

GIST, 고분자 나노선 속 용스트롬 단위 분자 배열의 비밀 풀었다... 전자소재 성능 조절의 새 길 열어

- 극저온 전자현미경으로 개별 나노선 내부의 분자 배열과 결정 질서 정밀 분석
- 구조적 불균일성을 설계 변수로 활용해 전하 이동도와 신축성 조절 성공
- 국제학술지 <<Advanced Materials>> 게재



▲ (왼쪽부터) GIST 신소재공학과 이은지 교수(지도교수), 윤준연 학생(박사과정)

광주과학기술원(GIST·지스트, 총장 임기철)은 신소재공학과 이은지 교수 연구팀이 초고해상도 극저온 투과전자현미경(cryo-TEM)으로 개별 고분자 나노선의 내부 분자 배열을 정밀 분석하고, 이를 바탕으로 전기적 성능과 신축성을 조절할 수 있는 소재 설계 기준을 제시했다고 밝혔다.

연구팀은 나노선 내부에서 분자들이 어떤 방향으로 배열되고, 규칙적인 배열이 얼마나 긴 범위까지 이어지는지를 지도처럼 나타내는 맵핑(mapping) 기법을 활용했다. 이를 통해 개별 나노선마다 다른 내부 구조를 정량적으로 밝혀내고, 이러한 구조적 차이를 전기적 성능과 신축성의 균형을 조절하는 데 활용할 수 있음을 확인했다.

고분자 나노선은 초미세 선 형태의 고분자 소재다. 특히 전기가 통하는 고분자는 유연한 전자소자나 늘어나는 전자기기 등에 활용될 수 있어 주목받고 있다.

하지만 같은 소재라도 나노선 내부에서 분자들이 얼마나 규칙적으로 배열되는지에 따라 전기적 성능과 변형에 견디는 특성이 달라질 수 있다. 개별 나노선의 내부 구조를 정밀하게 파악하기 어려워 이러한 차이를 소재 설계에 활용하는 데 한계가 있었다.

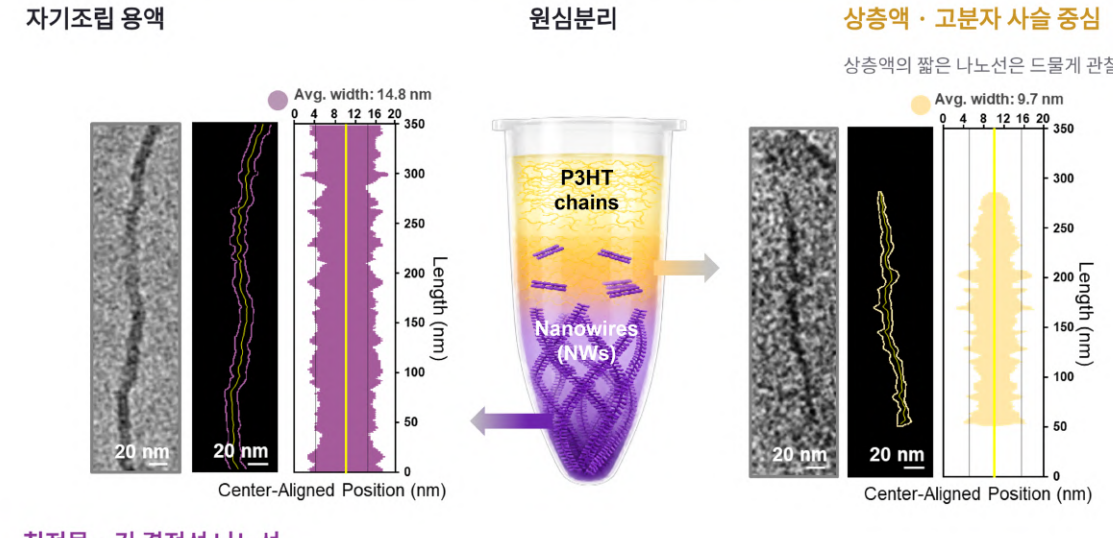
연구팀은 전기가 통하는 고분자인 'P3HT'를 대상으로 나노선 내부의 분자 배열을 분석했다. 이 고분자는 용액 속 분자들이 스스로 모여 구조를 이루는 '자기조립' 과정을 거치는데, 자기조립 후 용액에는 분자들이 규칙적으로 배열된 '결정성 나노선'과 자기조립에 참여하지 않은 '고분자 사슬'이 함께 존재한다.

결정성 나노선은 전하가 이동하는 통로 역할을 한다. 반면 상대적으로 무질서한 고분자 사슬은 소재가 변형을 받아들이는 특성과 관련이 있다. 두 성분의 비율과 내부 구조를 조절하면 전기적 성능과 신축성 사이의 균형을 바꿀 수 있다. 이를 위해서는 나노선 내부의 구조적 차이를 정확하게 파악해야 한다.

연구팀은 입자의 크기와 밀도 등에 따라 가라앉는 속도가 달라지는 스토크스 법칙(Stokes' law)을 활용해 원심분리로 두 성분을 분리했다. 길고 결정성이 높은 나노선은 주로 침전물에 모였고, 상층액에는 고분자 사슬이 주로 남았다. 다만 상층액에서도 짧은 나노선이 일부 관찰됐다.

분자 배열 맵핑을 위한 나노선과 사슬의 분리

원심분리로 결정성 나노선과 고분자 사슬을 효과적으로 분리한 뒤 각 성분을 분석



침전물 · 긴 결정성 나노선

▲ 스토크스 법칙(Stokes' law)을 활용한 결정성 나노선과 고분자 사슬의 효과적인 분리. P3HT 자기조립 용액에는 결정성 나노선과 조립되지 않은 고분자 사슬이 함께 존재한다. 원심분리를 통해 침전물에는 길고 결정성이 높은 나노선을 농축하고, 상층액에는 고분자 사슬을 주로 남겼다. 상층액에서 짧은 나노선은 드물게 관찰된다. 모식도는 각 성분의 특성을 설명하며 실측 성분비와 완전한 순도를 뜻하지 않는다.

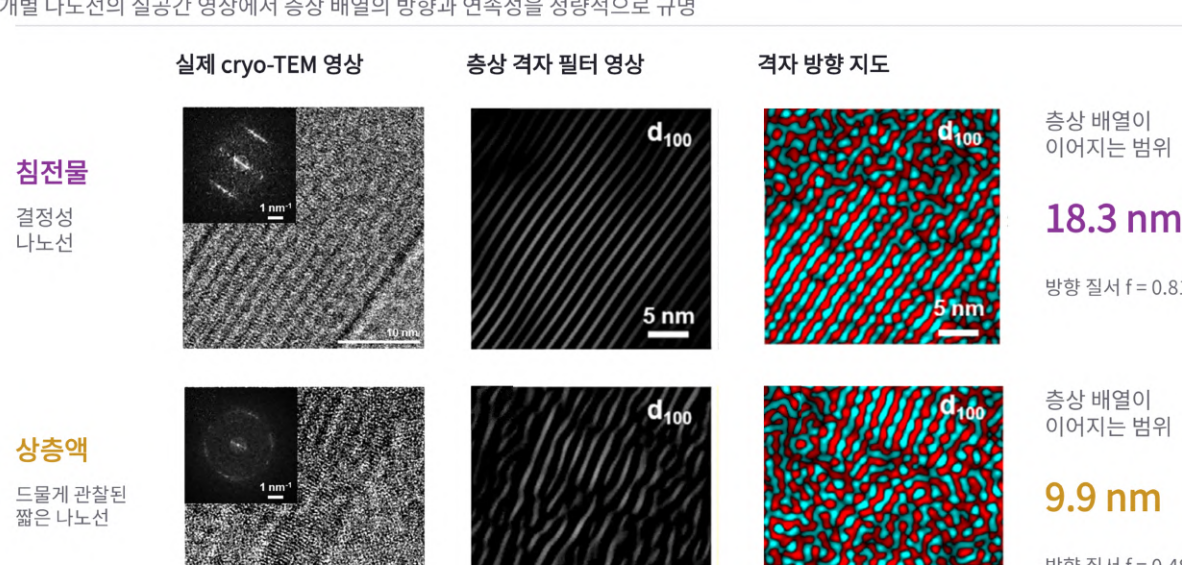
이어 시료를 매우 빠르게 얼려 원래 구조를 보존한 뒤 초고해상도 극저온 투과전자현미경으로 관찰했다. 고해상도 영상의 공간 주파수 정보를 분석해 나노선 내부의 분자 배열을 구분하고, 각 배열이 얼마나 규칙적으로 이어지는지 정량적으로 측정했다.

분석 결과, 침전물에 포함된 나노선과 상층액에서 발견된 짧은 나노선은 고분자를 이루는 분자들이 서로 가까이 배열되는 방식(π - π 배열)에서는 비슷한 특성을 보였다. 반면, 분자들이 층을 이루며 규칙적으로 배열되는 구조(층상 배열)에서는 뚜렷한 차이가 나타났다.

연구팀이 침전물과 상층액에서 각각 나노선 50개씩을 분석한 결과, 층상 배열의 규칙성이 유지되는 길이는 침전물에서 18.3 nm(나노미터), 상층액에서 9.9 nm로 나타났다. 침전물에 포함된 나노선에서 분자들이 층을 이루는 규칙적인 구조가 약 두 배 더 긴 범위까지 유지된 것이다.

cryo-TEM으로 고분자 나노선의 분자 배열 맵핑

개별 나노선의 실공간 영상에서 층상 배열의 방향과 연속성을 정량적으로 규명



▲ 초고해상도 극저온 투과전자현미경(cryo-TEM) 분석 기반 개별 나노선의 분자 배열 맵핑. 실제 cryo-TEM 영상, 층상 격자 필터 영상과 격자 방향 지도를 비교했다. 격자 방향 지도는 격자무늬의 방향을 색으로 나타낸 영상이며 화학적 단량체 서열이나 분자 종류를 나타내지 않는다. 침전물의 나노선에서는 층상 배열의 방향과 연속성이 더 잘 유지되고, 상층액에서 드물게 관찰된 짧은 나노선에서는 배열의 공간적 연속성이 낮다. 층상 방향의 평균 격자 결맞음 길이는 각각 18.3 nm와 9.9 nm였다. π - π 방향에서는 각각 16.1 nm와 16.4 nm로 유사했다. 각 분획에서 나노선 50개를 분석한 결과다.

반면, 분자들이 서로 가까운 π - π 배열의 규칙성이 유지되는 길이는 각각 16.1 nm와 16.4 nm로 비슷했다.

이 결과는 나노선 내부의 분자 배열이 모든 방향에서 동일한 규칙성을 보이는 것은 아니며, 배열의 종류에 따라 구조적 특성이 달라질 수 있음을 보여준다. 연구팀은 개별 나노선의 내부 구조를 정량적으로 분석해 이러한 차이를 밝혀냈다.

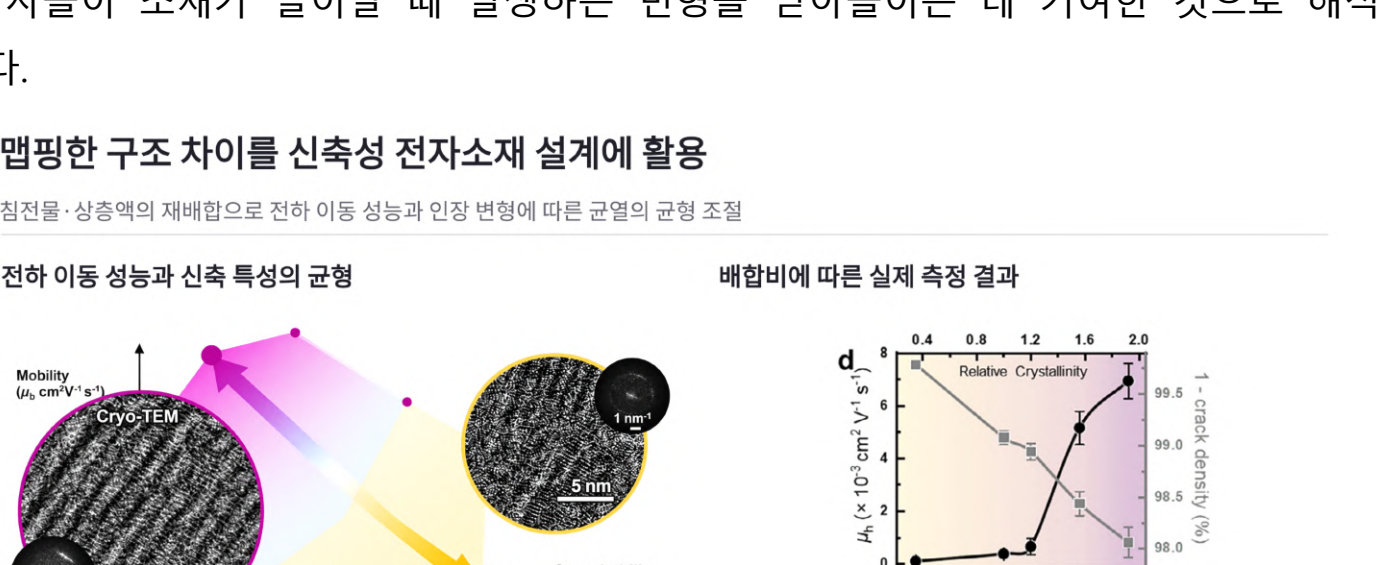
연구팀은 분리한 성분으로 전자소자(유기 전계효과 트랜지스터)를 만들어 전기적 성능과 신축성을 비교했다.

고분자 소재를 이용해 전류를 제어하는 전자소자를 제작한 결과, 침전물로 만든 소자의 정공 이동도가 상층액으로 만든 소자보다 약 67배 높았다. 정공은 반도체 안에서 양전하를 띤 입자처럼 전류를 전달하는 역할을 하며, 정공 이동도는 정공이 반도체 내부에서 얼마나 잘 이동하는지를 나타낸다.

연구팀은 소재를 일정하게 늘렸을 때 박막에 발생하는 균열도 비교했다. 신축성 있는 기판 위에 소재를 얇게 입힌 뒤 기판을 20% 늘렸을 때, 침전물만으로 만든 막은 전체 면적의 1.94%에 균열이 발생했다. 반면, 침전물과 상층액을 질량비 2 대 8로 섞어 만든 막은 균열 면적 비율이 0.92%로 낮았다. 상층액에 주로 포함된 고분자 사슬이 소재가 늘어날 때 발생하는 변형을 받아들이는 데 기여한 것으로 해석된다.

맵핑한 구조 차이를 신축성 전자소재 설계에 활용

침전물·상층액의 재배합으로 전하 이동 성능과 인장 변형에 따른 균열의 균형 조절



배합비는 침전물 : 상층액 질량비 | 균열은 영상 내 면적 비율

▲ 배합비 조절을 통한 전기적 성능과 신축 특성의 균형 제어. 결정성 나노선이 많은 침전물의 비율을 높이면 전하이동 성능이 향상되고, 고분자 사슬이 많은 상층액

의 비율을 높이면 인장 변형에 따른 균열이 줄어든다. 20% 인장 상태에서 침전물 대 상층액의 질량비가 2 대 8, 6 대 4, 10 대 0인 박막의 균열 면적 비율은 각각 0.92%, 1.06%, 1.94%였다. 광학현미경 사진은 논문에 포함된 실제 측정 영상이며, 위쪽 네트워크 그림은 역할을 설명하는 개념도다.

이는 전기적 성능이 뛰어난 성분과 늘어나는 변형을 잘 수용하는 성분을 적절히 배합하면, 전기적 성능과 신축성 사이의 균형을 조절할 수 있음을 보여준다.

연구팀은 이러한 분리·설계 방법을 고분자와 셀레늄화카드뮴(CdSe) 양자점을 결합한 유·무기 복합 나노선에도 적용했다. 양자점은 나노미터 크기의 반도체 입자로, 빛과 전기적 특성을 조절하는 데 활용된다. 연구팀은 양자점 함량이나 용매 조건이 달라져도 같은 원심분리 기반 분획 원리가 적용됨을 확인했다.

이번 연구는 소재를 구성하는 분자들이 항상 균일하게 배열되는 것은 아니라는 점에 주목해, 나노선마다 다른 내부 구조를 전기적 성능과 신축성을 조절하는 데 활용할 수 있음을 보여준다. 특히 개별 나노선의 분자 배열을 직접 관찰하고 수치로 비교함으로써, 소재 내부 구조의 차이를 바탕으로 원하는 성능을 갖춘 전자소재를 설계할 수 있는 가능성을 제시했다.

이은지 교수(교신저자)는 “이번 연구는 개별 고분자 나노선 내부에서 분자들이 어떻게 배열되어 있는지 직접 관찰하고, 나노선마다 다른 구조적 특성을 수치로 밝혀냈다는 데 의미가 있다”며, “이를 통해 자기조립 과정에서 생기는 소재 내부의 구조적 차이를 단순한 불균일성으로 보는 데 그치지 않고, 전기적 성능과 신축성을 조절하는 데 활용할 수 있는 가능성을 제시했다”고 말했다.

윤준연 박사과정생(제1저자)은 “개별 나노선을 분석한 결과, 분자들이 서로 가까이 배열되는 방식은 비슷해도 층을 이루는 규칙적인 배열이 유지되는 범위는 뚜렷하게 다르다는 점을 확인했다”며, “이처럼 겉으로 드러나지 않는 나노선 내부의 차이를 직접 관찰하고 수치로 비교함으로써, 소재의 전기적 성능과 신축성을 조절할 수 있는 근거를 마련했다”고 말했다.

GIST 신소재공학과 이은지 교수가 지도하고 윤준연 박사과정생이 제1저자, 황준호 박사가 공저자로 참여한 이번 연구는 ▲한국과학기술연구원(KIST) ‘그랜드 챌린지(Grand Challenge)’ ▲보건복지부 ‘한국형 ARPA-H 프로젝트’ ▲과학기술정보통신부 ‘선도연구센터’, ‘이노코어(InnoCORE)’, ‘전략연구사업’의 지원을 받았으며, GIST 중앙기기연구소(GAIA)와 포항가속기연구소(PAL)의 연구 인프라를 활용했다.

연구 결과는 재료과학 분야 국제학술지 《어드밴스드 머티리얼즈(Advanced Materials)》에 2026년 10월 5일 온라인으로 게재됐다.

GIST는 기술사업화 및 산업적 활용에 관심 있는 기업·기관의 문의를 창업혁신진흥원 기술사업화센터(hgmoon@gist.ac.kr)를 통해 받고 있다.

논문 정보

○ 논문명, 저자 정보

- 저널명 : Advanced Materials (IF: 29.1, 2025년 기준)
- 논문명 : Differential Sedimentation and Cryo-TEM Mapping Resolve Structural Heterogeneity in Conjugated Polymer Nanowires for Programmable Stretchable Electronics
- 저자 정보 : 윤준연(제1저자, GIST 신소재공학과),
황준호(공저자, GIST 신소재공학과·AI-ACE InnoCORE 연구단),
이은지(교신저자, GIST 신소재공학과·화학과·AI-ACE InnoCORE 연구단)