



서울대학교
SEOUL NATIONAL UNIVERSITY

보도자료

<http://www.snu.ac.kr>

연구단장/연구책임자 이성근(Lee, Sung Keun)교수
(제1/교신저자), 김용현 연구원,
서울대학교 지구환경과학부 e-mail: sungklee@snu.ac.kr

백만 기압 이상의 극한 고압환경에서의 비정질의 결합구조 규명

지구상의 물질은 원자단위의 배열의 규칙성의 여부에 따라 규칙적인 단위가 반복되는 결정질과, 규칙적으로 원자가 배열되지 않고, 무질서도를 가지는 비정질(예, 유리, 마그마 용융체)로 구분됩니다.

결정질은 압력이 증가함에 따라, 특정압력에서 밀도가 높은 원자구조를 가지는 상으로 급격히 전이합니다. 이에 비하여, 비정질은 특정압력이 아니라, 넓은 압력 범위에서 점이적으로 변하는 것으로 예상되며, 특히 백만기압 [대기압의 100만배의 압력, 메가바(megabar), 혹은 100 기가파스칼(GPa)]이상의 극한적인 고압환경에서 비정질의 원자구조는 1기압이나, 상대적으로 낮은 압력범위 (예, 수만기압에서 50-60만기압)이하에서의 비정질의 구조와 매우 다를 것으로 추정됩니다. 지구나 행성 내부에서의 마그마 용융체도 비정질이며, 특히 지구의 외핵과 맨틀의 경계 (~120-130 만기압)에서 마그마가 존재할 것으로 추정되므로 핵-맨틀경계를 이해하기 위해 극한고압에서의 비정질의 원자구조의 규명이 필수적입니다.

이러한 중요성에도 불구하고, 비정질 고유의 무질서도와 적절한 실험 방법의 부재로 비정질 산화물의 백만 기압이상의 압력에서의 원자구조를 규명하는 것이 현대과학이 찾아야 할 '성배'로 간주되고 있습니다.

서울대학교의 자연과학대학 지구환경과학부 이성근 교수 연구팀은 미국 카네기 재단 연구팀과 공동으로, 지구상에 존재하는 산화물(산소화합물) 중 상온에서 가장 가볍고 간단한 조성의 비정질 산화물인 보래이트로(B_2O_3)의 비탄성 x-선 산란 시그널을 백만기압 이상의 극한환경에서 최초로 획득하였습니다.

120만 기압의 극한압력조건에서 원자들이 치밀하게 재배열을 겪는 과정에서 산소 간의 거리가 저압조건에 비하여 급격하게 감소함에도 불구하고, 20만기압 에서

형성된 ^{14}B (배위수가 4인 보론)가 극한환경에서도 안정한 것을 밝혀냈습니다. 이러한 결과는 다른 비정질 산화물(예, SiO_2 나 GeO_2)의 압력에 따른 거동과 매우 다른 것으로, 1기압에서 실리콘(Si)이나 게르마늄(Ge)주변의 배위수가 4이고, 압력의 증가에 따라, 배위수가 5, 6인 구조가 점이적으로 형성되며, 120만기압 이상에서는 배위수가 7인 구조들이 형성되는 것과 대비됩니다. 이로부터, 비정질 산화물을 구성하는 원자의 원자반지름이 작을 경우, 더 높은 압력에서 배위수가 전이되는 것을 실험적으로 검증하여, 극한고압환경에서 원소들의 다양한 배위수 변화를 최초로 체계적으로 정립하였습니다.

본 연구결과는 백만기압 이상의 극한환경에서 결합구조를 변화를 비탄성 산란을 이용하여 규명한 최초의 연구결과이며 지구의 맨틀과 핵의 경계의 극한고압환경 마그마 용융체의 고밀도화의 원자단위의 기원을 제공하며, 이러한 결과들로부터 지구의 하부 맨틀이나, 다른 거대지구(super-earth)의 극한압력 상태에서의 다성분계 비정질 마그마의 원자구조-물성 변화를 설명할 수 있을 것으로 기대합니다.

□ 연구진: 서울대학교 자연과학대학 지구환경과학부 이성근 교수의 연구팀은, 미국의 카네기재단 지구물리연구소의 셴 박사 연구팀과 공동으로, 백만기압 이상의 극한의 고압환경에서 비정질의 원자구조의 변화를 비탄성 x-선 산란을 이용하여 세계 최초로 규명하였습니다. 연구논문이 미국 국립과학원 회보 (PNAS, Proceedings of National Academy of Sciences of the United States of America)에 한국시간 2018년 5월 22일 (화요일) 오전 4시 [미국동부 (Eastern time) 시간으로 5월 21일 오후 3시] 온라인 판에 출판되었습니다 (<http://www.pnas.org/content/early/2018/05/15/1800777115>).

논문제목 "Amorphous Boron Oxide at Megabar Pressures via Inelastic X-ray Scattering"

학술지 미국 국립과학원회보 (PNAS, Proceedings of National Academy of Sciences of the United States of America)

저자 이성근(Lee, Sung Keun)교수 (제1/교신저자), 김용현 연구원, 서울대학교 지구환경과학부 e-mail: sungklee@snu.ac.kr/ 폴 초(Paul Chow) 박사, 윤밍 샤오(Yunming Xiao) 박사, 첩 지(Cheng Ji) 박사, 구엔 셴(Guoyin Shen) 박사, 미국 카네기 재단 지구물리연구소 (Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington, USA)

□ 내용 및 의의:

-지구상의 물질은 원자단위의 배열의 규칙성의 여부에 따라 규칙적인 단위가 반복되는 결정질과 규칙적으로 원자가 배열되지 않고 무질서도를 가지는 비정질(예, 유리, 마그마 용융체)로 구분됩니다.

-결정질은 압력이 증가함에 따라, 특정압력에서 밀도가 높은 원자구조를 가지는 상으로 급격히 전이합니다(배경지식1). 예를 들어, 1기압에서는 탄소가 흑연의 원자구조를 가지나, 압력이 5만기압에 도달하면 다이아몬드로 전이합니다.

-이에 비하여, 비정질의 원자구조(예, 배위수, 양이온 주변의 산소의 개수)는 특정 압력이 아니라, 넓은 압력범위에서 점이적으로 변하는 것으로 예상됩니다. 특히 백만기압 [대기압의 100만배의 압력, 메가바(megabar), 혹은 100 기가파스칼(GPa)] 이상의 극한적인 고압환경에서 비정질의 원자구조는 1기압이나 상대적으로 낮은 압력범위(예, 수만기압에서 50-60만기압)이하에서의 비정질의 구조와 매우 다를 것으로 추정됩니다. 또한 비정질의 조성에 따라 각기 다른 압력범위에서 배위수가 변하는 것으로 추정됩니다.

-지구내부에서의 마그마 용융체도 비정질이며, 특히 외핵과 맨틀의 경계 (~120-130 만기압)에서 마그마가 존재할 것으로 추정되므로, 핵-맨틀경계를 이해하기 위해서 극한고압에서의 비정질의 원자구조의 규명이 필수적입니다.

-이러한 중요성에도 불구하고, 비정질 고유의 무질서도와 적절한 실험 방법의 부재로 비정질 산화물의 백만기압이상의 압력에서 원자구조를 규명하는 것이 현대 과학이 찾아야 할 '성배'로 간주되고 있습니다.

-이는 비정질 산화물의 결합구조 분석에 유용한 비탄성 x-선산란방법(혹은 x-ray Raman)이 100만 기압이상의 극한 고압에서 수행하는 것이 불가능하였기 때문입니다(아래 배경설명II). 이에, 백만기압은 비탄성 x-선 산란으로는 도달할 수 없는 벽으로 여겨졌습니다.

-서울대학교 연구팀은 미국카네기재단 연구팀과 공동으로, 지구상에 존재하는 산화물(산소화합물) 중 상온에서 가장 가볍고 간단한 조성의 비정질 산화물인 보라이트(B_2O_3)의 비탄성 x-선산란 시그널을 백만기압이상의 극한환경에서 최초로 획득하였습니다.

실험 결과:

1) 지구내부의 약 2900 km까지의 압력에 해당하는 120만기압의 극한 고압압력에서 비정질 산화물의 원자 구조의 변화를 최초로 규명하였습니다.

2) 극한압력조건에서 원자들이 치밀하게 재배열을 겪는 과정에서 산소간의 거리가 저압조건에 비하여 급격하게 감소함에도 불구하고, 20만기압 에서 형성된 ^{41}B (배위수가 4인 보론)가 120만기압에서도 안정한 것을 밝혀냈습니다. 이러한 결과는 다른 비정질 산화물(예, SiO_2 나 GeO_2)인 경우, 1기압에서 실리콘(Si)이나 게르마늄(Ge)주변의 배위수가 4이고, 압력의 증가에 따라, 배위수가 5, 6인 구조가 점이적으로 형성되며, 120만기압 이상에서는 배위수가 7인 구조들이 형성되는 현상과 극명히 대비됩니다.

3) 연구팀은 이러한 차이는 보론이 실리콘이나 게르마늄에 비하여 원자반지름이 작은 것에 기인하며, 비정질 산화물을 구성하는 원자의 원자반지름이 작을 경우, 더 높은 압력에서 배위수가 전이되는 것을 실험적으로 검증하여, 극한고압환경에서 원소들의 다양한 배위수 변화를 최초로 체계적으로 정립하였습니다.

의의

1) 본 연구결과는 백만기압이상의 극한환경에서 결합구조를 변화를 비탄성 산란

을 이용하여 규명한 최초의 연구결과입니다. 따라서, 본 연구에서 사용한 비정질 산화물들 외에 다양한 물질들의 백만기압 이상의 고압환경에서 원자구조를 비탄성 x-선 산란을 이용하여 규명할 수 있을 것으로 예상됩니다.

2) 본 연구결과는 지구의 맨틀과 핵의 경계의 극한고압환경 마그마 용융체의 고밀도화의 원자단위의 기원을 제공하며, 이러한 결과들로부터 지구의 하부맨틀이나, 다른 거대지구(super-earth)의 극한압력 상태에서의 다성분계 비정질 마그마의 원자구조-물성 변화를 설명할 수 있을 것으로 기대합니다.

□ 교신저자 소개

성명: 이성근 (1971 년 6 월생, 만 46세)

서울대학교 자연과학대학 지구환경과학부 부교수

박사: 스탠포드대학교 지질환경학과 (부전공: 화학)

석사: 스탠포드대학교 화학공학과

석사: 서울대학교 지질학과

학사: 서울대학교 지질학과 (부전공: 재료공학)

□ 연구비 지원 프로그램

한국 연구재단과 삼성미래기술재단의 지원으로 수행되었습니다.

배경 지식: 전술한 연구결과와 의의에 대한 배경지식과 단어에 대한 설명이 아래에 추가되어 있으므로 참고하기 바랍니다.

1) 결정의 상전이. 1기압에서는 탄소가 흑연의 원자구조(이 경우, 탄소가 주변에 3개의 탄소와 공유결합을 합니다)에서, 압력이 5만기압에 도달하면 (절대온도 1500 K) 치밀한 원자구조를 가진 다이아몬드로 전이합니다(이 경우, 탄소주변에 4개의 탄소와 공유결합을 합니다).

2) 탄성 x-선과 비탄성 x-선: 탄성 x-선은 구조분석을 위하여 조사된 x-선과 시료에 산란된 x-선의 파장이 동일합니다. 이 경우 x-선 산란 시그널이 매우 강력하고 직접적인 구조정보를 획득할 수 있습니다. 이 방법은 일반적으로 결정질의 구조분석에 사용되며, 상기한 장점에도 불구하고, 비정질의 원자구조 같이 숨겨진 미시적 정보를 얻는데 제한적입니다. 비탄성 x-선 산란은 조사된 x-선과 시료에 산란된 x-선의 파장이 동일하지 않으며, 비정질산화물의 경우에서와 같이 가려져 있는 (직접적인 질문으로 답을 구할 수 없는 미묘한 광자-전자 상호관계에 기인한)정보

를 얻는데 유리합니다. 그러나 탄성 x-선에 비하여 시그날이 수천배에서 수백만배 작으므로, 압력이 증가할수록 시료의 정보를 얻기가 어려워집니다.

3) 비탄성-x-선 산란과 비정질 보라이트: 서울대학교의 이성근교수연구팀은 비탄성 x-선 산란을 이용하여 비정질 산화물의 연구하였으며, 2005년에 23만기압하의 비정질보라이트의 구조변화를 *Nature Materials*지에 보고하였습니다. 이후 많은 선도적인 연구팀들이 100만기압이상의 비탄성 x-선 산란결과를 얻기 위하여 노력하였으며, 본 연구는 세계최초로 실험적으로 100만기압이상의 압력으로 획득한 비탄성 x-선 산란결과이며, 이것이 금주에 PNAS에 출판되었습니다.

미국 국립과학원 회보(PNAS, Proceedings of National Academy of Sciences of the United States of America)에 대하여: PNAS는 물리/화학/생물/지구과학전 등의 다양한 분야에서 혁신적인 연구결과를 소개하는 학술지입니다 (자세한 사항은 다음의 학술지 홈페이지를 참조 바람: www.pnas.org).