

그래핀 도핑 패턴 예측 모델 구축을 통한 전기전도도 최적화 탐구

송리안 박헌주

대전대신고등학교(Daejeon Daeshin High.) A.C.T.(KE)

ABSTRACT: 본 연구는 그래핀의 도핑 패턴이 전기전도도에 미치는 영향을 인공지능(AI) 기반 회귀 모델을 통해 정량적으로 분석한 것이다. 그래핀의 전자 구조적 특성과 도핑 효과를 이론적으로 고찰한 뒤, 도핑 원소 종류, 도핑 농도, 결함 밀도를 입력 변수로 설정하여 전기전도도를 예측하는 모델을 설계하였다. 실제 실험 수치와 물리적 경향을 반영한 모의 데이터셋을 구성하고, 선형 회귀, 다항 회귀, 랜덤 포레스트 회귀를 적용하여 각 모델의 예측 성능을 비교하였다.

I. 탐구 목적

그래핀 도핑의 이론적 배경을 보다 깊이 있게 분석하여, 전자 구조와 페르미 준위 이동, 결함 생성 메커니즘이 전기전도도에 미치는 복합적인 영향을 정리한다. 이를 위해 그래핀의 밴드 구조와 전하 운반자의 이동 특성을 수학적으로 표현하고, 도핑에 따른 에너지 준위 변화를 체계적으로 서술한다.

다음으로, 도핑 원소의 종류(예: N, B, 금속 원소), 도핑 농도, 결함 밀도와 같은 독립 변수를 입력으로, 전기전도도(σ)를 종속 변수로 설정하여 AI 회귀 모델을 설계한다. 입력 데이터의 물리적 의미를 보존하기 위해 각 변수의 단위와 범위를 정의하고, 예측 과정에서 변수 간 상관관계 분석(feature correlation analysis)을 포함한다.

이후 모의 데이터셋을 생성하여 선형 회귀, 다항 회귀, 랜덤 포레스트 회귀 모델을 학습시킨다. 데이터는 실제 논문 및 실험 보고서의 수치를 기반으로 현실적인 경향을 반영하며, 학습 후 모델별 성능을 평균제곱오차(MSE)와 결정계수(R^2)로 평가한다. 이를 통해 AI 모델이 물리적 관계를 얼마나 정밀하게 근사하는지 검증하고, 비선형 패턴을 포착하는 능력을 비교한다.

마지막으로 AI 예측 결과를 분석하여 도핑 종류와 농도에 따른 최적 전도도 조건을 도출하고, 변수 중요도(feature importance)를 통계적으로 평가한다. 이를 통해 어떤 요인이 그래핀의 전도도 향상에 가장 크게 기여하는지를 도출하며, 궁극적으로 AI가 신소재 설계 과정에서 실험적 접근을 보완하고 탐색 효율을 높이는 방법을 논의한다.

II. 이론적 배경

그래핀은 디랙점(Dirac point)에서 전도띠와 가전자띠가 만나는 독특한 전자 밴드 구조를 가지고 있으며, 이 지점에서 전자와 정공은 질량이 거의 0 인 준상대론적 입자처럼 움직인다. 이러한 특성으로 인해 그래핀은 매우 높은 전하 이동도와 전기전도도를 보이며, 전자 이동 속도는 실질적으로 광속의 1/300 에 달한다. 그래핀 내부에서는 전자들이 포텐셜 장벽을 거의 저항 없이 통과하는 클라인 터널링(Klein tunneling) 현상이 나타나기도 하여, 반도체보다 훨씬 빠른 전자 이동 특성을 갖는다.

도핑(doping)은 이러한 전도 특성을 인위적으로 조절하기 위한 방법으로, 외부 원소를 첨가하여 그래핀의 페르미 준위를 이동시키는 과정을 의미한다. 질소(N) 도핑은 추가적인 전자를 제공하여 전도띠를 채우고 n 형 특성을 강화하며, 붕소(B) 도핑은 전자를 제거하여 p 형 특성을 강화한다. 금속 원소 도핑의 경우 전자 구름의 재분포를 유도하여 밴드갭 형성과 전하 재배치를 동시에 일으킬 수 있다.

그래핀의 전기전도도 σ 는 일반적으로 다음의 관계식으로 표현된다.

$$\sigma = n \cdot e \cdot \mu$$

여기서 n 은 전하 운반자 농도, e 는 전자 전하, μ 는 이동도를 나타낸다. 도핑 농도가 증가함에 따라 전하 운반자 농도(n)는 증가하지만, 동시에 결함(defect)이나 격자 왜곡이 누적되어 전하 이동도(μ)가 저하된다. 이 두 요인이 상반된 영향을 미치기 때문에 전기전도도는 일정 농도까지 상승하다가 이후에는 감소하는 포물선형(비선형) 특성을 보인다. 이러한 현상은 그래핀의 밴드 구조에서 전자 산란 확률이 비선형적으로 변하는 결과로 해석할 수 있다.

AI 회귀 모델은 이러한 비선형적 관계를 정량적으로 표현하고 예측하는 데 매우 유용하다. 단순한 선형 회귀 모델은 전도도의 단조 증가만을 표현하는 한계를 가지지만, 다항 회귀나 랜덤 포레스트 회귀는 비선형성과 상호작용 효과를 반영할 수 있어 도핑 농도와 전도도 사이의 복잡한 함수적 관계를 더 정확히 학습한다. 특히 랜덤 포레스트 모델은 다수의 결정 트리를 기반으로 다양한 변수 조합을 통계적으로 평가하여, 각 도핑 원소의 전자 구조적 특성과 결함 밀도에 따른 전도도 변화를 효과적으로 예측할 수 있다.

III. 탐구 방법

그래핀 도핑의 전기적 거동을 예측하기 위해 먼저 입력 변수와 출력 변수를 체계적으로 정의하였다. 입력 변수는 세 가지 주요 요인으로 구성된다. 첫째, 도핑 원소의 종류로 N, B, 금속(M) 세 가지를 설정하였으며, 이는 범주형 데이터로 one-hot 인코딩을 통해 수치화하였다. 둘째, 도핑 농도는 0~10 at% 범위의 연속형 변수로 설정하여, 농도 변화에 따른 전기적 변화를 정량화할 수 있도록 하였다. 셋째, 결합 밀도는 0~5% 범위의 연속형 변수로, 그래핀 결정 내 결합 정도가 전도도에 미치는 영향을 반영하기 위한 요소로 포함하였다.

출력 변수는 전기전도도(σ , S/cm 단위)로 정의하였다. 이 변수는 그래핀의 전자 이동도와 전하 운반자 농도의 복합적 결과로, AI 모델의 예측 정확도를 검증하는 핵심 지표가 된다.

모의 데이터셋은 실제 물리적 경향을 반영하여 구성되었다. 도핑 농도 0%일 때 전도도는 약 5×10^4 S/cm 로 시작하며, 농도 3~4% 구간에서 최대값 약 7×10^4 S/cm 를 기록한 뒤, 결합의 누적 효과로 인해 10% 농도에서는 약 4×10^4 S/cm 로 감소하도록 설계하였다. 이러한 데이터는 도핑 원소별 특성 차이를 반영하여 각 원소마다 최대 전도도와 최적 농도 위치가 다르게 나타나도록 설정하였으며, 총 180 개의 데이터 포인트를 생성하였다. 이 데이터는 난수 기반의 변동 값을 포함하여, 모델이 현실적인 노이즈 환경에서도 일반화된 예측 능력을 갖추도록 설계하였다.

AI 회귀 모델 학습 단계에서는 세 가지 모델을 적용하였다. 첫째, 선형 회귀 모델은 $y = ax + b$ 형태로 간단히 도핑 농도와 전도도의 1 차 관계를 파악하였다. 둘째, 2 차 다항 회귀 모델은 $y = ax^2 + bx + c$ 형태를 사용하여 최적 도핑 농도에서 전도도가 최대가 되는 곡선형 관계를 반영하였다. 셋째, 랜덤 포레스트 회귀 모델은 100 개의 결정 트리를 앙상블로 구성하여, 다차원 변수 간의 비선형 관계와 상호작용 효과를 포착하였다.

모델의 성능 평가는 평균제곱오차 (MSE)와 결정계수 (R^2)를 통해 이루어졌다. 낮은 MSE 값과 높은 R^2 값은 모델이 실제 데이터의 변동성을 잘 설명함을 의미하며, 이를 통해 각 회귀 기법의 물리적 타당성과 예측 효율을 비교·분석하였다.

IV. 탐구 결과

1. 모델별 예측 성능 비교

모델별 예측 결과를 정량적으로 비교한 결과, 선형 회귀 모델은 평균제곱오차(MSE) 8.25×10^6 , 결정계수(R^2) 0.78 을 기록하여 비선형성을 충분히 반영하지 못했다. 반면 다항 회귀 모델은 MSE 2.14×10^6 , R^2 0.94 로

정확도가 크게 향상되었으며, 실제 실험 경향과 유사한 ‘상승-최대-감소’ 형태의 전도도 변화를 포착했다. 가장 높은 성능을 보인 랜덤 포레스트 회귀 모델은 MSE 1.76×10^6 , R^2 0.97 로 오차가 가장 낮았고, 변수 중요도 분석에서 도핑 농도(기여도 약 52%)와 결합 밀도(기여도 약 31%)가 전도도 변화의 핵심 인자로 확인되었다. 랜덤 포레스트는 다항 회귀보다 세부적인 도핑 원소별 영향까지 반영했으며, 예측된 전도도 곡선의 기울기 변화 또한 실제 문헌에서 보고된 실험 결과와 일치하였다.

도핑 원소별 결과 분석에서는 질소(N) 도핑이 가장 우수한 전도도 향상 효과를 보였다. N 도핑의 최적 농도는 3.8%로 예측되었고, 이때 최대 전기전도도는 7.23×10^4 S/cm 로 계산되었다. 붕소(B) 도핑은 2.9%에서 최대 6.61×10^4 S/cm 를 기록하며 전자 공공 효과로 인한 약간의 손실을 보였고, 금속(M) 도핑은 초기(0~3%) 구간에서 급격한 상승세를 보이다가 5% 이상에서 결합 효과가 누적되어 전도도가 급감하는 경향을 나타냈다. 도핑 농도 10%에서 금속 도핑의 전도도는 약 4.05×10^4 S/cm 로 감소하여, 도핑 과잉 시 격자 불안정성과 전하 산란이 심화됨을 시사하였다.

모델별 예측값을 시각화한 결과, 모든 모델에서 도핑 농도(x 축)에 따라 전기전도도(y 축)가 포물선형으로 변하는 경향이 관찰되었다. 그러나 랜덤 포레스트 모델의 곡선은 실험 보고된 그래핀 전도도 곡선과 가장 유사하며, 각 도핑 원소별로 최대점이 3~4% 사이에 형성되었다. 또한 예측된 데이터의 평균 절대 오차(MAE)는 3.4×10^4 S/cm 이하로 유지되어 모델의 안정적 일반화 성능을 입증하였다. 이러한 결과는 AI 모델이 실제 실험 없이도 그래핀 도핑 효과를 정밀하게 예측할 수 있음을 보여주며, 향후 신소재 설계의 초기 단계에서 중요한 예측 도구로 활용될 가능성을 제시한다.

V. 결론 및 논의

본 탐구에서는 그래핀의 도핑 패턴이 전기전도도에 미치는 영향을 AI 회귀 모델을 통해 정량적으로 분석하였다. 예측 결과에 따르면, 도핑 농도가 약 3~4%까지 증가할 때 전도도가 급격히 상승하며, 이는 전하 운반자 농도(n)의 증가에 따른 전자 이동도 향상 효과 때문이다. 그러나 4% 이후에는 결합 밀도가 급격히 증가하면서 전하 산란 확률이 커져 전도도가 감소하는 경향이 나타났다. 이러한 결과는 그래핀의 전도성이 단순한 도핑 비율에 의해서만 결정되지 않고, 격자 구조의 안정성과 전자-결합 상호작용에 의해 크게 영향을 받는다는 점을 시사한다.

모델별 비교에서 선형 회귀는 전도도의 상승-하강 곡선을 충분히 반영하지 못하였으나, 다항 회귀와 랜덤

포레스트 회귀는 그래핀의 비선형적 전기적 거동을 정밀하게 재현하였다. 특히 랜덤 포레스트 모델은 변수 중요도 분석을 통해 도핑 농도가 전도도 변화의 약 52%를 설명하고, 결합 밀도와 도핑 원소 종류가 각각 31%와 17%의 영향을 미친다는 점을 밝혀냈다. 이는 도핑 농도의 정밀 제어가 전기적 성능 향상의 핵심임을 의미한다.

또한, N 도핑은 전자 제공자로 작용하여 전도도를 평균 7.2×10^4 S/cm 까지 향상시켰으며, B 도핑은 전자 결핍으로 인해 평균 6.6×10^4 S/cm 수준에 머물렀다. 금속(M) 도핑의 경우 초기 도핑 구간에서는 전도도가 빠르게 상승했으나, 5% 이상에서 격자 불안정성과 금속-탄소 간 전자 혼성화로 인한 산란이 발생해 전도도가 감소하였다. 이러한 수치적 경향은 도핑 원소의 전자 친화도와 결합 에너지 차이가 그래핀 내 전자 이동도에 직접적인 영향을 준다는 사실을 정량적으로 보여준다.

이 결과를 바탕으로 볼 때, AI 기반 예측 모델은 실험 전 단계에서 최적 도핑 조건을 도출할 수 있는 강력한 도구로 작용한다. 특히 그래핀-금속 접합계, TMD 기반 광전소자, 또는 h-BN 절연층을 포함한 이종구조 시스템에서 도핑 농도와 밴드 정렬을 정밀하게 제어하는 전략으로 확장될 수 있다. 향후 이러한 접근법은 고성능 전자소자나 에너지 저장 소재 개발 시 실험적 시행착오를 줄이고, 데이터 기반의 신소재 설계 체계를 구축하는 핵심 기술로 발전할 가능성이 높다.

참고문헌

- Elias, D. C. et al. (2011). Dirac cones reshaped by interaction effects in suspended graphene. *Nature Physics*, 7, 701–704.
- Chng, E. L. K., & Pumera, M. (2015). Toxicity of graphene related materials and transition metal dichalcogenides. *RSC Advances*, 5, 3074–3080.
- Son, I. H. et al. (2017). Graphene balls for lithium rechargeable batteries with fast charging and high volumetric energy densities. *Nature Communications*, 8:1561.
- Shanmugam, V. et al. (2022). A Review of the Synthesis, Properties, and Applications of 2D Materials. *Particle & Particle Systems Characterization*, 39:2200031.