전이금속 산화물 박막의 응력 완화 현상으로 인한 “극성 도체” 발견

- 산화물 박막의 압축응력이 완화되는 과정에서 비대칭 산소팔면체 회전으로 인해 극성구조 발현. 다기능 차세대 산화물 박막 연구 및 응용 기대

- 지스트 이종석 교수팀, 나노과학 분야의 세계적 학술지 Small에 논문 개제

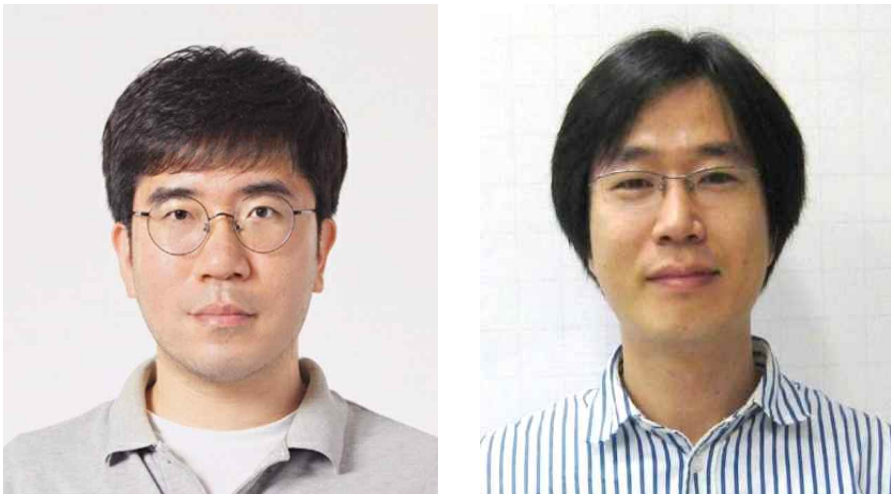


사진 1. 왼쪽부터 노창재 박사 (제 1저자), 이종석 교수 (교신저자)

□ 지스트 (광주과학기술원, 총장 김기선) 물리광과학과 이종석 교수팀이 전도체인 **스트론튬 루테늄 산화물($SrRuO_3$) 박막에서 압축응력*의 완화에 따른 산소팔면체**의 비대칭 회전으로 인해 안정화되는 극성 구조를 발견**하였다.

*압축응력 (Compressive strain): 면내(in-plane) 방향으로 압축하는 방향으로 작용하는 응력

**산소팔면체 (Oxygen octahedron): 의사 입방체(Pseudo-cubic) 구조의 각 면에 위치한 산소원자들이 만드는 팔면체구조

◦ 이번 연구 성과를 통해 **구조적 응력완화현상*이 전이금속 산화물 박막의 물성 탐구 및 연구를 위한 새로운 방법으로서 제시될 수 있을 것으로 기대**된다.

*구조적 응력완화현상 (Structural relaxation): 응력을 받아 변화된 구조가 되돌아가는 현상

□ **전이금속 산화물 박막**은 물질의 격자, 전자, 전하 특성 간에 강한 상호작용을 갖는 물질로서 **특성간의 강한 얽힘으로 인한 새로운 물성의 발현현상과 그 관계를 연구하는데 중요한 물질**이며 전기, 자기적 특성으로 인해 기능성 소자 제작을 비롯한 응용 연구에도 널리 활용되고 있다.

◦ 산화물 박막의 구조를 제어하기 위해 널리 활용되는 **응력공학은 기판과 물질간의 격자 크기 차이를 이용하여 기판 위에 성장된 박막의 면내 구조를 압축시키거나 늘릴 수 있게 해주는데, 이때 박막에 작용하는 응력은 물질의 두께가 두꺼워짐에 따라 약화되며, 박막은 본래의 덩어리 구조*로 되돌아가려는 성질을 보인다.**

*덩어리 구조 (Bulk structure): 변형되지 않은 물질의 본래 구조

□ **스트론튬 루테늄 산화물($SrRuO_3$) 박막은 전기적 전도특성과 강자성* 특성을 갖는 대표적인 전이금속 산화물**이며, 덩어리 구조로서 사방정계 구조를 갖는다. 박막형태로서 스트론튬 티타늄 산화물 ($SrTiO_3$) 기판에 성장될 때, 압축응력을 받은 스트론튬 루테늄 산화물 박막은 산소팔면체 회전 패턴의 변화에 따라 정방정계 구조가 안정화된다.

*강자성 (Ferromagnetism): 전자의 스핀이 한 가지 방향으로 일정하게 배열되어있는 자기적 정렬 상태

□ 연구팀은 비선형 광학현상인 제 2 조화파*와 주사투과전자현미경**을 이용하여 **압축응력을 받은 스트론튬 루테늄 산화물 박막에서 응력으로 인해 변형된 구조와 응력이 완화되어 덩어리화된 구조가 공간적으로 분리된 채 공존**하며, **응력이 완화되는 과정에서 중심대칭 특성이 깨진 극성 삼사정계 구조가 안정화됨**을 성공적으로 관측하였다. 이와 더불어 제일원리계산***을 이용하여 **산소팔면체 회전패턴의 공간적 비대칭 분포로 인하여 극성상이 안정화되고, 전기적, 자기적 특성이 유지됨을 확인**하였다.

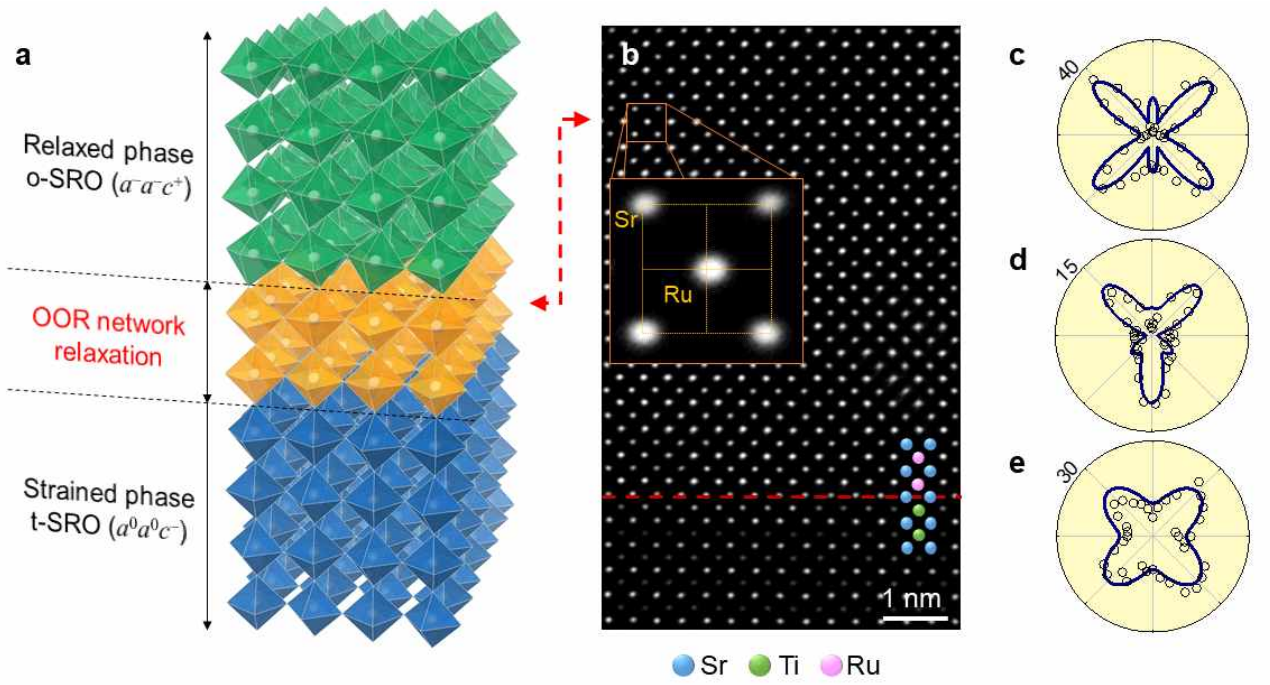
*제 2 조화파(Second harmonic generation): 물질에 빛을 조사(irradiation) 했을 때, 물질로부터 반파장 대역을 갖는 빛이 발생하는 현상

**주사투과전자현미경 (Scanning turnneling electron transmission microscopy): 높은 전압으로 가속시킨 전자빔을 시편에 투과시켜 고배율로 확대된 상을 얻는 현미경

***제일원리계산 (First-principles calculation): 이론적으로 고려하는 모델과 변수를 최소화하여 물질의 특성을 분석하는 방법

□ 이종석 교수는 본 성과에 대해 “학술적, 응용적 활용가치가 높은 전이금속 산화물의 구조를 제어하는 방법으로 응력완화현상이 이용될 수 있음을 새롭게 제시했다는데 큰 의미가 있다.” 면서, “극성금속을 비롯한 많은 다기능성 산화물 박막의 발견을 통해 앞으로의 응집물질 연구 및 신물질 개발에 기여할 수 있기를 기대한다.”고 밝혔다.

□ **지스트 이종석 교수(교신저자)가 주도하고 노창재 연구원(제1저자)이 참여**한 이번 연구는 **한국연구재단이 지원하는 기초연구사업(중견연구자지원사업) 및 선도연구센터지원사업(SRC)의 지원을 받아 수행**되었으며, **2020년 9월 11일 나노과학 분야의 저명 학술지인 Small (2019 JCR impact facotr: 11.459) 온라인판에 개제**되었다. <끝>



(그림 a) 응력완화현상으로 인한 산소팔면체 구조의 비대칭 회전

(그림 b) 투과전자현미경을 통해 관측된 기판-계면 부근의 스트론튬 루테늄 산화물 박막 이미지

(그림 c-e) 제 2 조화파를 이용하여 관측된 스트론튬 루테늄 산화물 박막 내 구현되는 c) 사방정계 d)삼사정계 e)정방정계 구조의 대칭특성

논문의 주요 내용

1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Small

  (2019 JCR impact factor: 11.459)

- 논문명 : Polar Metal Phase Induced by Oxygen Octahedral Network Relaxation in Oxide Thin Films

- DOI: https://doi.org/10.1002/smll.202003055

- 저자 정보 : 노창재 연구원(지스트 박사 졸업, 제1저자), 정명철 (카이스트), 김정래 (서울대), 고경준 (포스텍), 김진권 (서울대), 오호준 (지스트), 조용륜 (지스트), 신영재 (서울대), 최정기 (지스트), 김봉중 (지스트), 노도영 (지스트), 최시영 (포스텍), 노태원 (서울대), 한명준 (카이스트), 이종석 교수 (지스트, 교신저자)