

같은 원자, 다른 순서로 재료의 한계를 넘다

- 포항공대 이대수 교수 연구팀, 원자층 '그라데이션' 설계 원리 규명...사이언스誌 게재
- 차세대 전자소자와 반도체 절연막, 열 센서 개발을 위한 원천기술로 활용 기대

같은 식재료도 조리 순서와 방법에 따라 다른 맛을 내듯, 같은 종류와 양의 원자를 쌓는 순서만 바뀌 재료의 기존 장점에 새로운 기능을 더하는 소재 설계법을 국내 연구진이 개발했다.

과학기술정보통신부(부총리 겸 과기정통부 장관 배경훈, 이하 '과기정통부')는 포항공과대학교(POSTECH) 이대수·이길호·최시영 교수와 숭실대학교 박세영 교수 공동연구팀이 원자층의 조성 배열을 정밀하게 설계해 금속과 초박막 절연재료에 새로운 기능을 구현했다고 밝혔다.

과기정통부의 '기초연구사업(핵심연구 및 선도연구센터)'으로 수행한 이번 연구 성과는 세계 최고 권위의 학술지인 「사이언스(Science)」誌에 10월 2일(현지시간 10.1.(목) 14시, EDT) 게재*됐다.

* 논문명 : Synergistic polar states by selective atomic gradients

소재에 새로운 기능을 더하기 위해 기존에는 새로운 원소를 섞거나 원소의 비율을 바꾸는 방법이 주로 활용됐다. 그러나 이 과정에서 재료가 원래 갖고 있던 기능이 달라지거나 사라질 수 있어, 재료의 장점을 유지하면서 새로운 기능을 더하는 데 어려움이 있었다.

특히 금속은 전기가 잘 흐르는 성질을 유지하면서 원자들이 한쪽 방향으로 치우쳐 배열되는 '극성'을 함께 구현하기가 쉽지 않았다. 초박막

절연재료 역시 얇아질수록 전기가 쉽게 새어 나가, 얇은 두께와 높은 절연 성능을 동시에 확보하는데 한계가 있었다.

연구팀은 재료의 전자적 성질과 관련된 원자는 그대로 두고, 크기가 다른 특정 원자의 비율을 두께 방향으로 원자층마다 조금씩 바꾸는 '선택적 원자 기울기' 설계법을 개발했다.

색이 서서히 달라지는 그라데이션처럼 두께 방향으로 원자의 비율에 차이를 주자, 원자들이 한쪽 방향으로 미세하게 치우치면서 재료 내부에 극성이 형성됐다. 원자층의 배열 순서를 뒤집자 극성의 방향도 반대로 바뀌었으며, 같은 종류와 양의 원자를 균일하게 섞은 재료에서는 이러한 방향성이 나타나지 않았다.

먼저 이 설계법을 금속 박막에 적용한 결과, 전기가 잘 흐르는 기존 성질을 유지하면서 전류를 한 방향으로 흘릴 때와 반대 방향으로 흘릴 때 저항이 다르게 나타났다. 원자층의 배열 순서를 바꾸면 저항 차이의 방향도 반전돼, 제작 단계에서 재료의 전기적 방향성을 조절할 수 있음을 확인했다.

이어 약 5.1나노미터(nm) 두께의 초박막 절연재료에 적용하자 누설전류*가 크게 줄었으며, 전기 에너지를 저장하는 능력은 높은 수준으로 유지됐다.

* 누설전류: 절연체 등에서 전류가 흐르지 않아야 할 곳으로 미세하게 새는 전류

특히 온도 변화를 전기 신호로 바꾸는 성능이 비슷한 두께의 대표적인 비교 박막보다 약 100배 높게 나타났다. 원자층의 배열 순서를 뒤집으면 온도 변화로 발생하는 전기 신호의 방향도 함께 반전됐다.

이번 성과는 전류 방향에 따라 다르게 작동하는 전자소자, 누설전류를 줄인 차세대 반도체용 초박막 절연막, 온도 변화를 감지하는 적외선·열 센서 등의 개발에 활용될 것으로 기대된다.

연구를 총괄한 이대수 교수는 “새로운 원소를 더하지 않고도 원자를 쌓는 순서만 바꿔 **재료의 원래 장점은 살리면서 새로운 기능을 더할 수 있음을 입증했다**”며, “앞으로 이 방법을 자성체와 초전도체 등 더 다양한 물질로 확장하고, 초박막 절연막과 열 센서 등 실제 소자로 구현하는 후속 연구를 진행할 계획”이라고 밝혔다.

과기정통부 김성수 연구개발정책실장은 “이번 성과는 **물질의 근본적인 성질을 탐구하는 기초연구가 소재 설계의 새로운 해법으로 이어질 수 있음을 보여준다**”며, “연구자들이 창의적인 아이디어를 바탕으로 새로운 원리를 탐구하고 도전적인 연구를 이어갈 수 있도록 **기초연구에 대한 지원을 아끼지 않을 것**”이라고 밝혔다.

담당 부서	과학기술정보통신부 기초연구진흥과	책임자	과장	박시정 (044-202-4530)
		담당자	주무관	서동근 (044-202-4537)
연구 기관	포항공과대학교 물리학과	교신저자	교수	이대수 (054-279-2063)
		제1저자	통합과정	김상현 (054-279-2713)
	포항공과대학교 대외협력팀	담당자	대리	전예진 (054-279-2416)



내일을 만드는 과학기술
내일을 배우는 디지털·AI

대한민국
지적브리핑



주요내용 설명

<작성 : 포항공대 이대수 교수>

논문명	Synergistic polar states by selective atomic gradients
저널명	SCIENCE
키워드	Perovskite Oxide(페로브스카이트 산화물), Flexoelectricity(변전성) Polarity(극성), Polar metal(극성 금속), Giant Pyroelectricity(거대 초전성)
저자	이대수 교수(교신저자/포항공과대학교), 이길호 교수(교신저자/포항공과대학교), 최시영 교수(교신저자/포항공과대학교), 박세영 교수(교신저자/숭실대학교), 김상현 통합과정(제1저자/포항공과대학교), 한기정 통합과정(제1저자/포항공과대학교), 황수운 박사(제1저자/포항공과대학교), 노가희 박사(제1저자/포항공과대학교)

1. 연구의 필요성

- 새로운 기능성 소재를 개발할 때는 주로 새로운 원소를 도입하거나 기존 원소의 비율을 바꾸는 방법이 활용돼 왔다. 그러나 새로운 성질을 얻는 과정에서 재료가 원래 갖고 있던 장점까지 함께 사라질 수 있다. 특히 전기가 잘 흐르는 금속에서는 자유롭게 움직이는 전자들이 전기적 방향성을 상쇄하기 때문에, 금속성을 유지하면서 뚜렷한 방향성을 구현하기 어렵다. 또한 초박막 절연재료는 두께가 얇아질수록 누설전류가 증가해 얇은 두께와 높은 성능을 동시에 구현하기 어렵다.
- 연구팀은 재료의 성분 자체를 바꾸기보다 **원자층을 쌓는 순서를 새로운 설계 변수로 활용**했다. 페로브스카이트 산화물에서 재료의 전자적 성질과 관련된 원자는 유지하면서, 크기가 다른 원자의 비율을 두께 방향으로 조금씩 변화시켜 기존 물성을 유지하면서도 새로운 기능을 구현하고자 했다.

2. 연구내용

- 연구팀은 특정 원자의 비율을 원자층마다 조금씩 변화시키는 ‘**선택적 원자 기울기(Selective Atomic Gradient)**’ 설계 전략을 제안했다. 한쪽에는 크기가 큰 원자가 많고 반대쪽으로 갈수록 작은 원자의 비율이 증가하도록 층층이 쌓자, 재료 내부 구조도 위치에 따라 점진적으로 변했다. 이 과정에서 원자들이 한쪽 방향으로 미세하게 이동하면서 재료 내부에 극성(polarity)이 형성됐다.
- 원자층의 배열 순서를 반대로 만들면 극성의 방향도 함께 반전됐다. 반면 같은 종류와 전체 양의 원자를 사용하더라도 층별 차이 없이 균일하게 섞은 재료에서는 뚜렷한 방향성이 나타나지 않았다. 이를 통해 **원소의 종류와 양뿐 아니라 원자층의 배열 순서 자체가 재료의 기능을 결정할 수 있음**을 확인했다.
- 연구팀은 먼저 전기가 잘 흐르는 (Sr,Ca)IrO₃ 박막에 선택적 원자 기울기를 적용했다. 그 결과 기존 금속성을 유지하면서도 전류를 한 방향으로 흘릴 때와 반대 방향으로 흘릴 때 저항이 다르게 나타났다. 또한 원자층의 배열 순서를 반대로 만들면 저항 차이의 방향도 함께 반전돼, **원자층을 쌓는 순서를 통해 금속의 전기적 방향성을 제조 단계에서 제어할 수 있음**을 확인했다.
- 이어 약 5.1 nm 두께의 (Ba,Ca)TiO₃ 초박막 절연재료에 같은 방법을 적용했다. 그 결과 막을 통과해 새는 전류가 크게 감소하면서도 전기 에너지를 저장하는 능력은 높은 수준으로 유지됐다. 또한 작은 온도 변화를 전기 신호로 바꾸는 성능이 비슷한 두께의 대표적인 비교 박막보다 약 100 배 높게 나타났으며, 원자층 배열을 반대로 만들면 온도 변화로 발생하는 전기 신호의 방향도 함께 반전됐다.

3. 연구성과/기대효과

- 이번 연구는 특정한 고성능 신소재 하나를 발견한 것이 아니라, ‘**원자를 어떤 순서로 쌓을 것인가**’를 새로운 소재 설계 변수로 제시했다는 데

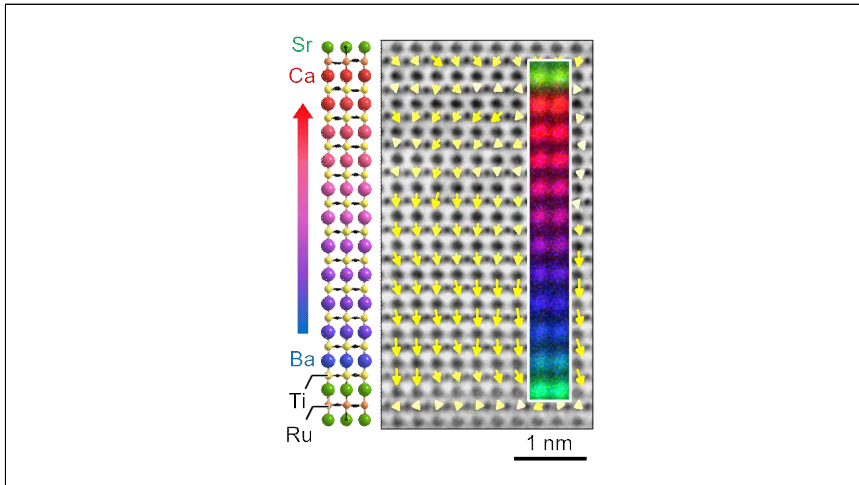
의미가 있다. 특히 전기가 잘 흐르는 금속과 전기가 거의 흐르지 않는 절연재료에서 같은 원리가 작동함을 확인해, 선택적 원자 기울기가 다양한 기능성 소재에 적용될 가능성을 보여줬다.

- 금속에서 구현한 전기적 방향성은 **방향성 전자소자와 스핀트로닉스***, 초박막 절연재료의 낮은 누설전류와 높은 전기 저장 성능은 **차세대 반도체용 초박막 절연막**에 활용될 수 있다. 또한 향상된 온도 감지 성능은 **적외선·열 센서와 에너지 하베스팅**** 기술 등에 활용될 가능성이 있다.

* 스핀트로닉스: 전자의 전하와 스핀을 함께 활용하여 정보를 저장·처리하는 차세대 전자 기술

** 에너지 하베스팅: 주변의 열·빛·진동 등의 에너지를 모아 전기 에너지로 바꾸는 기술

그림 설명



(그림) 선택적 원자 기울기를 통한 극성 구현

(좌) Ba와 Ca의 조성을 두께 방향으로 점진적으로 변화시킨 선택적 원자 기울기의 모식도. (우) 원자분해능 전자현미경으로 확인한 실제 조성 기울기와 이에 따라 형성된 극성의 크기 및 방향(노란색 화살표). 원자층의 조성 배열을 통해 재료 내부의 극성과 방향을 제어할 수 있음을 보여준다.

그림설명 및 그림제공: 포항공과대학교 이대수 교수 연구팀

연구 이야기

<작성 : 포항공대 이대수 교수>

□ 연구를 시작한 계기나 배경은?

극성은 다양한 기능성의 기반이지만 금속성이나 특정 결정구조와 쉽게 공존하지 않는다. 새로운 극성 물질을 찾는 대신, 재료가 원래 가진 성질을 유지하면서 원자의 배열만으로 극성을 새롭게 만들어낼 수 있을까? 라는 질문에서 연구를 시작했다. 이를 해결하기 위해 페로브스카이트 구조에서 전자적 성질을 결정하는 B 자리 원자는 유지하고, 격자 크기에 영향을 주는 A 자리 원자의 조성만 두께 방향으로 변화시키는 '선택적 원자 기울기'라는 아이디어를 고안했다.

□ 이번 성과, 무엇이 다른가?

이번 연구는 '원자를 어떤 순서로 배열할 것인가'를 새로운 설계 변수로 활용했다. 같은 평균 조성이라도 원자층의 배열 순서에 따라 극성과 그 방향을 제어할 수 있으며, 금속에서는 금속성을 유지한 채 전기적 방향성을, 유전체에서는 낮은 누설전류와 우수한 유전·초전 특성을 구현했다. 하나의 설계 전략을 서로 다른 특성의 금속과 유전체에서 검증했다는 점도 차별점이다.

□ 실용화된다면 어떻게 활용될 수 있나?

금속에서 구현한 전기적 방향성은 방향성 전자소자와 스핀트로닉스, 초박막 유전체의 높은 유전 특성과 낮은 누설전류는 차세대 트랜지스터용 초박막 절연막, 향상된 초전 특성은 적외선·열 센서와 에너지 하베스팅 소자 등에 활용될 가능성이 있다.

□ 꼭 이루고 싶은 목표나 후속 연구계획은?

선택적 원자 기울기를 자성체와 초전도체 등 다양한 양자물질로 확장해, 기존 물질과 극성이 결합하면서 나타나는 새로운 양자·위상 물성을 구현하는 것이 후속 연구 방향이다. 나아가 원자층의 조성 배열을 통해 물질의 기능을 원하는 방향으로 설계할 수 있는 범용적인 원자 수준의 재료 설계 전략으로 발전시키는 것을 목표로 하고 있다.

연구자 소개

<이대수 교신저자>

1. 인적사항

- 소 속 : 포항공과대학교 물리학과
- 전 화 : 054-279-2063

2. 학력

- 2012 서울대학교 박사 (응집물리실험)
- 2012 ~ 2017 미국 위스콘신 대학교 매디슨 박사후연구원

3. 경력사항

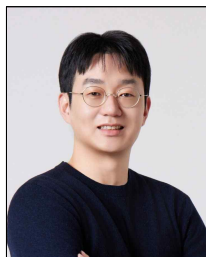
- 2017 ~ 2018 서울대학교 강상관계 물질 연구단 연구교수
- 2018 ~ 2022 포항공과대학교 물리학과 조교수
- 2021 한국물리학회 신진물리학자상 수상
- 2022 ~ 2023 포스코사이언스펠로십 신진교수 펠로
- 2022 ~ 현재 포항공과대학교 물리학과 부교수

4. 전문분야 정보

- 응집물리실험 (강상관 산화물 박막 및 이종구조 연구)

5. 연구지원 정보

- 2021 ~ 현재 과학기술정보통신부·한국연구재단 선도연구센터사업(SRC)
- 2023 ~ 2026 과학기술정보통신부·한국연구재단 중견연구자지원사업
- 2026 ~ 현재 과학기술정보통신부·한국연구재단 우수연구사업(핵심연구 유형 C)



<김상현, 제1저자>

1. 인적사항

- 소 속 : 포항공과대학교 물리학과
- 전 화 : 054-279-2713

2. 학력

- 2019 ~ 현재 포항공과대학교 통합과정 (응집물리실험)

3. 경력사항

- 2017 ~ 2018 독일 막스플랑크 고체화학물리연구소(MPI-CPfS) 연구인턴

4. 전문분야 정보

- 응집물리실험 (강상관 산화물 박막 및 이종구조 연구)