



등록특허 10-2527849



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년05월02일

(11) 등록번호 10-2527849

(24) 등록일자 2023년04월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

*C01G 41/00* (2006.01) *C01B 19/00* (2006.01)

*C01G 39/00* (2006.01) *C23C 16/30* (2006.01)

*H10N 30/85* (2023.01)

(52) CPC특허분류

*C01G 41/006* (2013.01)

*C01B 19/007* (2013.01)

(21) 출원번호 10-2020-0100088

(22) 출원일자 2020년08월10일

심사청구일자 2020년08월10일

(65) 공개번호 10-2022-0019541

(43) 공개일자 2022년02월17일

(56) 선행기술조사문헌

PHYSICAL REVIEW B 100. 045415 (2019)\*

npj 2D Materials and Applications volume 3.

Article number: 35 (2019)\*

ACS Nano 2017. 11. 8242-8248

KR101830524 B1

\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

연세대학교 산학협력단

서울특별시 서대문구 연세로 50 (신촌동, 연세대학교)

(72) 발명자

최현진

서울특별시 성북구 성북로4길 52, 206동 2105호(돈암동, 한신한진아파트)

채장푸

서울특별시 서대문구 성산로18길 48(연희동)  
(뒷면에 계속)

(74) 대리인

김홍균

전체 청구항 수 : 총 1 항

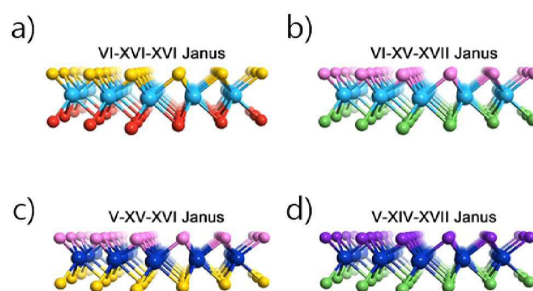
심사관 : 강민구

(54) 발명의 명칭 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층 및 이의 제조방법

## (57) 요약

본 발명은 새로운 광전, 압전 재료 및 이의 제조방법에 관한 것으로, 더욱 상세하게는 면내 및 면외 압전 특성을 나타내는 새로운 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층 및 이의 제조방법에 관한 것이다.

대표도 - 도2



- (52) CPC특허분류  
C01G 39/006 (2013.01)  
C23C 16/305 (2013.01)  
H10N 30/853 (2023.02)

**황우현**  
서울특별시 서초구 바우피로43길 23, 101호 (양재동, 양재테크노2차아파트)

- (72) 발명자  
**손알로이시우스**  
서울특별시 서대문구 모래내로 151, 101동 1010호 (남가좌동, 디엠씨엘가)  
**장우선**  
서울특별시 강남구 일원로 127, 107동 201호(일원동, 가람아파트)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711105456
과제번호	2018M3D1A1058926
부처명	과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명	한국연구재단
연구사업명	미래소재디스커버리지원(R&D)
연구과제명	인공 공감각 일렉트로닉스 플랫폼 개발
기 여 율	1/1
과제수행기관명	연세대학교
연구기간	2018.07.16 ~ 2024.07.15

---

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

MX<sub>2</sub> 배열의 전이금속 디칼코게나이드의 최상층 원자가 대체되어 YMX 배열로 표시되는 전이금속 디칼코게나이드-유래 VI-XV-XVII 야누스 단분자층:

M은 Mo 또는 W이고,

X는 F, Cl, Br 또는 I이며,

Y는 N, P, As, Sb 또는 Bi이다.

에 있어서,

밴드갭이 0 내지 1.3eV 이고,

압전 계수 d<sub>11</sub>이 0 내지 13pm/V 이고,

압전 계수 d<sub>31</sub>이 0 내지 1.5pm/V인 전이금속 디칼코게나이드-유래 VI-XV-XVII 야누스 단분자층.

#### 청구항 2

삭제

#### 청구항 3

삭제

#### 청구항 4

삭제

#### 청구항 5

삭제

#### 청구항 6

삭제

#### 청구항 7

삭제

#### 청구항 8

삭제

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 새로운 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층 및 이의 제조방법에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002] 진행중인 많은 재료 설계 방법은 특히 2성(binary) 등을 사용하여 새로운 광전 및 압전 재료를 개발하는 데 중점을 두고 있다. Si 및 CdTe와 같은 천연 광물에 기초한 몇몇 성공적인 예가 발견되었으며, 이는 광전지 응용

분야에서 널리 사용되고 있다.

[0003] 삼각 프리즘형 전이금속 디칼코게나이드(transition metal dichalcogenides, TMDs)의 괴상은 원자 조성에 따라 반도체, 금속 또는 초전도 일 수 있다. 최근에, 박리에 의해 얻어진 반도체 성  $\text{MoS}_2$ 의 단분자층은 벌크에서와 같이 간접 밴드 갭을 갖는 대신 직접 밴드 갭을 나타내는 것으로 밝혀졌다. M이 W 또는 Mo이고 X가 S 또는 Se인  $\text{MX}_2$ 의 단분자층에서도 동일한 동작이 발견되었다. 더욱이, 구조 대칭 파괴는 2 차원 재료의 전자 밴드 구조를 결정하는데 결정적인 역할을 한다. AB 적층 이중층 또는 적층 반 데르 발스 이중 구조에서 전기장으로 그래핀의 면내 대칭을 파괴하기 위해 많은 노력을 기울였다. 대조적으로, TMDs 단분자층은 고유한 면내 비대칭성을 갖는 반도체로서, 직접적인 전자 밴드 갭, 독특한 광학적 특성 및 광전자 공학에서 큰 잠재력을 가져온다. 면내 반전 비대칭과는 별도로, 외부 전계 또는 이론적으로 제안된 바와 같이 비대칭 면외 구조 구성으로 면외 거울 대칭을 파괴함으로써 스핀 조작을 허용하는 추가적인 자유도를 유도할 수 있다. 특성화 결과, 야누스(Janus) 2D TMD는 강력한 Rashba spin splitting, 2 차 고조파 생성 (SHG) 응답, 큰 압전 효과 및 우수한 촉매 성능과 같은 고유한 특성을 가질 수 있음이 입증되었다.

[0004] 그러나, 천연 광물 또는 사용된 바이너리를 기반으로 하는 많은 현재 및 이전 재료 설계 방법은 Shockley-Queisser 한계와 같은 고유 재료 한계를 극복 할 수 없다. 또한 일부 연구자들은 단일 이온 교환 방법을 사용하는데, 이는 양이온 및 음이온 교환 방법 둘 다를 의미하지만, 이 방법은 여전히 천연 광물 또는 Kesterite 그룹에 속하며, 기존의 재료 설계 한계로 이어진다. 게다가, 종래의 재료 설계는 종종 매우 좁게 집중되어 있어 이를 확장할 수 없다.

[0005] 야누스 TMD의 경우 이런 종류의 재료에 대한 연구와 보고가 부족하고 많은 잠재적인 특성을 발견해야 한다. 제1 원리 시뮬레이션 기법 및 인공 지능 기법을 기반으로 하는 일부 연구들이 보고되었지만, 압전 특성과 같은 일부 특성은 매우 열악하다. 또한, 우수한 품질과 안정적인 Janus TMD를 성공적으로 합성하는데 필요한 성과는 매우 불충분하며, 기존의 일부 Janus TMD는 특히 평면 내 응답 및 평면외 응답 성능이 좋지 않은 문제가 있다.

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

[0006] 본 발명은 상기와 같은 문제점을 해결하기 위하여, 새로운 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층 및 이의 제조방법을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[0007] 보다 구체적으로, 기존의 재료 설계 방법에서 본질적인 재료 제한 및 좁은 초점 문제를 극복하기 위해, 본 발명에 따른 제조방법은 제 1 원리 시뮬레이션 기법 및 인공 지능 기법을 포함하지만, 재료의 통상적인 한계 하에서가 아닌 결정 구조 및 원소 조성에 기초한 설계가 제안된다. 또한, 기존의 몇몇 야누스 TMD에서 열악한 압전 특성의 문제점을 해결하기 위해, 박리된 단분자층 TMD 또는 합성된 단분자층 TMD를 변형된 화학 기상 증착법과 결합하여 우수한 압전 특성을 갖는 새로운 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층을 제공하는 것을 목적으로 한다.

### 과제의 해결 수단

[0008] 상기한 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은  $\text{MX}_2$  배열의 전이금속 디칼코게나이드의 최상층 원자가 대체되어  $\text{YMX}$  배열로 표시되는 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층을 제공한다.

[0009] 이때, 상기 M은 Mo, W, Nb 또는 Ta이고, X는 F, Cl, Br, I, O, S, Se 또는 Te이며, Y는 O, S, Se, Te, N, P, As, Sb, Bi, C, Si, Ge 또는 Sn이며, Y와 X는 서로 다른 원소일 수 있다.

[0010] 보다 바람직하게는, 상기 M은 Mo 또는 W이고, 상기 X, Y는 각각 독립적으로, O, S, Se 또는 Te이며, 상기 X와 Y는 서로 다른 원소일 수 있다.

[0011] 보다 바람직하게는, 상기 M은 Mo 또는 W이고, 상기 X는 F, Cl, Br 또는 I이며, 상기 Y는 N, P, As, Sb 또는 Bi 일 수 있다.

[0012] 보다 바람직하게는, 상기 M은 Nb 또는 Ta이고, 상기 X는 O, S, Se 또는 Te이며, 상기 Y는 N, P, As, Sb 또는 Bi 일 수 있다.

[0013] 보다 바람직하게는, 상기 M은 Nb 또는 Ta이고, 상기 X는 F, Cl, Br 또는 I이며, 상기 Y는 C, Si, Ge 또는 Sn일

수 있다.

[0014] 또, 상기 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층은 밴드갭이 0 내지 1.3eV이고, 압전 계수  $d_{11}$ 이 0 내지 18pm/V이며, 압전 계수  $d_{31}$ 이 0 내지 1.5pm/V일 수 있다.

### 발명의 효과

[0015] 본 발명에 따른 제조방법은 재료 설계 및 제일원리(ab-initio) 계산 결과 분석에 긍정적인 영향을 줄 수 있다. 또한, 본 발명은 효과적인 재료 설계 방법론을 제공함에 따라, 당 분야 및 유사한 분야에 큰 영향을 줄 수 있다. 또한, 상기 재료 설계 방법에 의한 압전 특성이 우수한 단분자층 야누스 TMD를 제공할 수 있어, 이를 광전 및 압전 산업에 응용할 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

[0016] 도 1은 TMD의 VI-XVI 원자 모델을 도시한 도면이다.

도 2a는 일 실시예에 따른 야누스 TMD의 VI-XVI-XVI 원자 모델을 도시한 도면이다.

도 2b는 일 실시예에 따른 야누스 TMD의 VI-XV-XVII 원자 모델을 도시한 도면이다.

도 2C는 일 실시예에 따른 야누스 TMD의 V-XV-XVI 원자 모델을 도시한 도면이다.

도 2D는 일 실시예에 따른 야누스 TMD의 V-XIV-XVII 원자 모델을 도시한 도면이다.

도 3a는 VI-XV-XVII 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합을 갖는 열역학적 안정성을 나타내는 도면이다.

도 3B는 V-XV-XVI 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합을 갖는 열역학적 안정성을 나타내는 도면이다.

도 3C는 V-XIV-XVII 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합을 갖는 열역학적 안정성을 나타내는 도면이다.

도 4a는 VI-XV-XVII 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합에 의한 밴드 갭을 나타내는 도면이다.

도 4b는 V-XV-XVI 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합에 의한 밴드 갭을 나타내는 도면이다.

도 4C는 V-XIV-XVII 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합에 의한 밴드 갭을 나타내는 도면이다.

도 5a는 VI-XV-XVII 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합에 의한 압전 계수  $d_{11}$ 을 나타내는 도면이다.

도 5b는 V-XV-XVI 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합에 의한 압전 계수  $d_{11}$ 을 나타내는 도면이다.

도 5C는 V-XIV-XVII 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합에 의한 압전 계수  $d_{11}$ 을 나타내는 도면이다.

도 6a는 VI-XV-XVII 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합에 의한 압전 계수  $d_{31}$ 을 나타내는 도면이다.

도 6b는 V-XV-XVI 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합에 의한 압전 계수  $d_{31}$ 을 나타내는 도면이다.

도 6C는 V-XIV-XVII 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합에 의한 압전 계수  $d_{31}$ 을 나타내는 도면이다.

도 7은 저압(450 mTorr)의 황/아르곤 환경 하에서 고온 처리를 수반하는 TMD의 합성에 사용된 실험 설정의 개략도를 도시한 도면이다.

도 8은 황화 실험에 사용되는 온도 램프를 나타내는 도면이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0017] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 도면에 예시하고 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며,

본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

- [0018] 각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다. 첨부된 도면에 있어서, 구조물들의 치수는 본 발명의 명확성을 위하여 실제보다 확대하여 도시한 것이다. 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0019] 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다. 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 반대로 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "하에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 아래에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 또한, 본 출원에서 "상에" 배치된다고 하는 것은 상부뿐 아니라 하부에 배치되는 경우도 포함하는 것일 수 있다.
- [0020] 이하, 본 발명의 실시예를 보다 상세히 설명하고자 한다.
- [0021] 본 발명은 새로운 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층 및 이의 제조방법에 관한 것이다.
- [0022] 구체적으로, 새로운 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층을 설계하기 위해서는, 1) 제일원리(ab-initio) DFT(Density functional theory) 기반 초기 구조 생성 및 안정화 단계; 2) 경계 조건 설정 및 최소 스크리닝 단계를 수행할 수 있다.
- [0023] 구체적으로 1) 단계는 물리/화학적으로 물질을 구성하는데 있어서 가장 기본이 되는 전하 중성을 양이온-음이온 간 산화수 조정을 통해 맞출 수 있는 양이온-음이온 연속 교환 기법을 활용하여 기존 4-6(IV-VI) 그룹 전이금속 디칼코게나이드 기반 새로운 비대칭성 구조(위 아래 면이 다른)를 갖는 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층 설계하는 것이다. 여기서, 양이온 및 음이온을 치환하여 각각 6-5-7, 5-5-6, 5-4-7 그룹의 물질을 설계할 수 있다.
- [0024] 또한, 2)의 경계 조건 설정 및 최소 스크리닝 단계는 다음과 같다. 이렇게 설계된 야누스 단분자층 물질 중, 실제 구현 가능하고 활용 가능한 물질들을 찾아내기 위하여 가장 먼저 (1) 열역학적 생성열로 스크리닝을 진행한다(0보다 작음). 이후 metallic 한 물질들은 압전 성질을 나타내지 않으므로, (2) 전자 밴드갭을 기준으로 0보다 큰 물질들을 스크리닝한다. 이를 기반으로 (3) 압전상수( $d_{ij}$ ) - in-plane response인  $d_{11}$ , out-of-plane response인  $d_{31}$ 를 계산을 진행하였고, 기존에 알려진 야누스 TMDC (MoSSe)보다 3배 이상 (in-plane), 50~100배 (out of plane) 높은 압전 상수를 가지는 물질을 얻을 수 있다.
- [0025] 본 발명에 따른 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층은  $MX_2$  배열의 전이금속 디칼코게나이드의 최상층 원자가 상이한 종류의 원자로 대체되어 YMX 배열로 표시된다.
- [0026] 이때, M은 Mo, W, Nb 또는 Ta이고, X는 F, Cl, Br, I, O, S, Se 또는 Te이며, Y는 O, S, Se, Te, N, P, As, Sb, Bi, C, Si, Ge 또는 Sn이며, Y와 X는 서로 다른 원소이다. YMX의 원소 조합에 따라 다른 반도체 밴드 갭과 금속 거동을 나타낸다.
- [0027] 보다 바람직하게는, 상기 M은 Mo 또는 W이고, 상기 X, Y는 각각 독립적으로, O, S, Se 또는 Te이며, 상기 X와 Y는 서로 다른 원소일 수 있다.
- [0028] 보다 바람직하게는, 상기 M은 Mo 또는 W이고, 상기 X는 F, Cl, Br 또는 I이며, 상기 Y는 N, P, As, Sb 또는 Bi일 수 있다.
- [0029] 보다 바람직하게는, 상기 M은 Nb 또는 Ta이고, 상기 X는 O, S, Se 또는 Te이며, 상기 Y는 N, P, As, Sb 또는 Bi일 수 있다.
- [0030] 보다 바람직하게는, 상기 M은 Nb 또는 Ta이고, 상기 X는 F, Cl, Br 또는 I이며, 상기 Y는 C, Si, Ge 또는 Sn일 수 있다.
- [0031] 이러한 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층의 밴드 갭은 0eV 내지 1.3eV의 범위 일 수 있다. 또, 전

이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층은 0 pm/V 내지 18 pm/V의 압전 계수 d11 및 0 pm/V 내지 1.5 pm/V의 d31를 나타낼 수 있다.

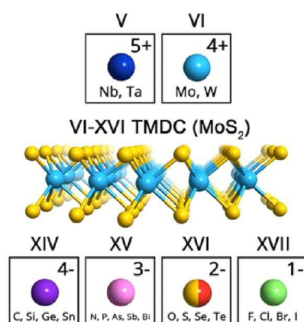
- [0032] 한편, 전술한 TMD 단분자층은 벌크 재료로부터 기계적 박리 및 액체 박리 방법에 의해 기판 상으로 전달될 수 있다.
- [0033] 또한, TMD 단분자층은 변형된 화학 기상 증착법(CVD)에 의해 제조될 수도 있다. 이때, TMD의 최상층 원자의 대체는 산화, 황화, 셀렌화, 텔루르 화 반응, 질소화, 인산화, 비소 반응, 안티몬화물 반응, 비스무트 반응, 탄화, 규화, 게르마늄 반응 또는 납 반응에 의해 수행될 수 있다.
- [0034] 도 7에 도시된 바와 같이, 화학 기상 증착법은 기판( $\text{SiO}_2/\text{Si}$ )을 금속 전구체인 전이 금속 또는 금속 산화물의 얇은 층으로 코팅한 후, 칼코겐 분위기에 노출함으로써 수행될 수 있다. 여기서, 칼코겐 분위기는 저융점 칼코겐화물 분말을 사용하여 생성될 수 있다.
- [0035] CVD 반응기에서, 칼코겐화물 분말은 반응기 내부에서 기판의 상류에 놓이고, 금속 전구체는 불활성 분위기 하에 놓인다. 퍼니스(furnace)는 승화를 촉진하기 위해 전구체의 성질에 따라 특정 온도에서 가열된다. 칼코겐화물 분말이 승화하기 시작할 때, 증기는 캐리어 가스에 의해 금속 전구체 쪽으로 그리고 단분자층의 성장이 일어나는 기판 쪽으로 수송된다.
- [0036] 이후, TMD의 최상층 원자의 대체를 위하여 산화, 황화, 셀렌화, 텔루르 화 반응, 질소화, 인산화, 비소 반응, 안티몬화물 반응, 비스무트 반응, 탄화, 규화, 게르마늄 반응 또는 납 반응을 수행한다.
- [0037] 구체적으로, 도 2 는 네 가지 종류의 야누스 TMD를 도시하고 있다. 도 2a는 XVI 그룹의 원자 최상층을 다른 XVI 그룹의 원자들로 치환한 YMX 구조를 갖는 야누스 재료이다. 예를 들면 XVI 그룹 원자인 S 을 같은 XVI 그룹 원자인 Se 을 치환하여  $\text{MoSSe}$  구조를 갖는 야누스 TMD 를 제조한다. 이와 관련된 합성 예는 다음과 같다. 단층  $\text{MoS}_2$  를  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  기판 위에 성장시키고, 이 기판을 퍼니스 반응관내에 넣고  $800^\circ\text{C}$  로 온도를 상승시키고, 진공을 유지한다. 이 상태에서 Se 전구체를 기체상태로 반응관으로 삽입하면서 30 분을 유지한 후 상온으로 냉각하여  $\text{MoSSe}$  야누스 TMD 를 합성한다. 여타 VI-XVI-XVI (도 2a)야누스 재료도 상기와 유사한 방법으로 합성할 수 있다.
- [0038] 도 2b는 XV 그룹의 원자 최상층을 다른 XVII 그룹의 원자들로 치환한 YMX 구조를 갖는 야누스 재료이다. 예를 들면 XV 그룹 원자인 N 을 같은 XVII 그룹 원자인 Cl 을 치환하여  $\text{MoNCl}$  구조를 갖는 야누스 TMD 를 제조한다. 합성 예는 다음과 같다. 단일층  $\text{MoCl}_2$  를 기판 위에 합성하고, 이 기판을 퍼니스 반응관내에 넣고  $800^\circ\text{C}$  로 온도를 상승시키고, 진공을 유지한다. 이 상태에서 N 전구체를 기체상태로 반응관으로 삽입하면서 30 분을 유지한 후 상온으로 냉각하여  $\text{MoNCl}$  야누스 TMD 를 합성한다. 다른 VI-XV-XVII (도 2b) 야누스 재료도 상기와 유사한 방법으로 제조할 수 있다.
- [0039] 도 2c는 XV 그룹의 원자 최상층을 다른 XVI 그룹의 원자들로 치환한 YMX 구조를 갖는 야누스 재료이다. 예를 들면 XVI 그룹 원자인 S 을 같은 XV 그룹 원자인 N 을 치환하여  $\text{NbNS}$  구조를 갖는 야누스 TMD 를 제조한다. 이와 관련된 합성 예는 다음과 같다. 단층  $\text{NbS}_2$  를  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  기판 위에 성장시키고, 이 기판을 퍼니스 반응관내에 넣고  $800^\circ\text{C}$  로 온도를 상승시키고, 진공을 유지한다. 이 상태에서 N 전구체를 기체상태로 반응관으로 삽입하면서 30 분을 유지한 후 상온으로 냉각하여  $\text{NbNS}$  야누스 TMD 를 합성한다. 여타 V-XV-XVI (도 2c) 야누스 재료도 상기와 유사한 방법으로 합성할 수 있다.
- [0040] 도 2d는 XVII 그룹의 원자 최상층을 다른 XIV 그룹의 원자들로 치환한 YMX 구조를 갖는 야누스 재료이다. 예를 들면 XIV 그룹 원자인 C 를 XVII 그룹 원자인 Cl 을 치환하여  $\text{NbCCl}$  구조를 갖는 야누스 TMD 를 제조한다.
- [0041] 이와 관련된 합성 예는 다음과 같다. 단층  $\text{NbCl}_2$  를  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  기판 위에 성장시키고, 이 기판을 퍼니스 반응관내에 넣고  $800^\circ\text{C}$  로 온도를 상승시키고, 진공을 유지한다. 이 상태에서 C 전구체를 기체상태로 반응관으로 삽입하면서 30 분을 유지한 후 상온으로 냉각하여  $\text{NbCCl}$  야누스 TMD 를 합성한다. 여타 V-XIV-XVII (도 2d) 야누스 재료도 상기와 유사한 방법으로 합성할 수 있다.
- [0043] 이하, 본 발명을 실시예를 통해 구체적으로 설명하나, 하기 실시예 및 실험예는 본 발명의 한 형태를 예시하는 것에 불과할 뿐이며, 본 발명의 범위가 하기 실시예 및 실험예에 의해 제한되는 것은 아니다.



- [0045] [실시예 1]
- [0046] 도 3a와 같이 VI-XV-XVII 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합을 갖는 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층을 제조하였다.
- [0047] 도 3a에서 알 수 있는 바와 같이, 제조된 VI-XV-XVII 야누스 TMD는 열역학적 안정성을 나타내는 것을 확인할 수 있었다. 또한, 도 4a에서 알 수 있는 바와 같이, 제조된 VI-XV-XVII 야누스 TMD는 밴드갭이 0 내지 1.3eV으로 큰 에너지 밴드 갭을 갖는 것을 확인할 수 있으며, 이로 인해 밴드 갭의 제어를 통해 광전자 특성을 높일 수 있다. 아울러, 도 5a 및 도 6a을 참조하면, 제조된 VI-XV-XVII 야누스 TMD는 압전 계수  $d_{11}$ 이 0 내지 13pm/V이며, 압전 계수  $d_{31}$ 이 0 내지 1.5pm/V를 나타냄에 따라, 압전성이 우수함을 알 수 있다.
- [0049] [실시예 2]
- [0050] 도 3b와 같이 V-XV-XVI 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합을 갖는 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층을 제조하였다.
- [0051] 도 3b에서 알 수 있는 바와 같이, 제조된 V-XV-XVI 야누스 TMD는 열역학적 안정성을 나타내는 것을 확인할 수 있었다. 또한, 도 4b에서 알 수 있는 바와 같이, 제조된 V-XV-XVI 야누스 TMD는 밴드갭이 0 내지 0.8eV으로 큰 에너지 밴드 갭을 갖는 것을 확인할 수 있으며, 이로 인해 밴드 갭의 제어를 통해 광전자 특성을 높일 수 있다. 아울러, 도 5b 및 도 6b를 참조하면, 제조된 V-XV-XVI 야누스 TMD는 압전 계수  $d_{11}$ 이 0 내지 18pm/V이며, 압전 계수  $d_{31}$ 이 0 내지 0.7pm/V를 나타냄에 따라, 압전성이 우수함을 알 수 있다.
- [0053] [실시예 3]
- [0054] 도 3c와 같이 V-XIV-XVII 야누스 TMD에서 음이온 교환 구조의 다양한 조합을 갖는 전이금속 디칼코게나이드-유래 야누스 단분자층을 제조하였다.
- [0055] 도 3c에서 알 수 있는 바와 같이, 제조된 V-XIV-XVII 야누스 TMD는 열역학적 안정성을 나타내는 것을 확인할 수 있었다. 또한, 도 4c에서 알 수 있는 바와 같이, 제조된 V-XIV-XVII 야누스 TMD는 밴드갭이 0 내지 0.4eV으로 큰 에너지 밴드 갭을 갖는 것을 확인할 수 있으며, 이로 인해 밴드 갭의 제어를 통해 광전자 특성을 높일 수 있다. 아울러, 도 5c 및 도 6c를 참조하면, 제조된 V-XIV-XVII 야누스 TMD는 압전 계수  $d_{11}$ 이 0 내지 18pm/V이며, 압전 계수  $d_{31}$ 이 0 내지 0.6pm/V를 나타냄에 따라, 압전성이 우수함을 알 수 있다.
- [0057] 이상에서는 본 발명의 바람직한 실시예를 참조하여 설명하였지만, 해당 기술 분야의 숙련된 당업자 또는 해당 기술 분야에 통상의 지식을 갖는 자라면, 후술될 특허청구범위에 기재된 본 발명의 사상 및 기술 영역으로부터 벗어나지 않는 범위 내에서 본 발명을 다양하게 수정 및 변경시킬 수 있음을 이해할 수 있을 것이다.
- [0058] 따라서, 본 발명의 기술적 범위는 명세서의 상세한 설명에 기재된 내용으로 한정되는 것이 아니라 특허청구범위에 의해 정하여져야만 할 것이다.

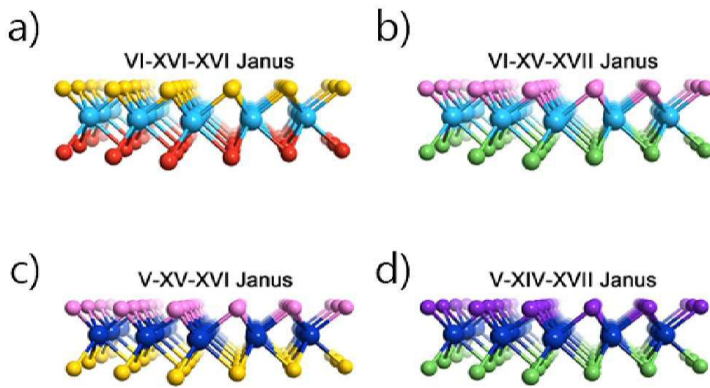
## 도면

### 도면1

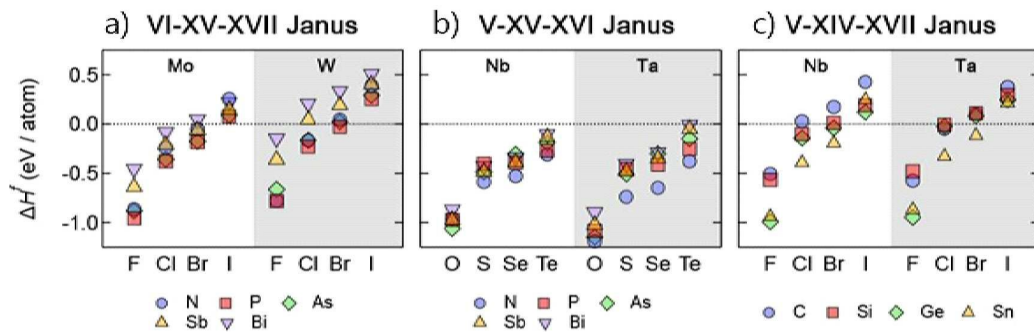




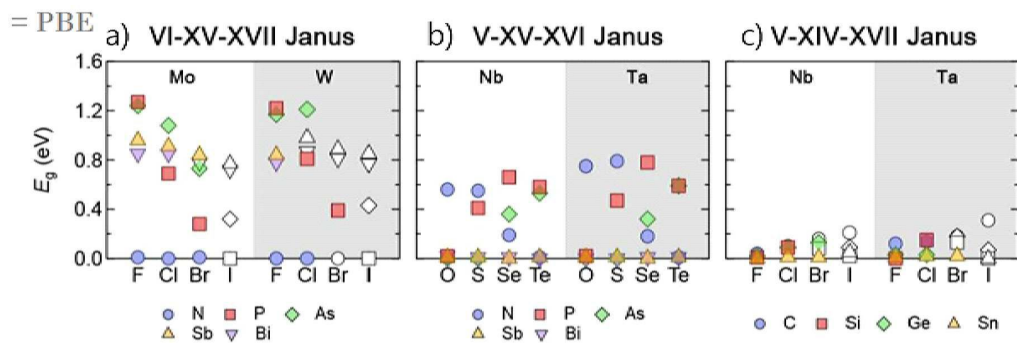
도면2



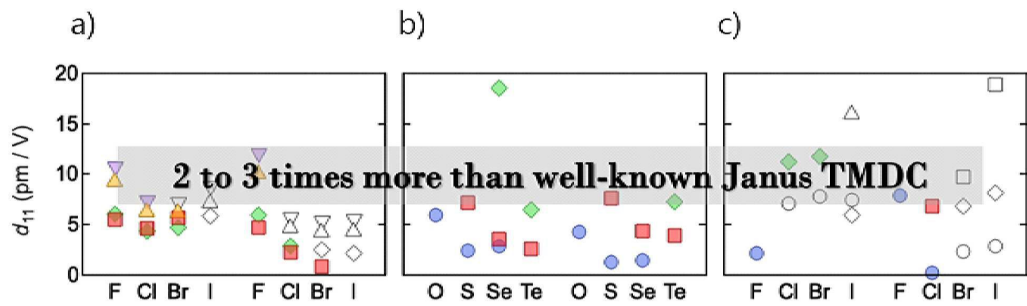
도면3



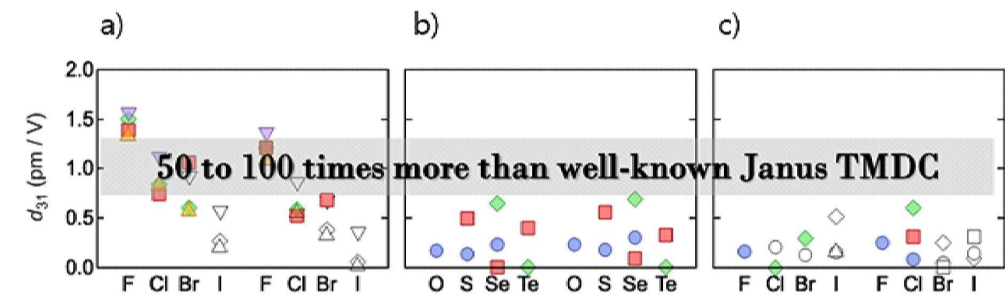
도면4



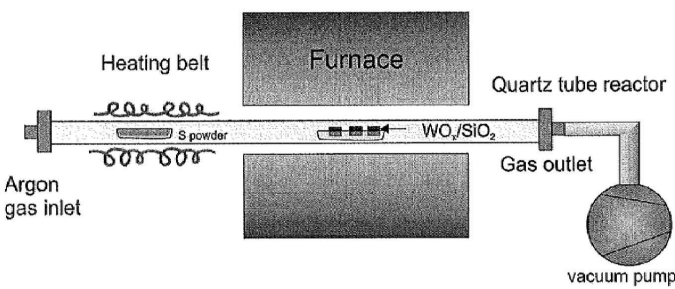
도면5



도면6



도면7



도면8

