기적 안정성이라는 기준을 갖고 있다. 미국의 국립 연구소인 NREL(National Renewable Energy Laboratory)에서 정기적으로 공시하는 유기 태양 전지 효율의 변화 추세를 살펴보면, 2012년경 10% 대 효율에 진입한 후 2016년에 접어들어 갱신되기 전 까지 괄목할 만한 급성장은 없었지만 전반적으로 효율 면에서의 성과는 어느 정도 이루어졌다고 할 수 있다.

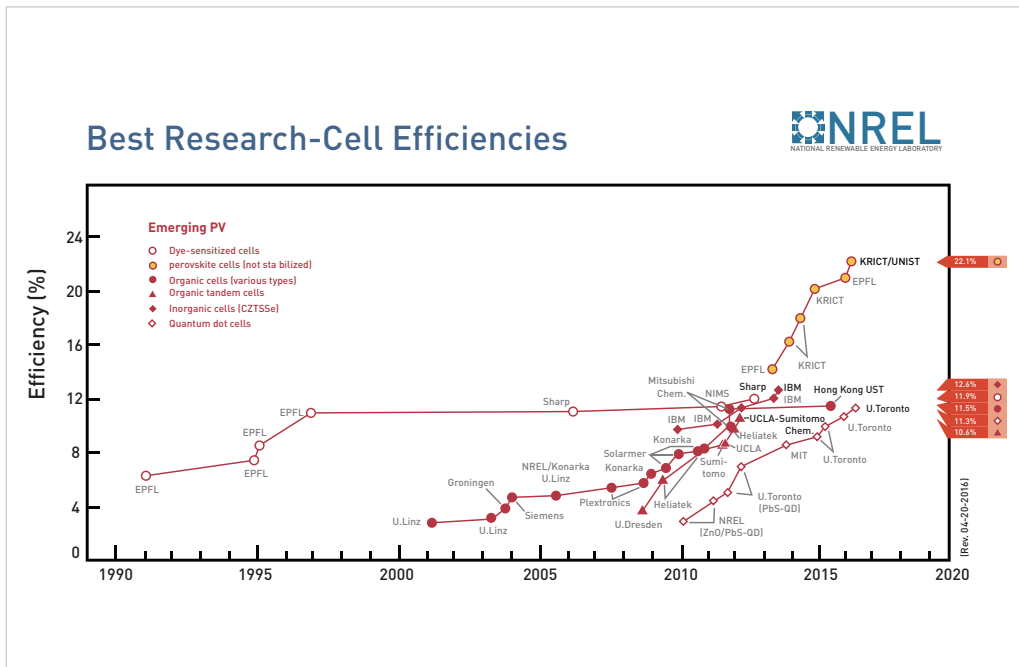


그림 30. 태양 전지 소자 효율 갱신 그래프

성공적으로 상업화 된 PEDOT:PSS를 제외하면 본문에서 언급한 전도성 고분자들은 사실 대기 및 열 안정성에서 자유롭지 못하다¹¹⁵. 공액 구조를 갖기 때문에 물과 산소에 대한 안정성이 결여될 수 밖에 없는 문제가 있으며, 탄소 기반의 고분자이므로 금속과 같이 높은 온도

에서 견디기도 어렵다. 또한 일정 온도 이상에서는 고분자의 모폴로지 변화가 일어나기 때문에 그에 따라 효율이 감소하기도 한다. 이러한 약점은 소자 제작 과정과 사용 주기 및 빈도에 따른 효율 감소의 원인이 되어 재현성 및 장기적 안정성에 큰 제한을 야기한다. 10%의 소자 효율을 달성했지만 여전히 완벽한 실용화가 어려운 것은 이러한 태생적 한계 때문일 것이다. 2008-2009년 당시 예측된 2016년 유기 태양 전지의 모습은 주거 건물에 고분자 태양 전지 패널이 부착될 정도의 상용화 수준이었지만¹¹⁶ 오늘날에도 많은 논문들과 기사에서 낮은 안정성을 근본적인 문제로 제시하는 것이 현실이다. 2001년 설립된 유기 태양 전지 회사인 Konarka사가 엄청난 기대를 받았음에도 불구하고 성공적인 실용화 사례를 만들지 못하고 2012년 부도를 맞이한 사례를 볼 때, 전도성 고분자가 가져온 희망찬 청사진이 구현되기까지는 우리가 생각했던 것 보다 훨씬 많은 연구가 필요할 것이라는 점을 생각하게 한다.

물론 다양한 방면에서 빛, 열, 대기 안정성을 증가시키면서 소자 효율을 오래 유지하고자 하는 노력들이 이루어지고 있다. 산소와 물의 침투를 막기 위해 일차적으로 적용되고 있는 방법은 소자 전체에 보호막 또는 차단막을 씌우는 방법이다¹¹⁷. 고전적으로는 유리 덮개나 금속을 접착제로 붙이는 방식이 적용되었지만 활성 층의 고분자 소재의 이점을 활용하기 어려웠고, 이를 대신하여 차단막이 되는 필름을 코팅하는 방법으로 연구가 진행되고 있다. 산소나 물 뿐만 아니라 금속 전극의 부식 역시 문제가 되었는데, 이를 획기적으로 개선한 것은 양극과 음극의 위치를 바꾼 역구조(inverted device geometry) 소자의 개발이었다¹¹⁸. 이러한 방법들은 roll-to-roll 공정에 적합한 형태로 발전할 수 있어 가볍고 유연한 소자 연구에 좋은 기반이 되고 있다. 그러나 보다 근본적인 해결책은 소재 자체의 변형을 막는 것으로부터 시작하여야 하며, 이를 위해 안정한 모폴로지와 화학 구조를 개발하는 최근 연구들이 눈에 띈다. 모폴로지 안정성을 위한 대표적인 방법은 다양한 형태의 분자간의 적절한 교차(cross-linking)를 이용하는 것이다^{119,120}. 전구체를 이용하여 직접적인 공유 결합 형성을 유도할 수도 있고, 안정한 나노 구조나 무기물과의 배위 결합 등 여러 전략이 가능하다. 재미있는 최근 연구 사례 중 하나는 고분자 활성 층을 어떤 기판과 물질에 도포하는가에 따라 모폴로지 안정성이 크게 영향을 받는다는 내용이다¹²¹. 이는 단일 물질의 벌크 성질뿐만 아니라

인터페이스에서 일어날 수 있는 현상의 중요성을 보여주는 사례로 안정성 연구의 새로운 관점을 보여준다. 화학 구조에 변형을 주어 안정성을 얻는 방법은 보통 전자 밀도에 영향을 주어 HOMO 및 LUMO 준위를 조절하는 방안을 취하고 있지만¹²²⁻¹²⁴, 분자 구조를 조절하여 공액 구조의 변형을 막는 전략들도 새롭게 등장하고 있다^{125,126}.

이러한 사례들을 볼 때, 오랜 시간 동안 충분한 소자 효율을 이루어 낸 연구 성과만큼 안정성 개선 역시 다양한 접근 방법과 시도를 통해 보다 창의적인 연구 결과가 도출 될 것으로 기대된다. 또 반도체 소자 전반에서 굉장히 복잡한 문제였던 전하 분리와 이동, 재결합 등의 메커니즘이 점점 밝혀지고 있는 최근 연구 결과들을 기반으로 기존에 제시할 수 없었던 새로운 아이디어들이 등장할 수 있을 것이다. 물질의 근본적인 성질을 이해하고 접근하는 기초 과학과 창의적인 소자 엔지니어링의 지속적인 교류 및 활발한 공동 연구를 통해 문제점을 바라본다면 기술의 전환점이 오는 시기가 결코 멀지 않을 것으로 전망한다.



강은혜 Eun-Hye Kang

학 력

- 서울대학교 화학부 박사
- 서울대학교 화학부 학사

경 력

- 現) UC Berkeley, College of Chemistry 포스닥

참고문헌

1. Heeger, A. J. Semiconducting and Metallic Polymers: The Fourth Generation of Polymeric Materials. *J. Phys. Chem. B* 105, 8475-8491 (2001).
 2. Scott, J. C. History of Conductive Polymers. In *Nanostructured Conduct. Polym.* (Eftekhari, A.) 1-17 (John Wiley & Sons, Ltd, West Sussex, 2010).
 3. Shirakawa, H. Synthesis and characterization of highly conducting polyacetylene. *Synth. Met.* 69, 3-8 (1995).
 4. Saxman, A. M., Liepins, R. & Aldissi, M. Polyacetylene: Its synthesis, doping and structure. *Prog. Polym. Sci.* 11, 57-89 (1985).
 5. Shirakawa, H. & Ikeda, S. Infrared Spectra of Poly(acetylene). *Polym. J.* 2, 231-244 (1971).
 6. Ito, T., Shirakawa, H. & Ikeda, S. Simultaneous polymerization and formation of polyacetylene film on the surface of concentrated soluble Ziegler-type catalyst solution. *J. Polym. Sci. Polym. Chem. Ed.* 12, 11-20 (1974).
 7. Shirakawa, H., Ito, T. & Ikeda, S. Electrical properties of polyacetylene with various cis-trans compositions. *Die Makromol. Chemie* 179, 1565-1573 (1978).
 8. Shirakawa, H., Louis, E. J., MacDiarmid, A. G., Chiang, C. K. & Heeger, A. J. Synthesis of electrically conducting organic polymers: halogen derivatives of polyacetylene, (CH)_x. *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 578 (1977).
 9. Naarmann, H. & Theophilou, N. New process for the production of metal-like, stable polyacetylene. *Synth. Met.* 22, 1-8 (1987).
 10. Tsukamoto, J. et al. Structure and Electrical Properties of Polyacetylene Yielding a Conductivity of 10⁵ S/cm. *Jpn. J. Appl. Phys.* 29, 125-130 (1990).
 11. Yen, S. P. S., Somoano, R., Khanna, S. K. & Rembaum, A. Stability of polyacetylene films. *Solid State Commun.* 36, 339-343 (1980).
 12. Heeger, A. J. Semiconducting polymers: the Third Generation. *Chem. Soc. Rev.* 39, 2354 (2010).
 13. Roth, S. & Carroll, D. Conducting polymers: Solitons and Polarons. In *One-Dimensional Met. Conjug. Polym. Org. Crystals, Carbon Nanotub.* 85-112 (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2005).
 14. Pron, A. & Rannou, P. Processible conjugated polymers: from organic semiconductors to organic metals and superconductors. *Prog. Polym. Sci.* 27, 135-190 (2002).
 15. Bredas, J. L. & Street, G. B. Polarons, bipolarons, and solitons in conducting polymers. *Acc. Chem. Res.* 18, 309-315 (1985).
-

참고문헌

16. Heeger, A. J., Kivelson, S., Schrieffer, J. R. & Su, W.-P. Solitons in conducting polymers. *Rev. Mod. Phys.* 60, 781-850 (1988).
 17. MacDiarmid, A. G. & Epstein, A. J. Polyanilines: a novel class of conducting polymers. *Faraday Discuss. Chem. Soc.* 88, 317 (1989).
 18. Zaumseil, J. & Sirringhaus, H. Electron and Ambipolar Transport in Organic Field-Effect Transistors. *Chem. Rev.* 107, 1296-1323 (2007).
 19. Sauvajol, J. L., Chenouni, D., Hasoon, S. & Lère-Porte, J. P. Photoluminescence in polythiophene and polyselenophene. *Synth. Met.* 28, 293-297 (1989).
 20. Patra, A. et al. Polyselenophenes. *J. Mater. Chem.* 20, 422-433 (2010).
 21. Wang, H.-J., Chen, C.-P. & Jeng, R.-J. Polythiophenes Comprising Conjugated Pendants for Polymer Solar Cells: A Review. *Materials* 7, 2411-2439 (2014).
 22. Dang, M. T., Hirsch, L., Wantz, G. & Wuest, J. D. Controlling the Morphology and Performance of Bulk Heterojunctions in Solar Cells. Lessons Learned from the Benchmark Poly(3-hexylthiophene):[6,6]-Phenyl-C61-butyric Acid Methyl Ester System. *Chem. Rev.* 113, 3734-3765 (2013).
 23. Collini, E. & Scholes, G. D. Coherent intrachain energy migration in a conjugated polymer at room temperature. *Science* 323, 369-73 (2009).
 24. Kline, R. J. & McGehee, M. D. Morphology and Charge Transport in Conjugated Polymers. *J. Macromol. Sci. Part C Polym. Rev.* 46, 27-45 (2006).
 25. Shirota, Y. & Kageyama, H. Charge Carrier Transporting Molecular Materials and Their Applications in Devices. *Chem. Rev.* 107, 953-1010 (2007).
 26. Kim, J. Y. et al. Efficient tandem polymer solar cells fabricated by all-solution processing. *Science* 317, 222-5 (2007).
 27. 원영무. 전도성 고분자재료의 개발동향과 응용. (2015).
 28. Elschner, A., Kirchmeyer, S., Lovenich, W., Merker, U. & Reuter, K. The Discovery and Development of Conducting Polymers. In *PEDOT Princ. Appl. an Intrinsically Conduct. Polym.* 1-20 (Taylor & Francis Group, Boca Raton, 2010).
 29. Letheby, H. On the production of a blue substance by the electrolysis of sulphate of aniline. *J. Chem. Soc.* 15, 161-163 (1862).
 30. Mohilner, D. M., Adams, R. N. & Argersinger, W. J. Investigation of the Kinetics and Mechanism of the Anodic Oxidation of Aniline in Aqueous Sulfuric Acid Solution at a Platinum Electrode. *J. Am. Chem. Soc.* 84, 3618-3622 (1962).
-

참고문헌

31. Honzl, J. & Tlustáková, M. Polyaniline compounds. II. The linear oligoaniline derivatives tri-, tetra-, and hexaanilinobenzene and their conductive complexes. *J. Polym. Sci. Part C Polym. Symp.* 22, 451-462 (1968).
 32. Geniès, E. M., Boyle, A., Lapkowski, M. & Tsintavis, C. Polyaniline: A historical survey. *Synth. Met.* 36, 139-182 (1990).
 33. Lee, C. W., Chi, K.-W. & Jeong, H. M. Synthesis and Application of the Real Metallic Polyaniline. *Polym. Sci. Technol.* 18, 32-38 (2007).
 34. Mcneill, R., Siudak, R., Wardlaw, J. H. & Weiss, D. E. ELECTRONIC CONDUCTION IN POLYMERS I. THE CHEMICAL STRUCTURE OF POLYPYRROLE. *Australian J. Chem.* 16, 1056-1075 (1963).
 35. Dall'Olio, A., Dascola, G., Varacca, V. & Bocchi, V. Electron paramagnetic resonance and conductivity of an electrolytic oxypyrrole [(pyrrole polymer)] black. *Comptes Rendus des Seances l'Academie des Sci. Ser. C Sci. Chim.* 267, 433-435 (1968).
 36. Kanazawa, K. K. et al. 'Organic metals': polypyrrole, a stable synthetic 'metallic' polymer. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 854-855 (1979).
 37. Vernitskaya, T. V & Efimov, O. N. Polypyrrole: a conducting polymer; its synthesis, properties and applications. *Russ. Chem. Rev.* 66, 443-457 (1997).
 38. Ateh, D. D., Navsaria, H. A. & Vadgama, P. Polypyrrole-based conducting polymers and interactions with biological tissues. *J. R. Soc. Interface* 3, 741-52 (2006).
 39. Omastová, M. & Mičušík, M. Polypyrrole coating of inorganic and organic materials by chemical oxidative polymerisation. *Chem. Pap.* 66, (2012).
 40. Yoon, C. O., M., R., Moses, D. & Heeger, A. J. Transport near the metal-insulator transition: Polypyrrole doped with PF6. *Phys. Rev. B* 49, 10851-10863 (1994).
 41. Lee, K. et al. Metallic transport in polyaniline. *Nature* 441, 65-68 (2006).
 42. Liu, T. et al. Polyaniline and Polypyrrole Pseudocapacitor Electrodes with Excellent Cycling Stability. *Nano Lett.* 14, 2522-2527 (2014).
 43. MacDiarmid, A. G. 'Synthetic Metals': A Novel Role for Organic Polymers (Nobel Lecture). *Angew. Chemie Int. Ed.* 40, 2581-2590 (2001).
 44. Feldhues, M., Kämpf, G., Litterer, H., Mecklenburg, T. & Wegener, P. Polyalkyloxythiophenes soluble electrically conducting polymers. *Synth. Met.* 28, 487-493 (1989).
 45. Hagiwara, T., Yamaura, M., Sato, K., Hirasaka, M. & Iwata, K. Synthesis and properties of poly(3,4-dimethoxythiophene). *Synth. Met.* 32, 367-379 (1989).
-

참고문헌

46. Jonas, F., Heywang, G. & Werner, S. Novel polythiophenes, process for their preparation, and their use. DE Patent 3813589 A1, filed 22 Apr. 1988, and issued 2 Nov. 1989.
 47. Mike, J. F. & Lutkenhaus, J. L. Recent advances in conjugated polymer energy storage. *J. Polym. Sci. Part B Polym. Phys.* 51, 468-480 (2013).
 48. Sengodu, P. et al. Conducting polymers and their inorganic composites for advanced Li-ion batteries: a review. *RSC Adv.* 5, 42109-42130 (2015).
 49. [online] Available at: <http://www.heraeus-clevios.com>
 50. Braun, D. & Heeger, A. J. Visible light emission from semiconducting polymer diodes. *Appl. Phys. Lett.* 58, 1982 (1991).
 51. Burroughes, J. H. et al. Light-emitting diodes based on conjugated polymers. *Nature* 347, 539-541 (1990).
 52. Grem, G., Leditzky, G., Ullrich, B. & Leising, G. Realization of a blue-light-emitting device using poly(p-phenylene). *Adv. Mater.* 4, 36-37 (1992).
 53. Ohmori, Y. et al. Visible-Light Electroluminescent Diodes Utilizing Poly(3-alkylthiophene). *Jpn. J. Appl. Phys.* 30, L1938-L1940 (1991).
 54. Greenham, N. C., Moratti, S. C., Bradley, D. D. C., Friend, R. H. & Holmes, A. B. Efficient light-emitting diodes based on polymers with high electron affinities. *Nature* 365, 628-630 (1993).
 55. Sekine, C., Tsubata, Y., Yamada, T., Kitano, M. & Doi, S. Recent progress of high performance polymer OLED and OPV materials for organic printed electronics. *Sci. Technol. Adv. Mater* 15, 034203 (2014).
 56. Barford, W. Light emitting polymers. In *Electron. Opt. Prop. Conjug. Polym.* 187-222 (Oxford University Press, New York, 2005).
 57. Grimsdale, A. C., Leok Chan, K., Martin, R. E., Jokisz, P. G. & Holmes, A. B. Synthesis of Light-Emitting Conjugated Polymers for Applications in Electroluminescent Devices. *Chem. Rev.* 109, 897-1091 (2009).
 58. Ragni, R., Operamolla, a. & Farinola, G. M. Synthesis of electroluminescent conjugated polymers for OLEDs. In *Org. Light. Diodes* 3-48 (Woodhead Publishing, Philadelphia, 2013).
 59. Bernius, M. T., Inbasekaran, M., O'Brien, J. & Wu, W. Progress with Light-Emitting Polymers. *Adv. Mater.* 12, 1737-1750 (2000).
 60. White, M. S. et al. Ultrathin, highly flexible and stretchable PLEDs. *Nat. Photonics* 7, 811-816 (2013).
-

61. Zheng, H. et al. All-solution processed polymer light-emitting diode displays. *Nat. Commun.* 4, (2013).
62. Dang, M. T., Hirsch, L. & Wantz, G. P3HT:PCBM, Best Seller in Polymer Photovoltaic Research. *Adv. Mater.* 23, 3597-3602 (2011).
63. Singh, R. P. & Kushwaha, O. S. Polymer Solar Cells: An Overview. *Macromol. Symp.* 327, 128-149 (2013).
64. Brabec, C. J. et al. Polymer-Fullerene Bulk-Heterojunction Solar Cells. *Adv. Mater.* 22, 3839-3856 (2010).
65. Kularatne, R. S., Magurudeniya, H. D., Sista, P., Biewer, M. C. & Stefan, M. C. Donor-acceptor semiconducting polymers for organic solar cells. *J. Polym. Sci. Part A Polym. Chem.* 51, 743-768 (2013).
66. Dou, L., Liu, Y., Hong, Z., Li, G. & Yang, Y. Low-Bandgap Near-IR Conjugated Polymers/Molecules for Organic Electronics. *Chem. Rev.* 115, 12633-12665 (2015).
67. Green, M. A., Emery, K., Hishikawa, Y., Warta, W. & Dunlop, E. D. Solar cell efficiency tables (version 47). *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* 24, 3-11 (2016).
68. Hu, H. et al. Terthiophene-Based D-A Polymer with an Asymmetric Arrangement of Alkyl Chains That Enables Efficient Polymer Solar Cells. *J. Am. Chem. Soc.* 137, 14149-14157 (2015).
69. He, Z. et al. Enhanced power-conversion efficiency in polymer solar cells using an inverted device structure. *Nat. Photonics* 6, 593-597 (2012).
70. You, J. et al. A polymer tandem solar cell with 10.6% power conversion efficiency. *Nat. Commun.* 4, 1446 (2013).
71. Amin, A. Y., Khassanov, A., Reuter, K., Meyer-Friedrichsen, T. & Halik, M. Low-Voltage Organic Field Effect Transistors with a 2-Tridecyl[1]benzothieno[3,2-b][1]benzothiophene Semiconductor Layer. *J. Am. Chem. Soc.* 134, 16548-16550 (2012).
72. Singh, T. B. & Sariciftci, N. S. PROGRESS IN PLASTIC ELECTRONICS DEVICES. *Annu. Rev. Mater. Res.* 36, 199-230 (2006).
73. Li, J. et al. A stable solution-processed polymer semiconductor with record high-mobility for printed transistors. *Sci. Rep.* 2, 3-24 (2012).
74. Sirringhaus, H. 25th Anniversary Article: Organic Field-Effect Transistors: The Path Beyond Amorphous Silicon. *Adv. Mater.* 26, 1319-1335 (2014).
75. Nielsen, C. B., Turbiez, M. & McCulloch, I. Recent Advances in the Development of Semiconducting DPP-Containing Polymers for Transistor Applications. *Adv. Mater.* 25, 1859-1880 (2013).

참고문헌

76. Noriega, R. et al. A general relationship between disorder, aggregation and charge transport in conjugated polymers. *Nat. Mater.* 12, 1038-1044 (2013).
 77. Venkateshvaran, D. et al. Approaching disorder-free transport in high-mobility conjugated polymers. *Nature* 515, 384-388 (2014).
 78. Yamashita, Y. et al. Mobility Exceeding $10 \text{ cm}^2 / \text{V} \cdot \text{s}$ in Donor-Acceptor Polymer Transistors with Band-like Charge Transport. *Chem. Mater.* 28, 420-424 (2016).
 79. Tseng, H.-R. et al. High-Mobility Field-Effect Transistors Fabricated with Macroscopic Aligned Semiconducting Polymers. *Adv. Mater.* 26, 2993-2998 (2014).
 80. Lee, B. E. & North, A. M. The polymerization of substituted acetylenes. Part I. The cationic polymerization of phenylacetylene. *Die Makromol. Chemie* 79, 135-148 (1964).
 81. Berlin, A. A., Kadantseva, A. I., Mukhin, M. A. & Ivanov, A. A. Investigation of the anionic polymerization of phenylacetylene in the presence of lithium initiators. *Polym. Sci. U.S.S.R.* 17, 942-947 (1975).
 82. Geiderikh, M. A., Davydov, B. E., Zaloznaya, N. F. & Minayeva, V. S. Kinetics of the anionic polymerization of phenylacetylene. *Polym. Sci. U.S.S.R.* 18, 1451-1457 (1976).
 83. Amdur, S., Cheng, A. T. Y., Wong, C. J., Ehrlich, P. & Allendoerfer, R. D. Free-radical polymerization of phenylacetylene. *J. Polym. Sci. Polym. Chem. Ed.* 16, 407-414 (1978).
 84. Narita, T., Hagiwara, T., Hamana, H., Yoshizawa, M. & Nishimura, S. Anionic polymerization of hexafluoro-2-butyne. *Die Makromol. Chemie, Rapid Commun.* 13, 189-194 (1992).
 85. Kobryanskii, V. M. Mechanism of anionic (ionic) polymerization of acetylene monomers. *Makromol. Chemie. Macromol. Symp.* 67, 261-275 (1993).
 86. McCullough, R. D. et al. Enhanced electrical conductivity in regioselectively synthesized poly(3-alkylthiophenes). *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 88, 70 (1992).
 87. Chen, T. A. & Rieke, R. D. The first regioregular head-to-tail poly(3-hexylthiophene-2,5-diyl) and a regiorandom isopolymer: nickel versus palladium catalysis of 2(5)-bromo-5(2)-(bromozincio)-3-hexylthiophene polymerization. *J. Am. Chem. Soc.* 114, 10087-10088 (1992).
 88. McCullough, R. D. The Chemistry of Conducting Polythiophenes. *Adv. Mater.* 10, 93-116 (1998).
 89. Mauer, R., Kastler, M. & Laquai, F. The Impact of Polymer Regioregularity on Charge Transport and Efficiency of P3HT:PCBM Photovoltaic Devices. *Adv. Funct. Mater.* 20, 2085-2092 (2010).
 90. Yamamoto, T. & Yamamoto, A. A NOVEL TYPE OF POLYCONDENSATION OF POLYHALOGENATED ORGANIC AROMATIC COMPOUNDS PRODUCING THERMOSTABLE POLYPHENYLENE TYPE POLYMERS PROMOTED BY NICKEL COMPLEXES. *Chem. Lett.* 353-356 (1977).
-

91. Yamamoto, T. Organometallic Polycondensation for Conjugated Polymers. In *Conjugated Polymer Synthesis* (Chujo, Y) 1-33 (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2010).
 92. Masuda, T. & Zhang, A. Polymerization of Substituted Acetylenes. In *Handbook of Metathesis second edition Volume 3: Polymer Synthesis* (eds. Grubbs, R. H. & Khosravi, E.) 375-390 (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2015).
 93. Ginsburg, E. J., Gorman, C. B., Marder, S. R. & Grubbs, R. H. Poly(trimethylsilylcyclooctatetraene): a soluble conjugated polyacetylene via olefin metathesis. *J. Am. Chem. Soc.* 111, 7621-7622 (1989).
 94. Wallace, K. C., Liu, A. H., Davis, W. M. & Schrock, R. R. Living polymerization of 2-butyne using a well-characterized tantalum catalyst. *Organometallics* 8, 644-654 (1989).
 95. Schlick, H., Stelzer, F., Tasch, S. & Leising, G. Highly luminescent poly[(m-phenylenevinylene)-co-(p-phenylenevinylene)] derivatives synthesized via metathesis condensation (ADMET). *J. Mol. Catal. A Chem.* 160, 71-84 (2000).
 96. Nomura, K., Miyamoto, Y., Morimoto, H. & Geerts, Y. Acyclic diene metathesis polymerization of 2,5-dialkyl-1,4-divinylbenzene with molybdenum or ruthenium catalysts: Factors affecting the precise synthesis of defect-free, high-molecular-weight trans-poly(p-phenylenevinylene)s. *J. Polym. Sci. Part A Polym. Chem.* 43, 6166-6177 (2005).
 97. Yu, C.-Y. & Turner, M. L. Soluble Poly(p-phenylenevinylene)s through Ring-Opening Metathesis Polymerization. *Angew. Chemie Int. Ed.* 45, 7797-7800 (2006).
 98. Menk, F. et al. Synthesis of Functional Block Copolymers Carrying One Poly(p-phenylenevinylene) and One Nonconjugated Block in a Facile One-Pot Procedure. *Macromolecules* 49, 2085-2095 (2016).
 99. Yokoyama, A., Miyakoshi, R. & Yokozawa, T. Chain-Growth Polymerization for Poly(3-hexylthiophene) with a Defined Molecular Weight and a Low Polydispersity. *Macromolecules* 37, 1169-1171 (2004).
 100. Sheina, E. E., Liu, J., Iovu, M. C., Laird, D. W. & McCullough, R. D. Chain Growth Mechanism for Regioregular Nickel-Initiated Cross-Coupling Polymerizations. *Macromolecules* 37, 3526-3528 (2004).
 101. Okamoto, K. et al. Controlled polymerizations for the synthesis of semiconducting conjugated polymers. *Polym. Chem.* 2, 2424 (2011).
 102. Yokozawa, T. Catalyst-Transfer Condensation Polymerization for Precision Synthesis of π -Conjugated Polymers. In *Conjugated Polymer Synthesis: Methods and Reactions* (Chujo, Y) 35-58 (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Boschstr, 2010).
-

참고문헌

103. Marshall, N., Sontag, S. K. & Locklin, J. Substituted Poly(p-phenylene) Thin Films via Surface-Initiated Kumada-Type Catalyst Transfer Polycondensation. *Macromolecules* 43, 2137-2144 (2010).
 104. Stefopoulos, A. A., Chochos, C. L., Bokias, G. & Kallitsis, J. K. The Role of Intrachain and Interchain Interactions of Regioregular Poly(3-octylthiophene) Chains on the Optical Properties of a New Amphiphilic Conjugated Random Copolymer in Solution. *Langmuir* 24, 11103-11110 (2008).
 105. Khanduyeva, N. et al. Surface Engineering Using Kumada Catalyst-Transfer Polycondensation (KCTP): Preparation and Structuring of Poly(3-hexylthiophene)-Based Graft Copolymer Brushes. *J. Am. Chem. Soc.* 131, 153-161 (2009).
 106. Hou, W. et al. Controlled Growth of Well-Defined Conjugated Polymers from the Surfaces of Multiwalled Carbon Nanotubes: Photoresponse Enhancement via Charge Separation. *ACS Nano* 10, 5189-5198 (2016).
 107. Yassar, A., Miozzo, L., Girona, R. & Horowitz, G. Rod-coil and all-conjugated block copolymers for photovoltaic applications. *Prog. Polym. Sci.* 38, 791-844 (2013).
 108. Topham, P. D., Parnell, A. J. & Hiorns, R. C. Block copolymer strategies for solar cell technology. *J. Polym. Sci. Part B Polym. Phys.* 49, 1131-1156 (2011).
 109. Nakabayashi, K. & Mori, H. Donor-Acceptor Block Copolymers: Synthesis and Solar Cell Applications. *Materials* 7, 3274-3290 (2014).
 110. Sommer, M. et al. Donor-acceptor block copolymers for photovoltaic applications. *J. Mater. Chem.* 20, 10788 (2010).
 111. Liao, H.-C., Chen, P.-H., Chang, R. & Su, W.-F. Morphological Control Agent in Ternary Blend Bulk Heterojunction Solar Cells. *Polymers* 6, 2784-2802 (2014).
 112. Lee, J. U. et al. Morphology control of a polythiophene-fullerene bulk heterojunction for enhancement of the high-temperature stability of solar cell performance by a new donor-acceptor diblock copolymer. *Nanotechnology* 21, 105201 (2010).
 113. Mei, J. & Bao, Z. Side Chain Engineering in Solution-Processable Conjugated Polymers. *Chem. Mater.* 26, 604-615 (2014).
 114. Frampton, M. J. & Anderson, H. L. Insulated Molecular Wires. *Angew. Chemie Int. Ed.* 46, 1028-1064 (2007).
 115. Cho, S. et al. A Thermally Stable Semiconducting Polymer. *Adv. Mater.* 22, 1253-1257 (2010).
-

116. Nielsen, T. D., Cruickshank, C., Foged, S., Thorsen, J. & Krebs, F. C. Business, market and intellectual property analysis of polymer solar cells. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 94, 1553-1571 (2010).
117. Muller-Meskamp, L., Fahlteich, J. & Krebs, F. C. Barrier technology and applications. In *Stability and degradation of organic and polymer solar cells* (Krebs, F. C.) 269-329 (John Wiley & Sons, Ltd, West Sussex, 2012).
118. Jørgensen, M. & Krebs, F. C. Degradation of polymer-based OPV. In *Stability and degradation of organic and polymer solar cells* (Krebs, F. C.) 143-162 (John Wiley & Sons, Ltd, West Sussex, 2012).
119. Tournebize, A. et al. How Photoinduced Crosslinking Under Operating Conditions Can Reduce PCDTBT-Based Solar Cell Efficiency and then Stabilize It. *Adv. Energy Mater.* 4, 1301530 (2014).
120. Li, L. et al. Poly(3-hexylthiophene) nanofiber networks for enhancing the morphology stability of polymer solar cells. *Org. Electron.* 14, 1383-1390 (2013).
121. Li, Z. et al. Toward Improved Lifetimes of Organic Solar Cells under Thermal Stress: Substrate-Dependent Morphological Stability of PCDTBT:PCBM Films and Devices. *Sci. Rep.* 5, 15149 (2015).
122. Park, J.-M. et al. Designing Thermally Stable Conjugated Polymers with Balanced Ambipolar Field-Effect Mobilities by Incorporating Cyanovinylene Linker Unit. *Macromolecules* 49, 2985-2992 (2016).
123. Liu, X. et al. High Thermal Stability Solution-Processable Narrow-Band Gap Molecular Semiconductors. *J. Am. Chem. Soc.* 136, 16144-16147 (2014).
124. Takeda, Y., Andrew, T. L., Lobez, J. M., Mork, A. J. & Swager, T. M. An Air-Stable Low-Bandgap n-Type Organic Polymer Semiconductor Exhibiting Selective Solubility in Perfluorinated Solvents. *Angew. Chemie Int. Ed.* 51, 9042-9046 (2012).
125. Yum, S. et al. Benzotriazole-Containing Planar Conjugated Polymers with Noncovalent Conformational Locks for Thermally Stable and Efficient Polymer Field-Effect Transistors. *Chem. Mater.* 26, 2147-2154 (2014).
126. Lei, T. et al. High-Performance Air-Stable Organic Field-Effect Transistors: Isoindigo-Based Conjugated Polymers. *J. Am. Chem. Soc.* 133, 6099-6101 (2011).

국가 R&D 현황 분석

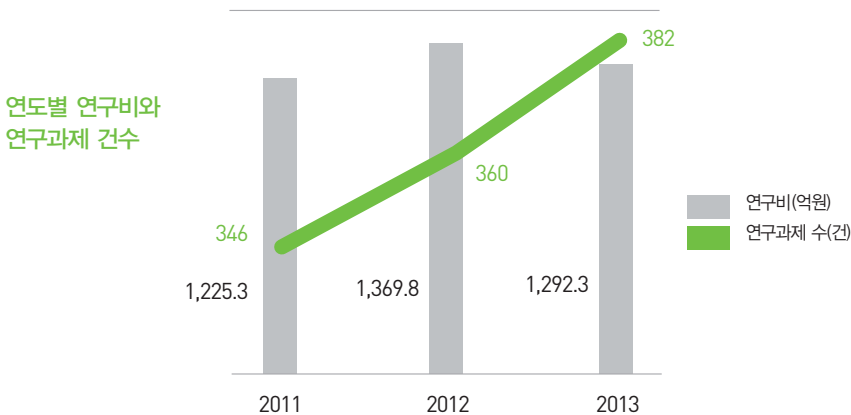
최근 3년간(2011~2013년) 전도성 폴리머와 관련된 연구개발사업을 분석해보았다.

| 과제 선별 기준 |

전도성 폴리머를 기반으로 이미 확고한 제품군으로 자리 잡은 유기태양전지와 OLED를 포함하고, ((전도성) and (폴리머)) or ((conductive) and (polymer))로 분류

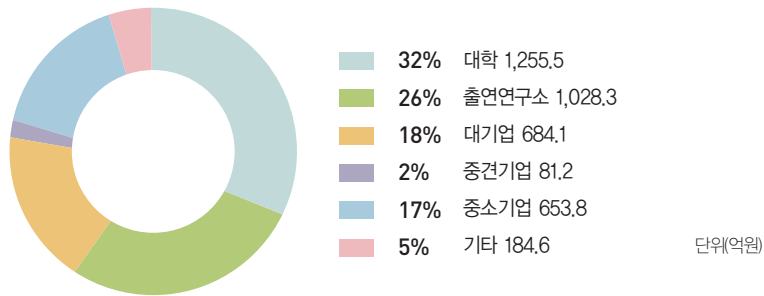
분석 결과 최근 3년간 총 1,088건의 과제에 3,887억원의 연구비가 투자됨

- 연구비는 꾸준히 증가하는 것으로 나타났으나, 연구과제 수는 약간의 증감이 있었던 것으로 나타남
- 하지만 최근 전도성 폴리머에 대한 전세계적인 관심과 식량산업의 시장 규모를 고려해 보았을 때 전체적인 전도성 폴리머에 대한 연구비 규모가 충분치 않은 것으로 사료됨



연구수행주체 전도성 폴리머 전체에 대한 연구를 분석한 만큼 다양한 주체들이 연구를 수행하고 있는 것으로 나타남

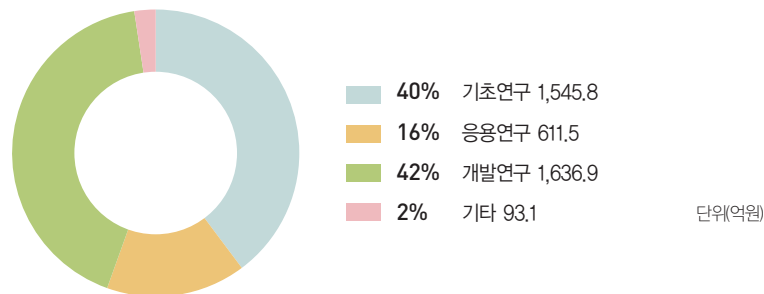
- 대학과 출연연, 대기업, 중소기업 순으로 연구개발이 이루어지고 있는 것으로 나타남
 - 다른 주제에 비해 대기업(18%), 중소기업(17%), 중견기업(2%)의 연구 비율이 높게 나타났는데 이는 유기 태양 전지 및 OLED 같은 상용화된 전도성 폴리머 연구가 활발하게 이루어지고 있기 때문으로 사료됨



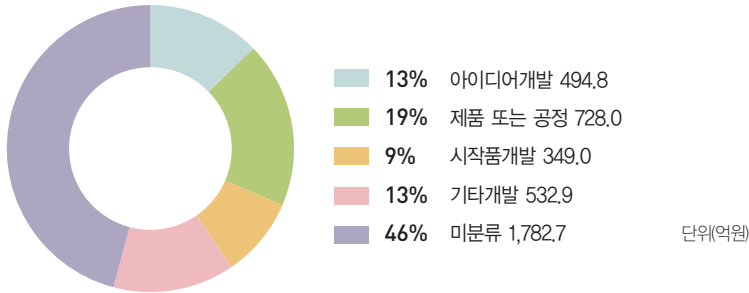
연구수준 전도성 폴리머와 관련된 연구는 연구개발단계나 수준, 성격과 관계없이 고르게 연구가 진행되고 있는 것으로 나타남

- 개발단계별로는 개발연구(42%), 기초연구(40%), 응용연구(16%) 순으로 이루어지는 것으로 나타났으며, 과제 수로는 기초연구(612개)가 개발연구(312개)보다 더 많았음
- 연구개발성격 측면에서는 아이디어 개발(495억원, 269개), 제품 또는 공정 개발(728억원, 221개), 시작품 개발(349억원, 154개), 기타 개발(533억원, 164개) 등 고르게 연구가 이루어지고 있는 것으로 나타남
- 기술수명주기적 측면에서는 도입기(1,699억원) 및 성장기(954억원) 중심으로 연구가 이루어지고 있는 것으로 나타남

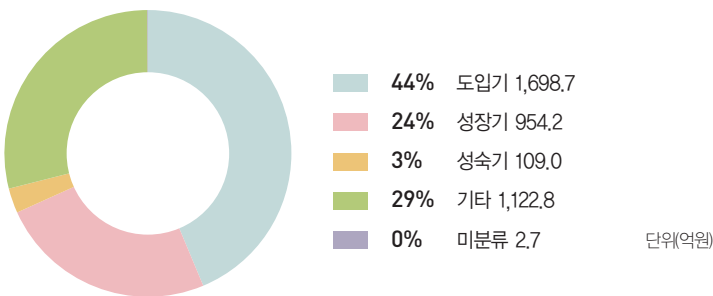
연구개발단계



연구개발성격

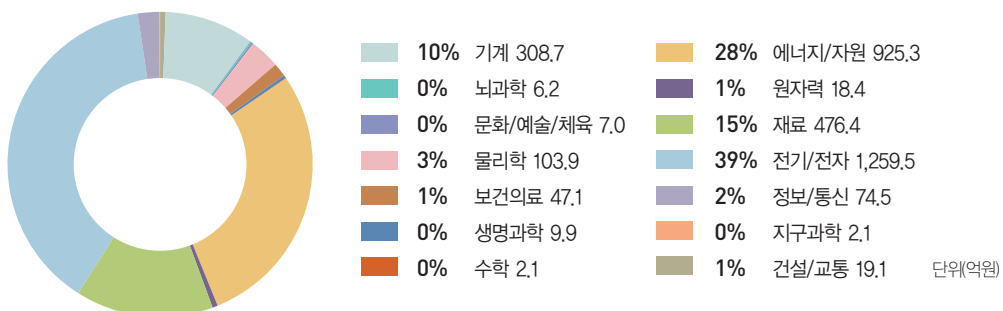


기술수명주기

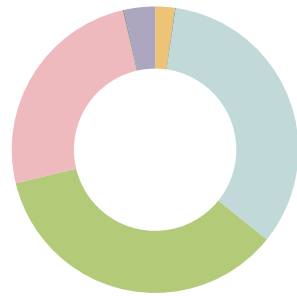


연구분야 국가과학기술표준분류와 미래유망 신기술분류(6T), 국가기술지도분류(NTRM)를 분석한 결과 전기전자(1,260억원, 32%) 중심의 ET(1,302억원, 33%), IT(1,378억원, 35%), NT(977억원, 25%) 연구가 고르게 나타남

연구분야[국가과학기술표준분류]



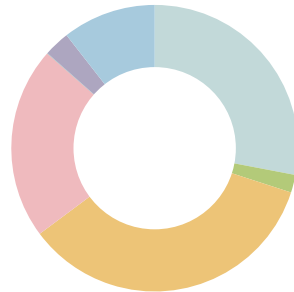
연구분야 [6T]



34%	ET 1,301.8
35%	IT 1,377.6
25%	NT 977.4
0%	ST 2.7
0%	미분류 2.7
4%	포함되지 않음 135.2
2%	BT 86.9
0%	CT 3.0

단위(억원)

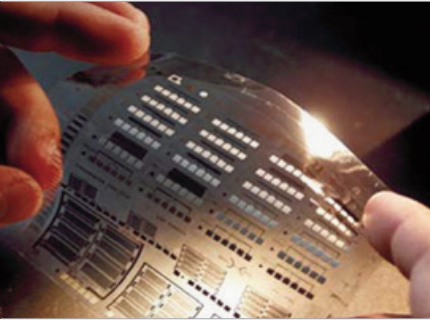
연구분야 [NTRM]



28%	정보/지식/지능화 사회 구현 1,088.5
2%	건강한 생명사회 지향 77.8
35%	환경/에너지 프론티어 진흥 1,353.0
22%	기반주력산업 가치창출 843.6
0%	국가안전 및 위상 제고 1.4
3%	포함되지 않음 113.2
10%	기타 409.8

단위(억원)

- 전기/전자(1,260억원, 32%), 에너지/자원(925억원, 24%), 재료(476억원, 12%) 분야에서 대다수의 연구가 이루어짐
 - 그 외에도 전도성 폴리머는 여러 분야와 연계가 되어 있는 융합분야인 만큼, 건설/교통, 경제/경영, 과학기술과 인문사회, 문화/예술/체육, 사회/인류/복지/여성에 이르기까지 다양한 분야에서 관련 연구를 수행 중인 것으로 나타남
- 6T 기준에서는 ET(1,302억원, 33%), IT(1,378억원, 35%), NT(977억원, 25%) 세 분야가 고른 분포를 보이는 것으로 나타남
- NTRM 분석 결과는 환경/에너지 프론티어 진흥(1,353억원, 35%), 정보-지식-지능화 사회 구현(1,089억, 28%), 기반주력산업 가치창출(844억원, 22%)를 중심으로 연구가 이루어지고 있는 것으로 나타남
 - 전도성 폴리머 연구가 환경/에너지, 정보-지식-지능화 등 산업혁신과 관련된 연구인 경우가 많으며 기반주력산업 가치창출로 분류될 수 있는 연구도 상당수 존재하는 것으로 나타났는데, 이는 전도성 플라머가 지닌 산업적 파급효과를 간접적으로 시사하는 것으로 사료됨



융합연구정책센터
Convergence Research Policy Center

(02792) 서울특별시 성북구 화랑로 14길 5 t. 02-958-4984