

밀도범함수이론을 이용한 결함을 가지는 hexagonal boron nitride의 물성 예측 방법

임영빈
국민대학교 행정학과

Prediction of the Properties of Hexagonal Boron Nitride with Vacancy Defects

Youngbin Lym
Department of Public Administration, Kookmin University

요약 기계학습, 심층학습과 같은 인공지능 기술의 발달로 재료과학 분야에서도 컴퓨터 계산을 통한 재료의 특성을 예측하고자 하는 학문적 움직임이 활발히 일어나고 있다. 이 연구는 큰 밴드갭을 가지는 hexagonal boron nitride (h-BN)가 결함을 가질 때, 전기적 특성이 어떻게 변하는지 예측하는 방법을 밀도범함수이론을 활용하여 제시하고자 하였다. 구체적으로 h-BN 단일층에 붕소 결함, 질소 결함, 그리고 붕소-질소 결함이 존재하는 3가지 경우를 고려하여 계산하였다. 결함이 없는 h-BN 단일층의 경우, 밴드갭이 4.6 eV로 전기적 부도체인 결과가 얻어졌다. 단일공극인 붕소 결함 또는 질소 결함의 경우, 밴드갭 사이에 하나의 새로운 에너지 준위가 형성되었는데, 특히 질소 결함의 경우 전도대의 2 eV 아래에서 새로운 에너지 준위가 생성되는 것을 확인할 수 있었다. 붕소와 질소가 동시에 결함을 가지는 이중공극의 경우, 밴드갭 사이에 두 개의 에너지 준위가 생성되어(전도대로부터 1.3 eV과 1.8 eV 아래), 가전자대에서 전도대로 전자가 전이하기 쉬운 환경이 조성되는 것을 알 수 있었다. 따라서 h-BN 단일층에 결함의 개수가 증가하면 결함 상태로 밴드갭이 서서히 채워지고, h-BN 단일층의 전기적 특성은 부도체에서 도체로 접근한다는 사실을 파악할 수 있었다. 이 연구는 계산을 통하여 새로운 재료에 대한 특성을 어떻게 예측하고 활용할 수 있는지에 대한 방법론을 제시하고자 하였다.

Abstract Advances in artificial intelligence (AI), particularly machine learning and deep learning, have sparked interest in using computer calculations to predict material properties in material sciences. Density functional theory was used to propose a method for predicting the electrical properties of hexagonal boron nitride (h-BN) in the presence of vacancy defects. Three types of defects in the h-BN monolayer (boron vacancy, nitrogen vacancy, and boron-nitrogen vacancy) were considered. The pristine h-BN monolayer had an electrical band gap of 4.6 eV, indicating its insulating properties. A monovacancy with boron or nitrogen defects introduced a new energy level within the band gap. In the case of divacancy by boron and nitrogen defects, two energy levels emerged (i.e., 1.3 eV and 1.8 eV from the conduction band, respectively) between the band gap, producing an environment conducive to electron excitation from the valence to the conduction band. As defects in the h-BN monolayer increased, the band gap filled gradually with new energy states. Consequently, the electrical properties shifted from insulator to conductor. This research contributes a methodology for predicting the material properties through computational calculations, providing insights into the evolving electrical behavior of h-BN with varying defect densities.

Keywords : Boron Nitride, Computational Calculation, Density Functional Theory, Divacancy, Vacancy Defect

*Corresponding Author : Youngbin Lym(Kookmin University)

email: yblym0207@kookmin.ac.kr

Received December 11, 2023

Revised January 15, 2024

Accepted February 6, 2024

Published February 29, 2024

1. 서론

최근 발전하고 있는 인공지능과 더불어 재료과학의 영역도 기존에 얻어진 재료들의 데이터를 학습하여 재료에 대한 새로운 정보를 얻고자 하는 재료 정보학이 하나의 학문 분야로 자리를 잡고 있다. 컴퓨터와 인공지능이 발달하기 전까지 재료는 실험실에서 합성한 후, 측정을 통해서 그 특성을 알 수 있다는 것이 일반적인 인식이었다. 하지만 최근에 이르러 기계학습이나 심층학습과 같은 연산기법의 발달로 측정 또는 실험을 수행하지 않고도 재료의 특성을 예측할 수 있게 되었다[1-4].

이러한 움직임에 따라 최근 재료과학 분야에서도 슈뢰딩거방정식(Schrodinger's equation)에서 파생된 밀도범함수이론(密度汎関數理論)을 이용하여 실험을 하지 않고, 재료의 특성을 예측하거나 새로운 재료를 개발하고자 하는 연구가 수행되고 있다[5,6]. 특히, 이러한 학문적 움직임은 기존의 통념인 실험실에서의 작업을 통한 새로운 재료의 합성이라는 관점에서 벗어나 이론에 근거한 계산을 통해서도 신물질의 설계가 이루어질 수 있다는 것을 보여주고 있다.

이 연구는 밀도범함수이론을 활용하여 신물질의 전기적 특성을 예측할 수 있는 방법론을 제시하고자 한다. 본 연구의 주된 관심사인 질화붕소(boron nitride)는 높은 열적 안정성[7,8]과 큰 밴드갭(band gap)[9-14]에서 기인한 전기적 특성으로 인해 최근 많은 주목을 받고있는 물질이다. 특히 h-BN의 경우, 2,973°C의 높은 녹는점(melting point)으로 인해 열적 안정성을 요구하는 분야에서는 그 활용도가 높은 반면, 큰 밴드갭으로 인해 전기적으로 부도체(insulator)의 특징을 지니고 있다[15,16]. 따라서 부도체의 특성을 전기가 잘 통하는 도체(conductor)의 특성으로 바꾸는 일은 학문적으로 매우 도전적인 의미를 가지며, 기계학습 기술이 비약적으로 발전하고 있는 학문적 분위기와 함께, 이론적으로 성질이 변할 수 있는 상태를 컴퓨터로 계산하여 가능성을 탐색해 본다는 것은 매우 의미 있는 일이라 하겠다.

여기서는 h-BN 단일층(monolayer)에 원자결함(atomic vacancy)이 생성되었을 때, 전기적으로 부도체인 특성이 어떻게 변하는지 예측하고, 그 이유를 규명하고자 하였다. 공극의 경우, 한 개의 원자가 결함으로 존재하는 단일공극(monovacancy)과 이웃한 2개의 원자가 결함으로 존재하는 이중공극(divacancy)을 고

려하여 계산하였다. 특히, h-BN의 경우 서로 다른 두 종류의 원자 구성으로 이루어지기 때문에 단일공극의 경우는 붕소 결함과 질소 결함 두 경우를 모두 고려하였다.

이 연구는 밀도범함수이론을 활용하여 그 연산을 수행하였으며, 각각의 공극 생성 여부에 해당하는 전자밴드 구조(electronic band structure)와 상태밀도(DOS : density of states, DOS, 이하 상태밀도)를 계산하였다. 나아가 h-BN의 전기적 특성이 변화하는 이유도 설명하고자 하였다.

2. 본론

이 연구는 open source 소프트웨어인 OPENMX를 활용하여 모든 계산을 수행하였다[17]. 계산에서 고려한 모델의 크기는 x축과 y축 모두 20.036 Å으로, 붕소 원자 64개, 질소 원자 64개, 총 128개의 원자로 구성되었다. 또한, 경계 효과를 최소화하기 위해서 z축으로 20 Å 이상의 vacuum space를 확보하여 수치 안정성과 물리학적 의미를 보존하였다. 전자 상호작용을 나타내기 위해 Exchange-Correlation Function 중에서 GGA-PBE (Generalized Gradient Approximation - Perdew, Burke, Ernzerhof) 방법이 사용되었다. 모든 계산에서 spin polarization을 고려하였으며, cutoff energy 값은 220 Ryd로 설정하였다. k-point grid의 크기는 5×5×1, 그리고 self-consistent field 계산의 수렴 기준은 1×10⁻⁷로 설정하였다.

원자결함의 경우, 단일공극과 이중공극의 두 경우가 고려되었다. 구체적으로 결함이 없는 h-BN 단일층에서 붕소 원자와 질소 원자를 제거하여 공극 결함(defect)을 가지는 모델을 구성하였다. 단, h-BN이 붕소와 질소의 각각 다른 원자로 구성된 물질이기 때문에, 붕소 공극, 그리고 질소 공극의 두 경우 모두 계산에 반영하였다. 또한, 이중공극의 경우, 떨어져 있는 각각의 원자가 아닌 서로 이웃한 붕소와 질소 원자를 제거하여, 한 곳에서 이중공극 결함을 가지는 모델을 구성하였다.

각각의 공극을 가지는 모델들은 에너지적으로 완전히 안정화 될 때까지 완화(relaxation, 이하 완화)이 실행되었다. 이후, 완화된(relaxed) 구조를 이용하여 self-consistent field 계산을 수행하였고, 추가로 전자밴드 구조와 상태밀도를 계산하였다.

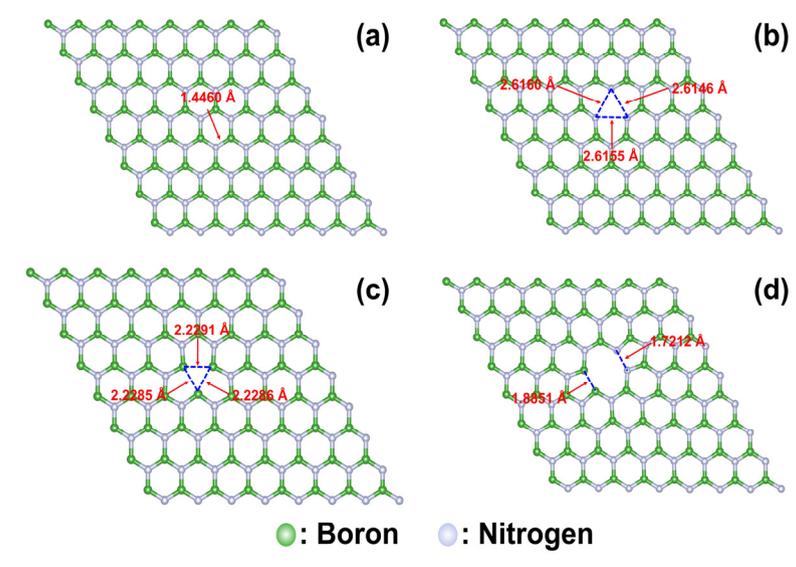


Fig. 1. Relaxed structures of h-BN monolayer with (a) no vacancy, (b) boron vacancy, (c) nitrogen vacancy, and (d) boron and nitrogen vacancies.

3. 결과 및 고찰

3.1 완화된 구조(Relaxed structure)

Fig. 1은 pristine h-BN 단일층과 각각의 공극을 가지는 구조를 완화시킨 후 얻어진 구조이다. 먼저 Fig. 1(a)와 같이 결함이 없는 경우는 B-N 사이의 결합길이 1.4460 Å으로 일정한 것으로 계산되었다. 이 결과는 Table 1에 제시된 바와 같이 선행연구의 결과와 동일한 것으로[18,19], 이 연구의 계산 결과가 신뢰할 만하다는 것을 입증하고 있다. 또한, N-N 사이의 거리는 2.5045 Å, B-B 사이의 거리 역시 2.5045 Å인 것으로 계산되었다. 그리고 B-N-B 원자들이 이루는 각도와 N-B-N 원자들이 이루는 각도 모두 120°로 동일한 것으로 나타났다. 이는 h-BN 단일층이 육각형의 완벽한 대칭인 안정적 구조를 가짐을 의미한다고 하겠다.

Table 1. Comparison of the distance between boron and nitrogen

	In this work (PBE)	PBE ^[18]	B3LYP ^[19]
Distance between B and N	1.4460 Å	1.45 Å	1.446 Å

Fig. 1(b)는 붕소 원자가 공극인 경우, 완화가 끝난 h-BN 단일층 구조를 나타낸다. 공극결함 주위에 있는 N-N 원자들 간의 거리를 계산한 결과, 각각 2.6155, 2.6146, 2.6160 Å인 것으로 나타났다. 이 값은 결함이 없는 h-BN 단일층에서 계산된 N-N 사이의 거리 2.5045 Å보다 큰 값으로, 질소 원자 사이에 존재하는 땀글링 결합(dangling bond)에 의한 반발력으로 인해 거리가 넓어지게 된 것이라 볼 수 있다.

질소 원자가 공극을 가지는 경우 완화 후 원자구조는 Fig. 1(c)와 같으며, 공극 주변의 붕소 원자들 간 거리가 감소한 것으로 보여지고 있다. 실제로 계산해 본 결과, B-B 원자들 사이의 거리는 2.2286, 2.2291, 2.2285 Å로, 결함이 없는 구조에서 계산된 값인 2.5045 Å보다 작은 것을 알 수 있다. 이는 붕소 원자들 사이에 존재하는 전자들이 약한 공유결합을 형성하고 있어 원자들 간 거리가 감소하였다고 해석할 수 있다.

Fig. 1(d)는 붕소와 질소 공극이 있는 경우에 완화가 끝난 후 h-BN의 단일층 구조를 나타낸 것으로, 원자결함 주위로 심한 구조의 변형이 일어났음을 알 수 있다. 개별 원자 사이의 거리를 계산해 보면, B-B 원자 사이의 거리는 1.8851 Å, N-N 원자의 경우 1.7212 Å로 나타났다. 이 수치들은 결함이 없는 구조에서 계산된 값들인 2.5045 Å보다 작은 값이며, 원자결함 주위로 구조의 변형이 일어났을 때, 거리의 감소 폭이 커짐을 의미한다고 하겠다.

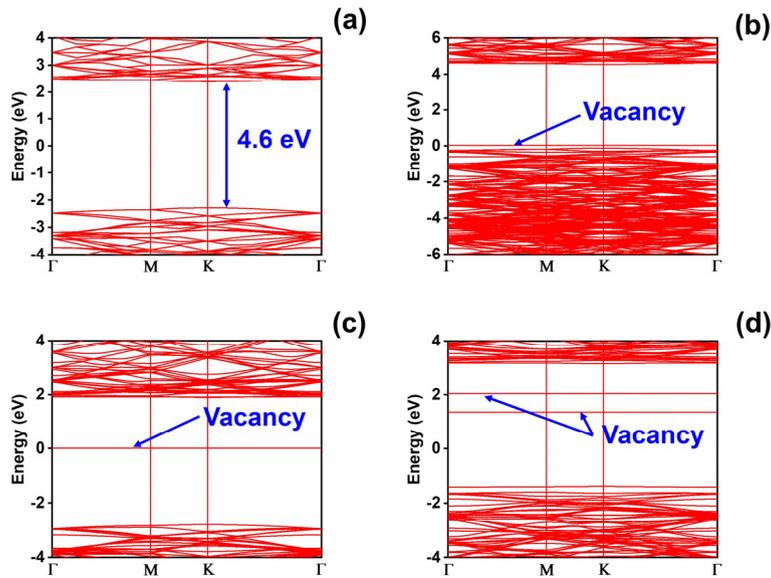


Fig. 2. Electronic band structure of h-BN monolayer with (a) no vacancy, (b) boron vacancy, (c) nitrogen vacancy, and (d) boron and nitrogen vacancies.

이처럼, 우리는 원자결합의 존재가 h-BN 단일층의 구조에 변형을 가져온다는 사실을 알 수 있었으며, 단일 공극의 경우보다 이중공극의 경우가 더 많은 변형을 가져온다는 사실을 파악할 수 있었다.

3.2 전자밴드구조(Electronic band structure)

Fig. 2는 결합이 없는 h-BN 단일층과 각각의 결합이 존재하는 구조를 완화한 후, 얻어진 전자밴드구조를 나타낸다. 모든 그림은 페르미 준위(Fermi level)가 0에 맞추어 그려졌다. Fig. 2(a)는 결합이 없는 온전한 h-BN 단일층의 전자밴드구조로, 가전자대(valence band)와 전도대(conduction band) 사이의 gap이 4.6 eV로 계산되었다. 이 수치는 다수의 선행 이론 연구에서 제시된 값과 일치하며, 본 연구에서 수행한 계산이 신뢰할 수 있음을 의미한다고 하겠다[9-12, 17, 18].

Fig. 2(b)는 붕소 원자가 결합일 때 계산된 전자밴드구조를 보여주고 있다. 이때, 밴드갭의 크기는 Fig. 2(a)와 큰 차이가 없지만, 결합이 없는 구조의 전자밴드구조와는 다르게 페르미 준위가 가전자대에 붙어 있는 것을 볼 수 있다. 이는 p-type 도핑(doping)이 된 경우로 전기적으로 매우 전도성을 가지는 것이라 해석할 수 있다.

한편, 질소 원자가 결합일 때 계산된 전자밴드구조는

Fig. 2(c)에 제시되어 있으며, 새로운 에너지 준위가 페르미 준위를 따라서 생성된 것을 볼 수 있다. 이것은 전자가 가전자대에서 전도대로 이동할 수 있는 확률이 높아졌음을 의미한다.

Fig. 2(d)는 붕소 및 질소 원자가 동시에 결합을 형성하고 있는 구조에서 계산된 전자밴드구조이다. 앞의 경우와는 다르게, 밴드갭 사이에 2개의 새로운 에너지 준위가 생성된 것을 볼 수 있다. 이는 전자가 존재할 수 있는 에너지 상태가 늘어났기 때문에, 단일공극 결합의 경우와 비교하여, 가전자대에서 전도대로의 전자 이동 확률이 높아졌음을 의미한다.

3.3 상태밀도

앞의 전자밴드구조 분석을 통해 h-BN 단일층에 단일 공극과 이중공극이 만들어지면, 밴드갭 사이에 새로운 에너지 상태가 생성됨을 확인하였다. 이러한 새로운 에너지 상태의 생성에 대한 원인 파악과 적절한 설명은 학문적으로 중요한 의미가 있다. 원자결합에 의해 밴드갭에 새로 생성된 에너지 상태의 기원을 파악하기 위하여, 상태밀도를 계산하였다. 앞의 분석과 마찬가지로 모든 상태밀도는 페르미 준위 0에 맞추어 제시되었다.

Fig. 3(a)는 결합이 없는 h-BN 단일층에서 계산된 상

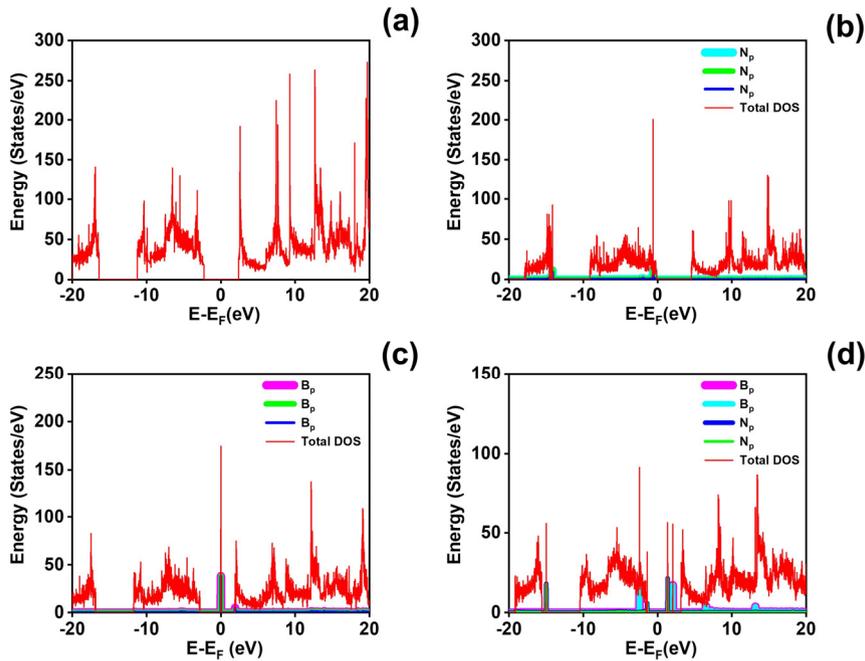


Fig. 3. Density of states of h-BN monolayer with (a) no vacancy, (b) boron vacancy, (c) nitrogen vacancy, and (d) boron and nitrogen vacancies.

태밀도를 나타낸다. Fig. 2(a)와 같이 전자밴드갭이 4.6 eV이고 가전자대와 전도대 사이에는 어떠한 에너지 상태도 존재하지 않는 것을 볼 수 있다. 이 결과는 본 연구에서 사용한 GGA-PBE 방법을 이용하여 h-BN 단일층의 상태밀도를 계산한 선행 연구들과 일치한다[9-12]. 이는 본 연구의 접근방식과 계산 결과의 신뢰성을 나타내준다 하겠다. 특히, 선행 연구들과는 차별적으로 본 연구에서는 $8 \times 8 \times 1$ 의 큰 모델에서 계산을 수행하였기 때문에, 실제 h-BN의 단일층에서 발생하는 현상에 근접한 계산결과를 기대할 수 있다 하겠다.

붕소 원자가 결합인 경우의 상태밀도는 Fig. 3(b)에 나타나 있다. Fig. 2(b)에 제시된 바와 같이 페르미 준위가 가전자대의 끝에 위치해 있는 것을 볼 수 있다. 그리고 예상상태밀도(Projected density of states, PDOS, 이후 예상상태밀도) 계산을 추가로 실행한 결과, 공극결합 주위에 있는 질소 원자들의 p-orbital로 인해 가전자대의 끝부분에 새로운 에너지 상태(state)들이 생성되어 있음을 볼 수 있다. 이것은 전자밴드구조 분석에서는 알 수 없었던 것으로, 원자결함으로 인한 영향이 어느 부분에 형성되었는지를 설명해 주는 결과라 하겠다.

Fig. 3(c)는 질소 원자가 결합을 가질 때에 계산된 상태밀도를 표현한 것이다. 앞의 전자밴드구조에서 계산된

결과인 Fig. 2(c)와 같이 새로운 에너지 상태가 페르미 준위를 따라서 존재하는 것을 볼 수 있다. 그리고 이 상태가 왜 일어나는 것인지 알아보기 위해서 예상상태밀도 계산을 추가로 실행하였다. 분석결과에 따르면, 새로 생긴 에너지 상태는 질소 공극 주위에 있는 붕소 원자들의 p-orbital로 인한 상태인 것으로 밝혀졌다.

Fig. 3(d)는 붕소와 질소 원자들이 이중공극 상태로 존재하는 구조의 상태밀도와 예상상태밀도를 나타내고 있다. 그림에 표시된 바와 같이, 공극결합 주위의 붕소와 질소 원자들의 p-orbital로 인해 2개의 새로운 에너지 상태가 1~2 eV 사이에 생성되었음을 알 수 있다. 즉, 이중공극의 경우, 단일공극의 경우에 비해 많은 에너지 상태가 존재하고 있음을 확인할 수 있다.

4. 결론

이 연구는 밀도범함수이론을 이용하여, 새로운 재료의 변형된 특성에 대해 계산을 통해 예측하는 방법을 제시하고자 하였다. 붕소 원자와 질소 원자가 각각 결합을 가진 단일공극의 경우와 두 원자가 이웃하여 동시에 결합을 가지는 이중공극의 경우를 고려하여 연구를 수행하였

다. OPENMX를 활용한 계산과 이에 대한 분석을 통해 다음과 같은 결과를 얻을 수 있었으며, 이 연구는 발전하는 컴퓨터 기술을 활용하여 새로운 물질의 특성을 예측할 수 있는 가능성을 제시한 연구사례라 하겠다.

첫째, 단일공극의 경우, 밴드갭에 공극결합 주위 원자들의 p-orbital로 인해 새로운 에너지 준위가 1개 생성되었다. 특히, 질소 원자결합의 경우 전도대의 2 eV 아래에서 새로운 에너지 준위가 생성되었다.

둘째, 이중공극의 경우, 밴드갭 사이에 2개의 새로운 에너지 상태가 생성되었는데, 이것은 이중공극 주변에 존재하는 붕소와 질소 원자의 p-orbital에서 기인하는 것으로 밝혀졌다. 구체적으로 전도대로부터 1.3 eV와 1.8 eV의 아래에 두 개의 에너지 상태가 생성되는 것으로 나타났다.

셋째, 부도체인 h-BN에 원자결합을 생성하면, 밴드갭 사이에 새로운 에너지 상태들이 생성되면서 가전자대에 존재하는 전자가 전도대로 전이하기 수월한 환경이 만들어짐을 알 수 있었다.

넷째, 전기적으로 부도체인 물질에 공극결합을 생성하면 전기가 통하는 전도성 물질로 성질이 바뀌게 될 것이라 예상된다.

References

- [1] A. Y.-T. Wang, R. J. Murdock, S. K. Kauwe, A. O. Oliynyk, A. Gurlo, J. Brgoch, K. A. Persson, T. D. Sparks, "Machine learning for materials scientists: An introductory guide toward best practices", *Chemistry of Materials*, Vol.12, No.32, pp.4954-4965, May 2020. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c01907>
- [2] X. Zhong, B. Gallagher, S. Liu, B. Kailkhura, A. Hiszpanski, T. Y.-J. Han, "Explainable machine learning in materials science", *npj Computational Materials*, Vol.8, article number: 204, May 2022. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00884-7>
- [3] J. Schmidt, M. R. G. Marques, S. Botti, M. A. L. Marques, "Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science", *npj Computational Materials*, Vol.5, article number: 83 Aug.2019 DOI: <https://doi.org/10.1038/s41524-019-0221-0>
- [4] P. Karande, B. Gallagher, T. Y.-J. Han, "A strategic approach to machine learning for material science: how to tackle real-world challenges and avoid pitfalls", *Chemistry of Materials*, Vol.34, No.22, pp.7650-7665, Sep.2022. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.2c01333>
- [5] M. J. van Setten, H.k F. W. Dekkers, C. Pashartis, A. Chasin, A. Belmonte, R. Delhougne, G. S. Kar, G. Pourtois, "Complex amorphous oxides: property prediction from high throughput DFT and AI for new material search", *Materials Advances*, Vol.3, pp.8413-8427, Oct. 2022. DOI: <https://doi.org/10.1039/D2MA00759B>
- [6] A. Azaid, T. Abram, M. Alaqrabeh, M. Raftani, R. Kacimi, A. Sbai, T. Lakhlifi, M. Bouachrine, "Design new organic material based on triphenylamine (TPA) with D- π -A- π -D structure used as an electron donor for organic solar cells: A DFT approach", *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, Vol.122, pp.108470, Jul. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2023.108470>
- [7] C. Ronning, E. Dreher, H. Feldermann, M. Gross, M. Sebastian, H. Hofsäss, "Electrical properties and thermal stability of ion beam deposited BN thin films", *Diamond and Related Materials*, Vol.6, pp.1129-1134, Jul. 1997. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0925-9635\(97\)00021-6](https://doi.org/10.1016/S0925-9635(97)00021-6)
- [8] N. Kostoglou, K. Polychronopoulou, C. Rebholz, "Thermal and chemical stability of hexagonal boron nitride (h-BN) nanoplatelets", *Vacuum*, Vol.112, pp.42-45, Feb. 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2014.11.009>
- [9] D. S. Fartab, A. A. Kordbacheh, "Lithium doping and vacancy effects on the structural, electronic and magnetic properties of hexagonal boron nitride sheet: A first-principles calculation", *Superlattices and Microstructures*, Vol.118, pp.185-195, Jun. 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.04.002>
- [10] S.-Y. Xia, L.-Q. Tao, T. Jiang, H. Sun, J. Li, "Rh-doped h-BN monolayer as a high sensitivity SF6 decomposed gases sensor: A DFT study", *Applied Surface Science*, Vol.536, pp.147965, Jan. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.147965>
- [11] H. Cui, T. Liu, P. Jia, "A DFT study of healing the N vacancy in h-BN monolayer by NO molecules", *Applied Physics A*, Vol.126, article number: 292, Mar. 2020. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-020-03470-0>
- [12] J. Zhang, J. Tian, Q. Zhang, Y. Lu, L. Li, Y. Xu, "Adsorption of NO and NO2 on Rh-doped hexagonal boron nitride monolayers: A first-principles study", *ChemistrySelect*, Vol.6, pp.13609-13615, Dec. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.202103567>
- [13] T. C. Sagar, V. Chinthapenta, "Effect of substitutional and vacancy defects on the electrical and mechanical properties of 2D-hexagonal boron nitride", *Journal of Molecular Modeling*, Vol.26, article number: 192, Jul. 2020. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00894-020-04452-y>
- [14] M. S. Si, D. S. Xue, "Magnetic properties of vacancies in a graphitic boron nitride sheet by first-principles pseudopotential calculations", *Physical Review B*, Vol.75, pp.193409, May 2007. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.193409>

- [15] L. Liang, Y. Feng, K. Yang, Z. Wang, Z. Zhang, X. Chen, Q. Chen, "High thermal conductivity electrical insulation compositeEP/h-BN obtained by DC electric field induction", *Polymer Composites*, Vol.45, pp.1-962, Jan. 2024.
DOI: <https://doi.org/10.1002/pc.27767>
- [16] M. Li, M. Wang, X. Hou, Z. Zhan, H. Wang, H. Fu, C.-T. Lin, L. Fu, N. Jiang, J. Yu, "Highly thermal conductive and electrical insulating polymer composites with boron nitride", *Composites Part B*, Vol., 107746, Mar. 2020.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2020.107746>
- [17] T. Ozaki, H. Kino, "Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method", *Physcal Review B*, Vol.72, pp.045121, Jul. 2005.
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.045121>
- [18] A. M. Satawara, G. A. Shaikh, S. K. Gupta, P. N. Gajjar, "Structural, electronic and optical properties of hexagonal boron-nitride (h-BN) monolayer: An Ab-initio study", *Materials Today: Proceedings*, Vol.47, pp.529532, Sep. 2021.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.10.589>
- [19] H. Kokten, Ş. Erkoc, "A study on Si and P doped h-BN sheets: DFT calculations", *Turkish Journal of Physics*, Vol.38, pp.369-374, Jan. 2014.
DOI: <https://doi.org/10.3906/fiz-1406-17>

임 영 빈(Youngbin Lym)

[정회원]



- 2020년 8월 : 오하이오주립대학교 도시 및 지역계획학과 (도시 및 지역계획학 박사)
- 2021년 9월 ~ 2022년 8월 : 충남대학교 자연과학연구소 박사후연구원
- 2022년 9월 ~ 현재 : 국민대학교 행정학과 조교수

<관심분야>

베이지안 통계학, 데이터 과학, 도시 및 지역안전, 공간정보 활용