

나노 구조 '관찰' 넘어 소재 성능 '예측'까지... GIST, AI 기반 전자현미경 분석 플랫폼 제시

- 신소재공학과 이은지 교수팀, 전자빔에 취약한 연성 물질의 복잡한 자기조립 구조 분석 한계 극복... AI 기술 접목해 구조 인식부터 시간에 따른 변화 분석까지 자동화 구현
- 전자현미경을 단순 관찰 장비에서 예측·설계 플랫폼으로 확장한 이미지 기반 통합 분석 전략으로 차세대 기능성 소재 개발 가속화 기대... 국제학술지 《NPG Asia Materials》 게재



▲ (왼쪽부터) GIST 신소재공학과 윤준연 박사과정생(제1저자), 이은지 교수, 황준호 박사

광주과학기술원(GIST, 총장 임기철)은 신소재공학과 이은지 교수 연구팀이 인공지능(AI)을 투과전자현미경(TEM)* 분석에 접목해 유기고분자 및 바이오 소재와 같은 '연성 물질(soft matter)'의 복잡한 자기조립 구조*를 '관찰'하는 수준에서 '자동 분석·예측'하는 단계로 확장하는 새로운 분석 패러다임을 제시했다고 밝혔다.

이번 연구는 전자빔에 민감해 분석이 어려웠던 연성 물질의 복잡한 자기조립 구조를 대상으로, 여러 전자현미경 기법과 AI를 통합해 구조 인식·3차원 재구성·시간에 따른 변화 분석을 자동화하고, 나아가 물성 예측까지 연계할 수 있는 분석 체계를 제안했다는 점에서 주목된다.

* 투과전자현미경(TEM, Transmission Electron Microscope): 전자빔을 시료에 통과시켜 형성된 신호를 영상으로 만들어 나노·원자 수준의 미세 구조를 관찰하는 장비이다. 매우 얇게 제작된 시료를 통과한 전자의 차이를 이용해 내부 구조와 결정성, 결함 등을 분석할 수 있으며, 구조와 조성을 함께 파악할 수 있어 재료과학과 나노기술 분야에서 핵심적으로 활용된다.

* 자기조립 구조: 외부에서 복잡한 가공이나 조작을 하지 않아도, 분자·이온·나노입자 등이 자연스럽게 스스로 모여 규칙적인 배열이나 구조를 형성하는 현상 또는 그 결과물을 의미한다. 개연성 물질의 물성과 기능을 좌우해 나노소재, 바이오의약, 에너지·전자재료 설계에서 중요한 개념으로 활용된다.

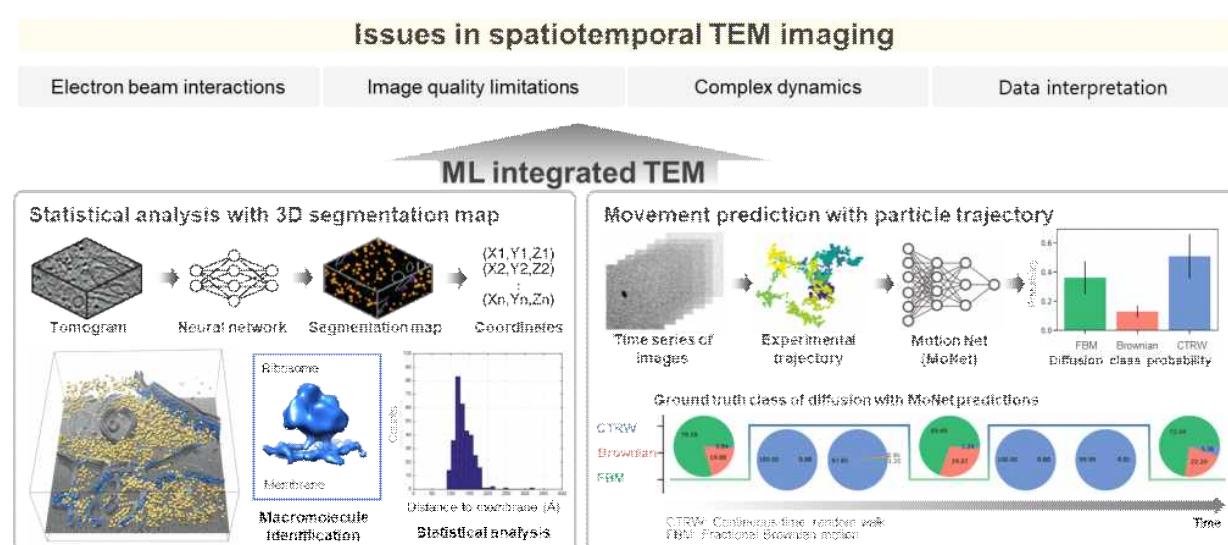
연성 물질은 단백질과 세포막 같은 바이오 소재부터 고분자, 액정 등 합성 소재까지 폭넓게 포함되며, 분자들이 스스로 모여 미세한 나노 구조를 형성하는 ‘자기조립’ 특성으로 인해 다양한 첨단 산업 분야에서 핵심 소재로 각광받고 있다.

이러한 자기조립 구조는 차세대 백신에 사용되는 유전물질 전달 기술(mRNA 백신 전달체), 약물전달 시스템, 차세대 에너지 저장소재 등에서 소재의 성능을 좌우하는 핵심 요소이지만, 구조가 매우 작고 복잡해 이를 정확히 관찰하고 이해하는 데 한계가 있었다.

특히 연성 물질은 주로 탄소·수소·산소 등 가벼운 원소로 구성돼 전자현미경 영상에서 구조의 윤곽이 뚜렷하게 드러나지 않고, 전자빔에 의해 구조가 쉽게 변형되거나 손상되는 문제가 있다. 이로 인해 기존 전자현미경 분석만으로는 연성 물질 고유의 나노 구조와 자기조립 과정을 정밀하게 파악하기 어려웠다.

연구팀은 이러한 한계를 극복하기 위해 초저온 전자현미경(cryo-TEM), 전자단층촬영(ET), 실시간 액상 전자현미경(LP-TEM) 등 서로 다른 전자현미경 기법에 딥러닝 기반 AI 기술을 결합했다.

이를 통해 ▲복잡한 나노 구조를 자동으로 구분하는 구조 인식 ▲여러 장의 2차원 전자현미경 영상을 바탕으로 나노 구조를 입체적으로 구현하는 3차원 재구성 ▲자기조립이 진행되는 과정을 시간의 흐름에 따라 분석하는 동역학 해석을 자동화하고, 더 나아가 구조 정보를 기반으로 소재의 성능을 미리 가늠할 수 있는 물성 예측까지 연계하는 통합 분석 전략을 구현했다.



▲ AI 통합 전자현미경 기술을 통한 연성 물질 분석의 시공간적 한계 극복 및 정밀 해석 : (상단) 전자빔에 민감한 연성 물질을 시공간적으로 이미징할 때 발생하는 주요 문제점들. (왼쪽 하단) 딥러닝 활용 3차원 인식 기술을 활용해 복잡한 구조 내에서 리보솜과 같은 거대 분자를 자동 식별 및 통계 분석을 보여주는 모식도. (오른쪽 하단) 딥러닝 모델을 통한 액상투과전자현미경 영상 내 나노입자의 이동 궤적을 추적 및 예측하는 기술을 보여주는 모식도.

이 과정에서 초저온 전자현미경은 연성 물질의 본래 나노 구조를 거의 손상 없이 포착하는 역할을 했으며, 전자단층촬영은 이러한 구조를 3차원 형태로 재구성하는데 활용됐다. 실시간 액상 전자현미경은 용액 내에서 자기조립이 진행되는 모습을 실시간으로 관찰함으로써, 구조가 형성되고 변화하는 과정을 시간 축에서 분석할 수 있도록 했다.

연구팀은 여기에 AI를 접목해 방대한 고차원 전자현미경 데이터를 자동으로 처리·해석함으로써, 단순한 이미지 관찰을 넘어 구조와 물성 간의 상관관계를 규명하고 향후 구조 변화를 예측할 수 있는 분석 체계를 구축했다.

이는 전자현미경을 ‘보는 도구’에서 ‘이해하고 예측하는 도구’로 확장한 것으로, 연성 물질 연구 전반에 새로운 연구 방향을 제시하는 성과로 평가된다.

이번 연구는 전자현미경 분석에 AI를 결합함으로써, 연성 물질의 자기조립 메커니즘을 보다 체계적으로 이해하고, 이미지 데이터를 바탕으로 소재의 물성을 예측하는 ‘이미지 기반 소재 설계’로 나아갈 수 있는 가능성을 제시했다는 점에서 학술적 의의가 크다.

연구팀은 향후 AI 기반 자동 분석 시스템을 고도화하고, 극한 환경에서도 안정적으로 작동하는 기능성 연성 소재 연구에 이를 적용함으로써 바이오의료 및 에너지 분야로의 확장을 추진할 계획이다.

이은지 교수는 “이번 연구는 전자빔에 민감한 연성 소재의 자기조립 과정을 실시간으로 관찰하고, 이를 AI로 정밀 분석해 물성 예측까지 연결할 수 있는 분석 체계를 마련했다는 점에서 의미가 크다”며, “이미지 관찰에 머물던 기존 분석을 넘어, 데이터 기반 소재 설계로 확장될 수 있는 새로운 연구 방향을 제시했다”고 말했다.

윤준연 박사과정생(제1저자)은 “방대한 고차원 투과전자현미경(TEM) 데이터를 AI로 분석해 나노 구조와 물성 사이의 상관관계를 규명하는 데 초점을 맞췄다”며, “AI가 전자현미경 이미지로부터 물질의 특성을 예측하고 최적의 소재 설계를 제안하는 ‘소재 정보학’의 핵심 도구가 될 수 있음을 보여준 연구”라고 설명했다.

GIST 신소재공학과 이은지 교수(교신저자)의 지도 아래 윤준연 박사과정생(제1저자)이 수행하고 지스트-이노코어(GIST-InnoCORE) 연구단 황준호 박사가 공동저자로 참여한 이번 연구는 과학기술정보통신부·한국연구재단 중견연구자지원사업, 나노 및 소재기술개발사업, GIST-InnoCORE 사업의 지원을 받았다. 연구 결과는 국제학술지 《NPG Asia Materials》에 2025년 12월 23일 온라인으로 게재됐다.

한편 GIST는 이번 연구 성과가 학술적 의의와 함께 산업적 응용 가능성까지 고려한 것으로, 기술이전 관련 협의는 기술사업화센터(hgmoon@gist.ac.kr)를 통해 진행 할 수 있다고 밝혔다.

논문의 주요 내용

1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : NPG Asia Materials (IF: 8.3), 2024년 기준
- 논문명 : Dive into soft matter imaging: artificial intelligence-integrated electron microscopy
- 저자 정보 : 윤준연 박사과정생(제1저자, GIST 신소재공학과), 황준호 박사(공동저자, GIST 이노코어 연구단), 이은지 교수(교신저자, GIST 신소재공학과)