

프로젝트 제안서 (상담용 초안)

g-C3N4 기반 이종접합 광활성 소재의 전하 재결합 억제 및 ROS 생성 향상
— 실험(무기/고분자)-계산(DFT/TD-DFT)-광전(측정/소자) 통합 접근 —

작성일: 2026 년 01 월 23 일 (금)

면담 예정: 2026 년 01 월 26 일 (월)

제안자: 팀(무기/고분자) 1 명_조아영 + 팀(계산화학) 1 명_염다연

요약

핵심 문제	광활성 소재에서 광여기 후 전하(전자/정공)의 빠른 재결합이 ROS 생성 및 응용(PDT/살균/분해반응)을 제한함.
가설	이종접합(무기/고분자 복합, 조촉매 도입, 표면/결함 제어)을 통해 전하 분리·이동을 개선하면 전하 수명(τ)이 증가하고 O ₂ 환원 기반 ROS 생성이 향상됨.
연구 목표	전하 동역학(수명/이동)-ROS 생성-응용 성능을 실험 + 계산으로 연계하여 메커니즘을 규명하고 최적 조성을 제시.
핵심 지표(KPI)	TRPL/TA 기반 수명(τ), PL 소광, 광전류/전하전달저항(EIS), ROS 정량(종별), 모델 반응 속도(염료 분해/살균).
접근 방법	WP1 소재 합성·구조/광학 특성, WP2 전하 동역학·광전기화학, WP3 ROS/응용 평가, WP4 DFT/TD-DFT 해석.
기대 산출물	① 비교 가능한 소재 세트(기준군 포함) ② 전하-ROS 상관관계 그래프 ③ 메커니즘 도식 ④ 중간보고/최종발표 자료.

배경 및 필요성

광촉매/광활성 소재(g-C₃N₄ 등)에서 빛을 흡수하면 전자-정공 쌍이 생성되지만, 재결합이 빠르면 표면 반응(특히 O₂ 환원)을 수행할 유효 전하가 부족해져 ROS(reactive oxygen species) 생성이 제한된다. ROS는 광역학치료(PDT), 광유도 살균/항균, 오염물 분해 등 다양한 응용의 핵심 작동종이므로, 전하 동역학을 제어하여 ROS 생성 효율을 개선하는 설계가 중요하다.

본 프로젝트는 (1) 무기화학/고분자 실험 기반의 소재 설계·합성, (2) 계산화학(DFT/TD-DFT) 기반의 전하이동·흡착·여기상태 해석, (3) 광전/광전기화학 관점의 동역학 측정 및 전자소자적 지표(photocurrent, EIS 등)를 하나의 체계로 묶어, '전하 수명 증가 → ROS 증가 → 응용 성능 향상'의 인과관계를 정량적으로 제시하는 것을 목표로 한다.

① 촉매에 빛 쏘기

촉매 (g-C₃N₄)

② 전자 생성

생성된 여기전자와 정공

③ 전자와 정공이 반응

④ 전자와 정공이 반응

⑤ 전자와 정공이 반응

⑥ 전자와 정공이 반응

⑦ 전자와 정공이 반응

⑧ 전자와 정공이 반응

⑨ 전자와 정공이 반응

⑩ 전자와 정공이 반응

⑪ 전자와 정공이 반응

⑫ 전자와 정공이 반응

⑬ 전자와 정공이 반응

⑭ 전자와 정공이 반응

⑮ 전자와 정공이 반응

⑯ 전자와 정공이 반응

⑰ 전자와 정공이 반응

⑱ 전자와 정공이 반응

⑲ 전자와 정공이 반응

⑳ 전자와 정공이 반응

㉑ 전자와 정공이 반응

㉒ 전자와 정공이 반응

㉓ 전자와 정공이 반응

㉔ 전자와 정공이 반응

㉕ 전자와 정공이 반응

㉖ 전자와 정공이 반응

㉗ 전자와 정공이 반응

㉘ 전자와 정공이 반응

㉙ 전자와 정공이 반응

㉚ 전자와 정공이 반응

㉛ 전자와 정공이 반응

㉜ 전자와 정공이 반응

㉝ 전자와 정공이 반응

㉞ 전자와 정공이 반응

㉟ 전자와 정공이 반응

㊱ 전자와 정공이 반응

㊲ 전자와 정공이 반응

㊳ 전자와 정공이 반응

㊴ 전자와 정공이 반응

㊵ 전자와 정공이 반응

㊶ 전자와 정공이 반응

㊷ 전자와 정공이 반응

㊸ 전자와 정공이 반응

㊹ 전자와 정공이 반응

㊺ 전자와 정공이 반응

㊻ 전자와 정공이 반응

㊼ 전자와 정공이 반응

㊽ 전자와 정공이 반응

㊾ 전자와 정공이 반응

㊿ 전자와 정공이 반응

연구 목표 및 연구질문

최종 목표: g-C₃N₄ 기반 광활성 소재에서 전하 재결합을 억제하여 전하 수명과 O₂ 환원 기반 ROS 생성을 향상시키고, 그 메커니즘을 실험-계산 통합으로 규명한다.

연구질문(RQ)

- RQ1. 개질(이종접합/조촉매/표면 제어)이 전하 수명(τ)과 재결합 경로(빠른/느린 성분)에 어떤 변화를 주는가?
- RQ2. 전하 분리·이동 개선의 원인은 무엇인가(밴드 정렬, 계면 전하이동, 트랩/결함 상태 등)?
- RQ3. 전하 동역학 변화가 ROS 생성(종별: $\bullet\text{O}_2^-$, $\bullet\text{OH}$, 1O_2 등)과 응용 성능(모델 반응)으로 어떻게 정량적으로 연결되는가?

핵심 가설

이종접합(무기/고분자 복합) 및 조촉매 도입으로 인해 (i) 전하 분리 구동력(밴드 정렬)과 (ii) 계면 전하이동 경로가 확보되면 재결합이 감소하여 유효 전하 농도 및 수명(τ)이 증가한다. 그 결과 O₂의 전자 수용 반응이 촉진되어 ROS 생성률이 증가하고, 모델 응용 반응(염료 분해 또는 살균) 성능이 향상된다.

연구 방법 및 수행 계획

WP1. 소재 설계·합성 및 기본 특성 평가(무기/고분자)

- 기준군: pristine g-C₃N₄(열중합 등 표준 합성)
- 개질군(예시, 택 1-2 개로 범위 고정): (a) 고분자 코팅/복합(PDA, PANI, PEG 유도체 등) (b) 무기 조촉매/도핑(Co/Fe/Ni 등 저함량) (c) 탄소계 보조재(그래핀/카본블랙 등)
- 구조/화학: XRD, FT-IR, XPS, SEM/TEM(가능 시), BET(가능 시)
- 광학: UV-Vis(흡수/밴드갭), PL(정적 소광), 흡수 및 광안정성

WP2. 전하 동역학 및 광전기화학(광전자 관점)

- 전하 수명/재결합: TRPL(우선), 가능 시 TA(초고속 흡수)로 시간상수(빠른/느린 성분) 추출
- 계면 전하이동: transient photocurrent, EIS(전하전달저항), Mott-Schottky(평탄밴드/캐리어)
- 산소 조건 비교: N₂ 퍼지 vs O₂ 포화 조건에서 동역학과 광전류 변화를 비교해 O₂ 환원 경로의 기여를 분리

WP3. ROS 생성 정량 및 응용 데모(바이오/제약 연결)

- ROS 정량(종별): $\bullet\text{O}_2^-$, $\bullet\text{OH}$, 1O_2 를 형광/흡광 probe 또는 EPR spin trapping(장비 보유 시)으로 정량
- 기준 조건 표준화: 광원 스펙트럼/광강도, 촉매량, 용액 pH, O_2 농도 등을 고정하여 비교 가능하게 설계
- 응용 데모(택 1): (a) 모델 염료 분해(메틸렌블루/로다민 B 등) (b) 광유도 살균(모델 균주, 안전 범위 내)
- 전하-ROS-응용의 상관관계: τ /광전류/EIS 지표와 ROS 생성률 및 반응 속도의 상관 분석(회귀/상관계수 등)

WP4. 계산화학(DFT/TD-DFT) 기반 메커니즘 해석(계산화학 담당)

- 모델링: g-C₃N₄ 클러스터/주기계 + 개질(고분자 올리고머/조촉매) 인터페이스 모델 구성
- 전자구조: 밴드 정렬/준위(작업함수, 전자친화도 등) 및 전하밀도 차이로 전하 이동 방향 예측
- O_2 흡착·전자전달: O_2 adsorption energy, 전하이동량(Bader 등)로 ROS 생성 경향성 해석
- 여기상태(가능 시): TD-DFT 로 주요 여기 전이 및 삼중항(T1) 에너지 범위를 추정하여 1O_2 가능성에 대한 정성 근거 제시
-

성과지표(KPI) 및 평가 방법

지표	측정/산출	비교 기준
전하 수명(τ)	TRPL 또는 TA 에서 시간상수 추출	pristine 대비 증가율
재결합 감소	PL 소광, TRPL/TA 빠른 성분 감소	개질군 간 상대 비교
전하이동 성능	photocurrent, EIS(Rct), Mott-Schottky	O_2 조건 변화 포함
ROS 생성률	종별 probe/EPR 정량	광원/조건 표준화
응용 성능	염료 분해 속도상수 또는 살균 log-reduction	ROS 와 상관분석

일정(예시: 12 주)

주차	주요 작업
1-2 주	문헌 조사, 비교군/개질군 1-2 종 확정, 합성 프로토콜 확정, 안전/시약 확보
3-5 주	소재 합성 및 구조/광학 기본 특성(XRD/FT- IR/UV-Vis/PL)
6-8 주	전하 동역학(TRPL/가능 시 TA), 광전기화학(photocurrent/EIS/MS)
9-10 주	ROS 종별 정량 및 응용 데모(염료 분해 또는 살균)
11 주	DFT/TD-DFT 계산 결과 정리 및 실험과 매칭(밴드/흡착/전하이동)
12 주	통합 분석, 최종 도식/발표자료/보고서 작성

역할 분담(안)

담당	주요 역할
무기/고분자	소재 합성/개질, 구조·표면 분석, ROS/응용 실험 수행
계산화학	DFT/TD-DFT 모델링 및 전자구조/흡착/여기상태 해석, 실험-계산 결과 통합
지도교수/연구실	TRPL/TA/광전기화학 장비 접근, 소자/동역학 해석 자문, 안전/실험 프로토콜 검토

필요 장비/자원(면담 시 확인 필요)

- 광원: 파장/광강도 지정 가능 여부(필터/파워미터)
- 시간분해 측정: TRPL 우선, TA 가능 여부 및 측정 범위(피코-마이크로초)
- 광전기화학: potentiostat(EIS/MS), 전극 제작/코팅 장비(스핀코터 등)
- ROS 정량: probe 시약 가용성, EPR 장비 접근 여부(가능 시)
- DFT 계산: 연구실/학교 HPC 접근 또는 로컬 워크스테이션 사양

리스크 및 대안

리스크	대안/완화 전략
TA 접근 불가	TRPL + transient photocurrent + EIS 조합으로 전하 동역학/이동을 대체 지표로 확보
ROS 종별 구분 어려움	우선 1-2 종(예: $1O_2$, $\bullet O_2^-$)에 집중하고, 조건(N_2/O_2) 비교로 메커니즘을 분리
소재 개질 변수가 과다	개질 방식은 1-2 개로 고정하고 기준군 대비 '원인-결과'가 선명한 비교 설계로 축소
바이오 실험 제약	세포실험 대신 모델 반응(염료 분해/표준 화학 트랩)으로 PDT 잠재성의 정량 근거 제시

면담 시 확인할 질문(체크리스트)

1. 연구실에서 TRPL/TA 측정 가능 여부 및 예약/비용/샘플 요구사항(형태, 농도, 두께 등)은?
2. 광전기화학 세팅(photocurrent, EIS, Mott-Schottky) 측정을 위한 표준 프로토콜/기판/전극 추천은?
3. g-C₃N₄ 개질 방향(고분자 vs 조촉매 vs 도핑) 중 연구실이 선호하는 설계 또는 선행 노하우가 있는지?
4. ROS 정량(특히 $1O_2$)에서 신뢰도 높은 probe/분석법 및 권장 조건은?
5. 프로젝트 범위(12 주 가정)에서 현실적인 목표치(최소 성과/도전 성과)는?
6. 발표/보고서 형태(학부 연구, 캡스톤, 학회 포스터 등)와 기대 수준은?

참고문헌(초안)

- g-C₃N₄ 기반 광촉매 및 이종접합/조촉매 설계 관련 리뷰 논문 2-3 편(면담 후 연구실 선호 저널 기준으로 확정).
- ROS 생성 및 PDT/살균 응용 관련 기초 리뷰 1-2 편(종별 probe 선택 근거 포함).
- TRPL/TA 및 광전기화학(EIS/Mott-Schottky) 데이터 해석 가이드 논문/교재 1-2 편.