

한림원탁토론회 :

AI 프런티어 시리즈

제 4 회

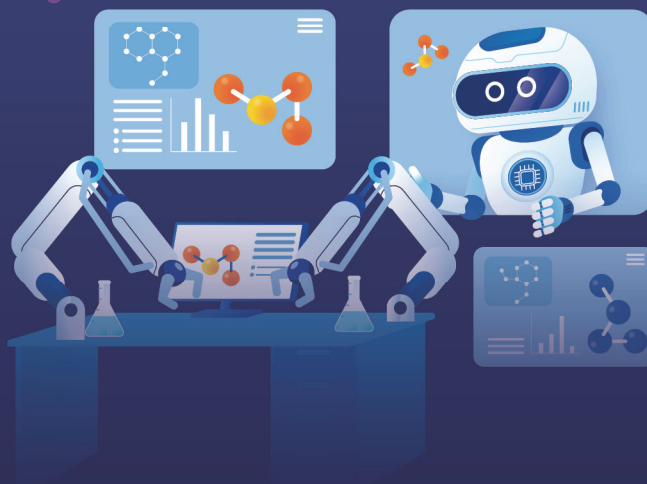
「AI x 신소재」 : 미래 산업소재의 혁신 설계

일시 | 2025년 10월 21일(화), 16:00

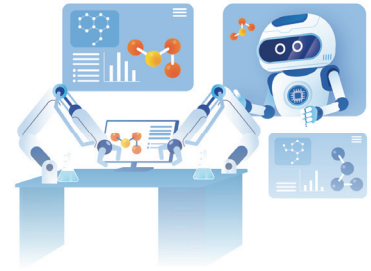
장소 | 한림원회관 B1층 강당

주최 | 한국과학기술한림원

한국차세대과학기술한림원



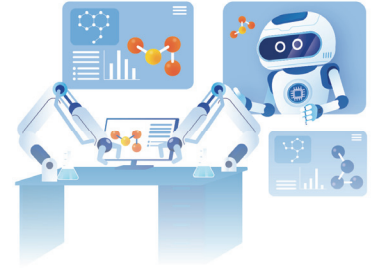
제4회 「AI x 신소재」 : 미래 산업소재의 혁신 설계



Program

시간	프로그램	
16:00~16:05 (5분)	핵심 의제 이영국 연세대학교 신소재공학과 교수	
	주제발표	
16:05~16:50 (각 15분)	주 제	[발제1] AI와 로봇을 활용한 소재개발 프로세스 혁신 최윤석 삼성전자 SAIT 마스터(상무)
		[발제2] 신소재를 위한 파운데이션 모델 개발 전망 한승우 서울대학교 재료공학부 교수
		[발제3] AI 활용을 위한 생태계 기반의 빅데이터 구축 신정호 한국화학연구원 화학플랫폼연구본부 디지털화학연구센터 센터장
16:50~17:20 (각 7분)	지정토론 및 자유토론	
	좌 장	박철민 연세대학교 신소재공학과 교수
	토론자	AI 무인실험실 서동화 KAIST 신소재공학과 교수 소재 AI 플랫폼 조기섭 국민대학교 신소재공학부 교수 Domain 지식과 AI 김석구 LG에너지솔루션 상무
17:20~18:00	토론요약 및 질의응답	
18:00	폐 회	

제4회 「AI x 신소재」 : 미래 산업소재의 혁신 설계



참여자 주요 약력

핵심 의제



이영국 연세대학교 신소재공학과 교수
한국과학기술한림원 국제학술부장
POSTECH 친환경소재대학원 겸임교수
한국열처리공학회 회장

주제발표



주제발표 1_ AI와 로봇을 활용한 소재개발 프로세스 혁신

최윤석 삼성전자 SAIT 마스터
SAIT Material 연구센터 AMD-TU lead
前 SAIT AI & software 연구센터 AMD랩 Project leader
前 SAIT 기반기술랩 CAE그룹 Project leader



주제발표 2_ 신소재를 위한 파운데이션 모델 개발 전망

한승우 서울대학교 공과대학 교수
고등과학원 AI 센터 겸직 교수
동경대학교 공과대학 펠로우
KISTI 펠로우



주제발표 3_ AI 활용을 위한 생태계 기반의 빅데이터 구축

신정호 한국화학연구원 화학플랫폼연구본부 디지털화학연구센터 센터장
대한금속재료학회 전산재료분과 총무간사
소재 연구데이터 생태계 플랫폼 기반 구축 과제 총괄책임자
前 독일 막스플랑크 이사회 프리츠-하버 연구소 박사후 연구원

지정토론



좌 장_박철민 연세대학교 신소재공학과 교수
한국과학기술한림원 차세대부장
한국공학한림원 일반회원
前 미국재료학회 (Materials Research Society: MRS) 이사



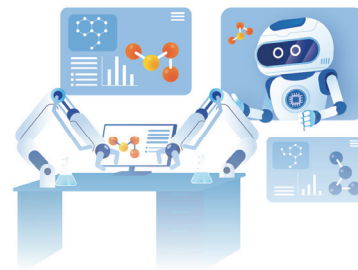
토론자 1_서동화 KAIST 신소재공학과 부교수
포스코그룹 초격차기술 특임교수
前 UNIST 에너지화학공학과 조교수
前 Samsung Research America 선임 연구원



토론자 2_조기섭 국민대학교 신소재공학부 교수
(사)한국열처리공학회 총무이사
(사)대한금속재료학회 인공지능재료과학 분과 위원
(사)한국분말재료학회 계산과학/인공지능/첨단분석 분과 간사 위원



토론자 3_김석구 LG 에너지솔루션 상무
LG 에너지솔루션 자동차전자사업부 선행전자개발부문장
한국전기화학회 이차전지분과 이사



Contents

주제발표 1	AI와 로봇을 활용한 소재개발 프로세스 혁신	1
	최윤석 삼성전자 SAIT 마스터(상무)	

주제발표 2	신소재를 위한 파운데이션 모델 개발 전망	11
	한승우 서울대학교 재료공학부 교수	

주제발표 3	AI 활용을 위한 생태계 기반의 빅데이터 구축	21
	신정호 한국화학연구원 화학플랫폼연구본부 디지털화학연구센터 센터장	

토론

AI 무인실험실	서동화 KAIST 신소재공학과 교수	37
소재 AI 플랫폼	조기섭 국민대학교 신소재공학부 교수	38
Domain 지식과 AI	김석구 LG에너지솔루션 상무	39

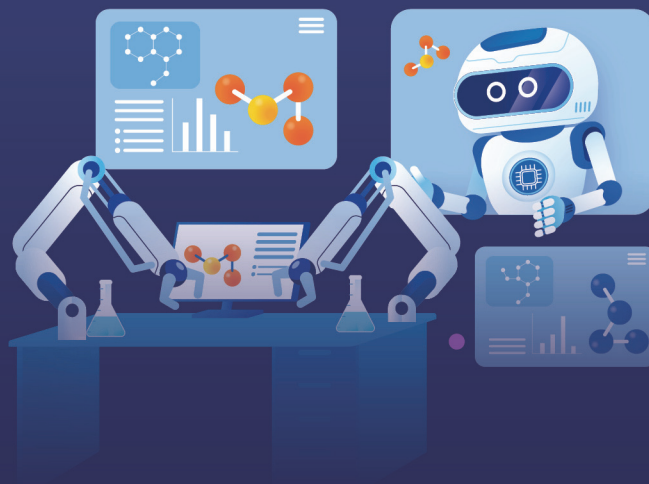
한림원탁토론회 :

AI 프런티어 시리즈

주제발표 1

AI와 로봇을 활용한 소재개발 프로세스 혁신

최윤석 삼성전자 SAIT 마스터(상무)

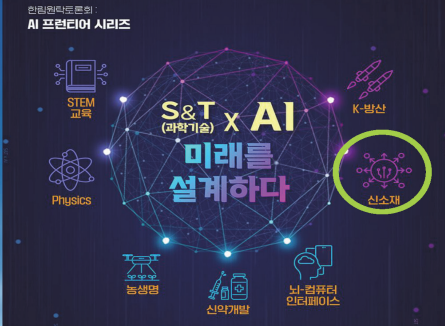


KAST 한국과학기술한림원
The Korean Academy of Science and Technology

제242회 한림원탁토론회
「AI x 신소재」 미래 산업소재의 혁신 설계

AI와 로봇을 활용한 소재개발 프로세스 혁신 (Innovation in the Materials Development Utilizing AI and Robotics)

한림원탁토론회 :
AI 프런티어 시리즈



Youn-Suk Choi
SAIT
25.10.21



SAMSUNG SAMSUNG ADVANCED
INSTITUTE OF TECHNOLOGY

Contents

- About SAIT
- Issues of materials research
- Roles of AI for materials research
- Major hurdle of AI in materials sector
- Our approach
- Future challenges and suggestions

About SAIT



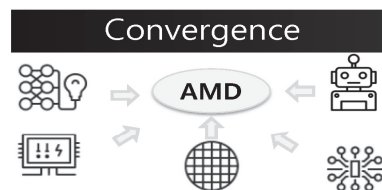
SAIT

- Established as the incubator for cutting-edge technologies
- Research fields: Material, Device, System, Air science

AMD-TU (Autonomous Materials Development - Technical Unit)

- Mission: We advance research to make a better world
- Objective: Innovation of materials development base on AI and robotics

***Applications:** Semiconductor, Display, Electronic materials, Battery, Bio., ...



2

Issues of materials research (1/3)

Process of materials development

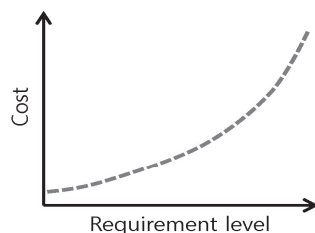
10~20 years (*Tech. Review*, 98, pp.42, 1995)



Hit rate



Financial & technical burden



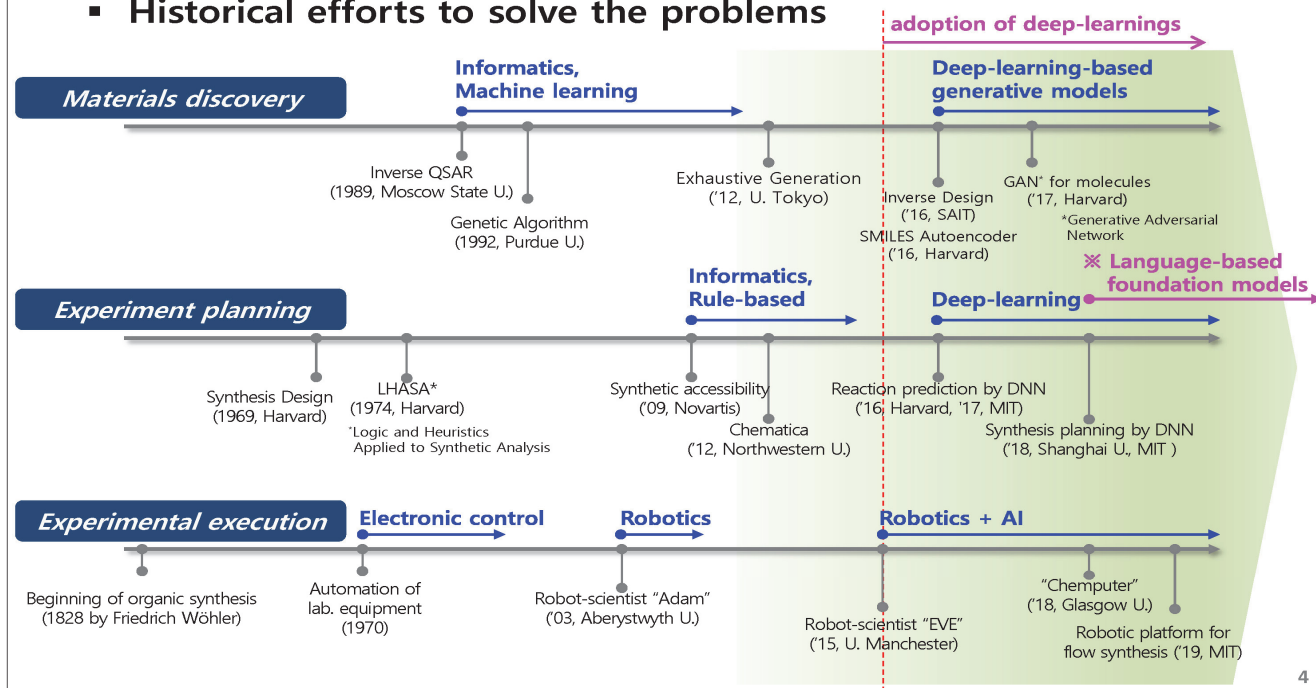
Common questions

- Hidden physics
- Potential chemical space (composition, structure)
- Screening and design rules
- Method of property prediction
- Synthetic recipe
- Optimal formulation or device combination

3

Issues of materials research (2/3)

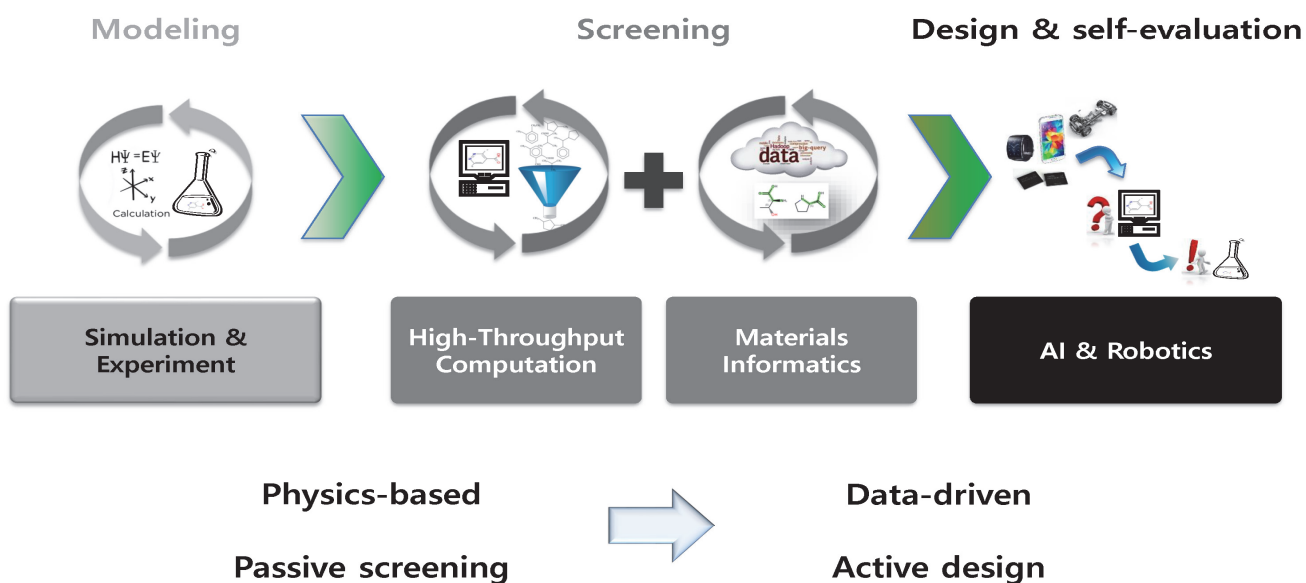
Historical efforts to solve the problems



4

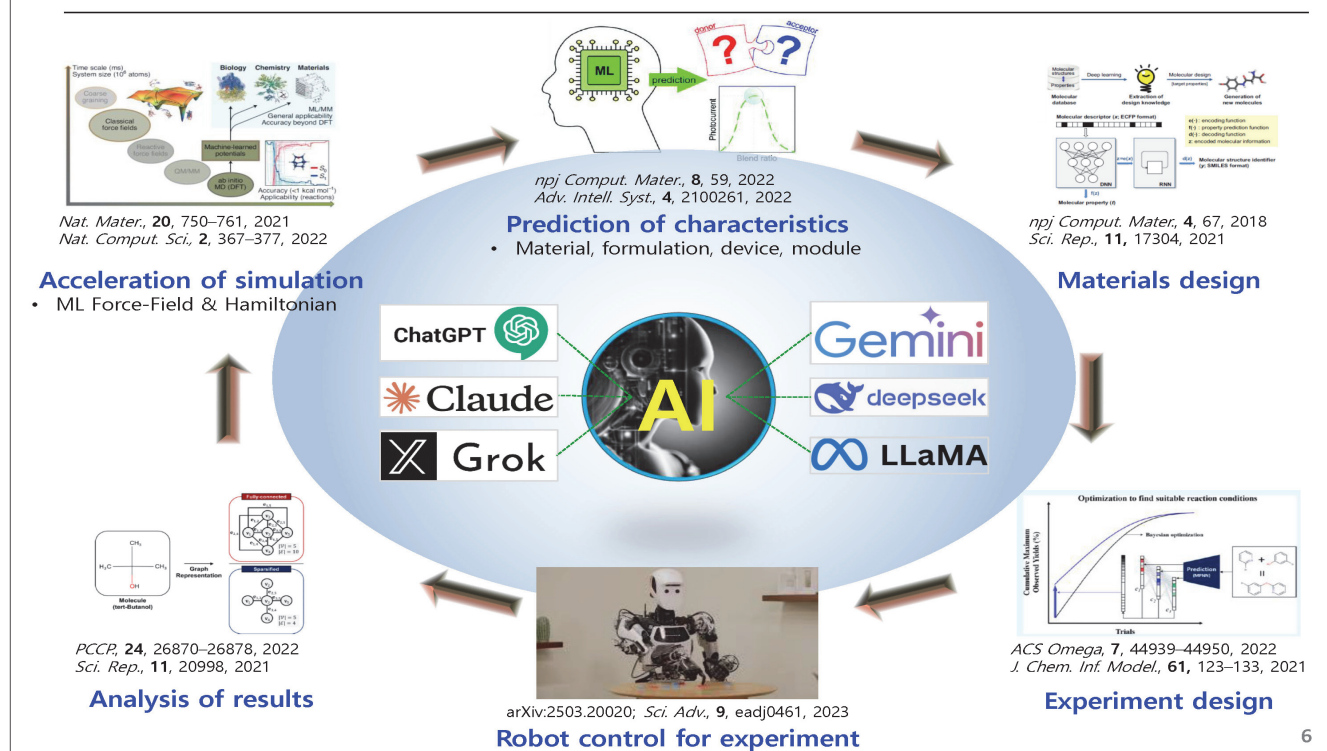
Issues of materials research (3/3)

Technological evolution



5

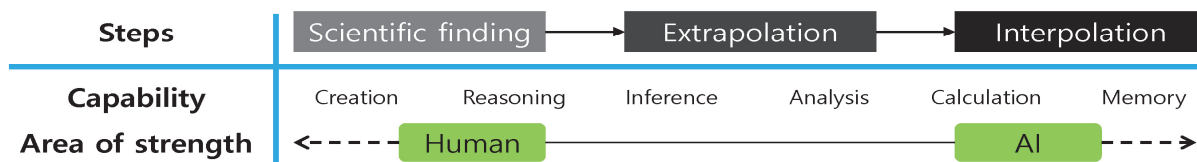
Roles of AI for materials research



6

Major hurdle of AI in materials sector

General steps to develop whole new materials



One of the main hurdles is lack of data, and what's even more desperate is that it cannot be overcome easily !

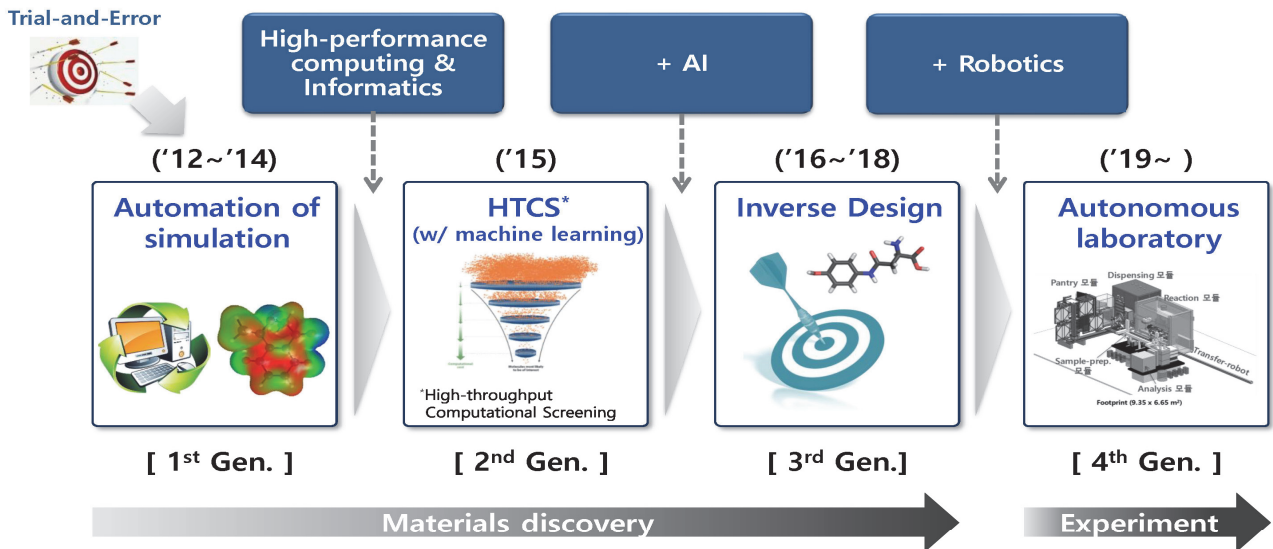
Field	Chemical space	Available DB		DB contents
Organic	∞	• Reaxys (Elsevier; ~75M)	–	• Properties, synthetic recipe
Inorganic	∞	• SciFinder (ACS; ~100M)	• ICSD (~0.26M)	• Crystal structure, property

In case of organic (@Reaxys)	Number of data (a)	Feasible chemical space (b)	Ratio (=a/b)
Molecule	$\sim 8 \times 10^7$	$\sim 10^{62}$	$\sim 1/10^{54}$

- ① Too small data compared to feasible chemical space
- ② High data-cost to make experimentally

7

Our approach

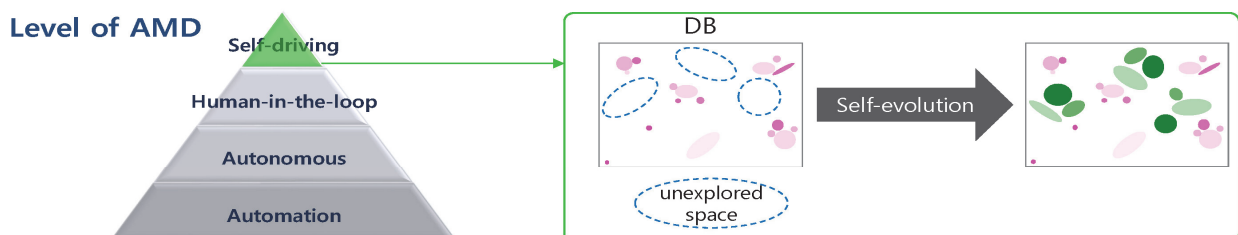
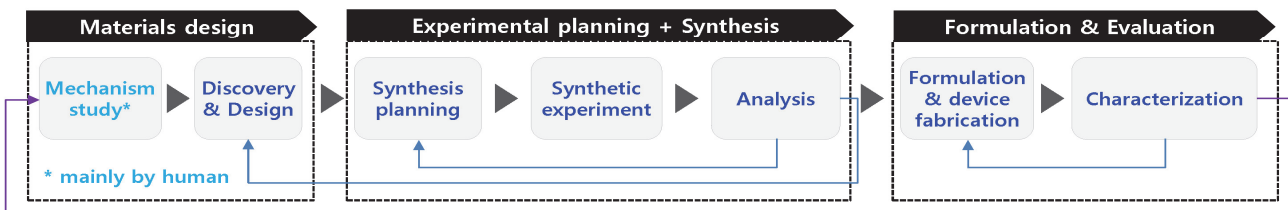


8

Our approach

▪ Strategy to overcome the data issue and accelerate R&D

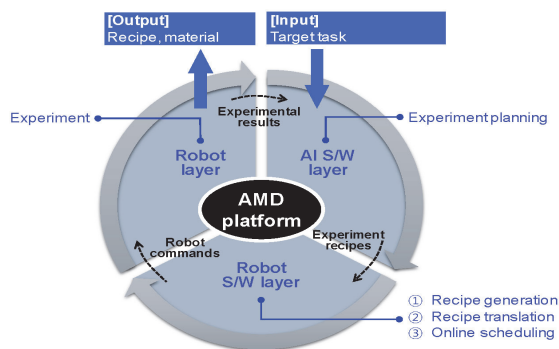
- Build capability to search solutions autonomously with closed-loop operation
- Leverage exploitation and exploration depending on the data availability
- Explore undiscovered area with cooperation of AI and robotics



9

Our approach

Autonomous experiment system



Operation concept

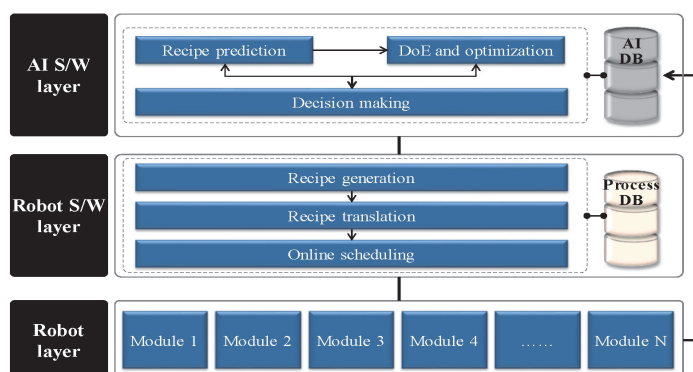


SCIENCE ADVANCES | RESEARCH ARTICLE

APPLIED SCIENCES AND ENGINEERING

AI-driven robotic chemist for autonomous synthesis of organic molecules

Sci. Adv., 9, eadj0461, 2023

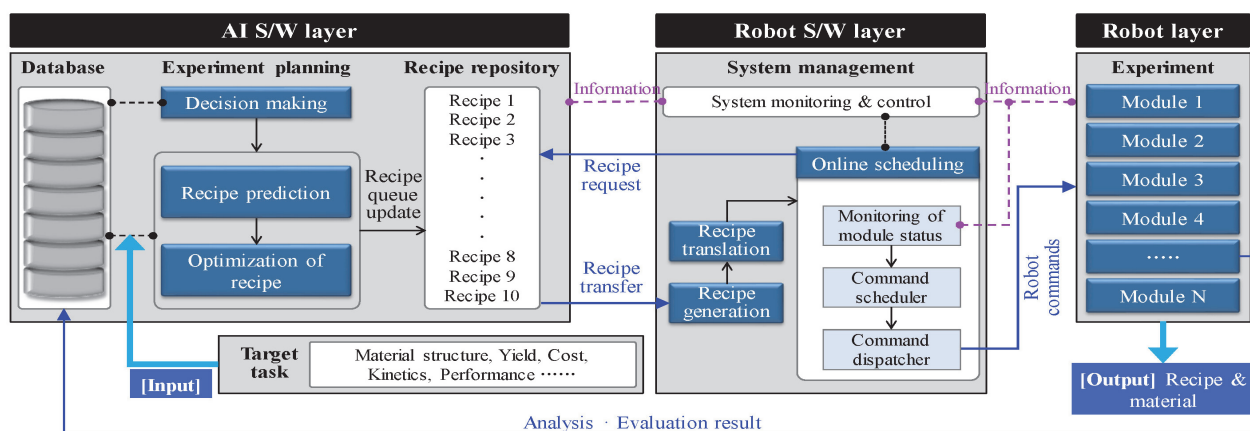


Common architecture

10

Our approach

Autonomous experiment system



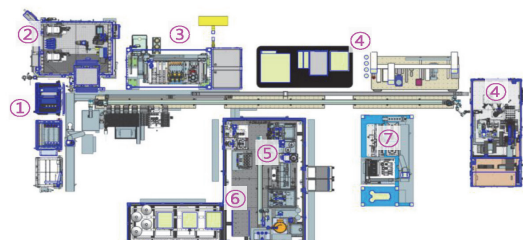
Workflow

Sci. Adv., 9, eadj0461, 2023

11

Our approach

▪ [Example 1] Autonomous organic synthesis platform

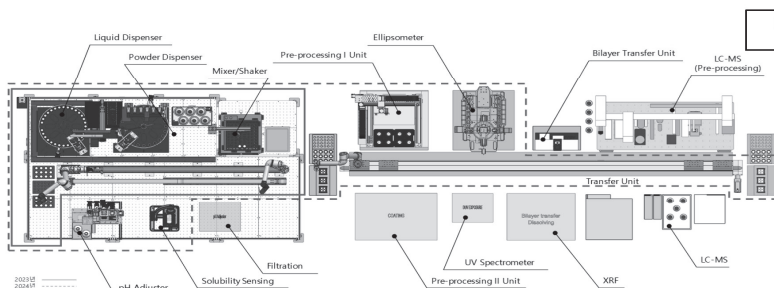


【Multi-step synthesis】

① $A+B \rightarrow C$, ② $C+D \rightarrow E$, ③ $E+F \rightarrow G$...

Layer	Module
Robot	① Pantry, ② Dispensing, ③ Reaction, ④ Analysis, ⑤ Workup, ⑥ Purification, ⑦ Product warehouse

▪ [Example 2] Autonomous formulation & evaluation platform



12

Future challenges and suggestions

1. How to get into the active exploration-stage from passive exploitation-stage?

- Enhance the capability of AI



- Harness the power of foundation models; *knowledge, language interface, functions of agents*
- Conjugate human knowledge, experience, and intuition, but allow AI's serendipity
- Merge *in-house DB* effectively with *open DB*

2. How to accumulate high-quality data efficiently and economically?

- Modularization and standardization of H/W and S/W; *easy build, industrial eco, data compatibility*
- Increase the role of robots to secure not only cost-effectiveness but also versatility

3. Harmony between AMD tech. and human for synergy

13

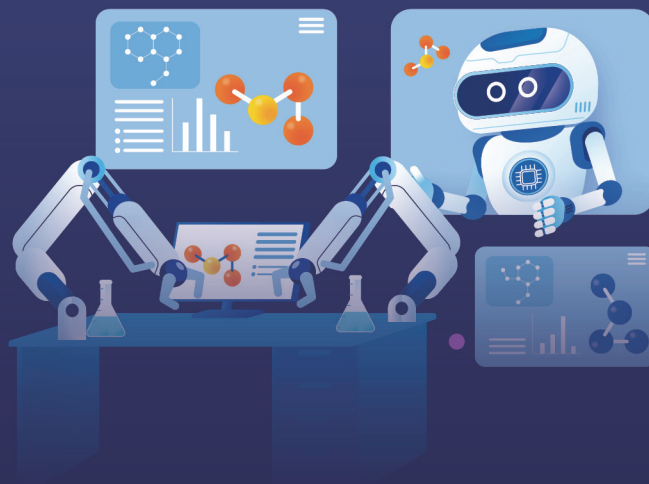
한림원탁토론회 :

AI 프런티어 시리즈

주제발표 2

신소재를 위한 파운데이션 모델 개발 전망

한승우 서울대학교 재료공학부 교수

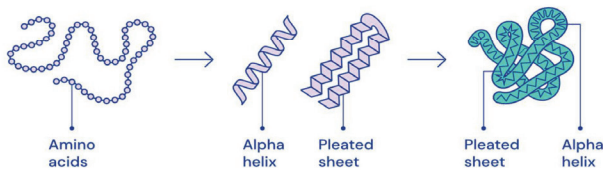




재료공학 AX 방안

한 승 우
서울대학교 재료공학부
고등과학원 AI 센터

알파폴드



단백질 은행 ~ 200K 구조

The Royal Swedish Academy of Sciences has decided to award the Nobel Prize in Chemistry 2024

with one half to

David Baker
University of Washington, Seattle, WA, USA
Howard Hughes Medical Institute, USA

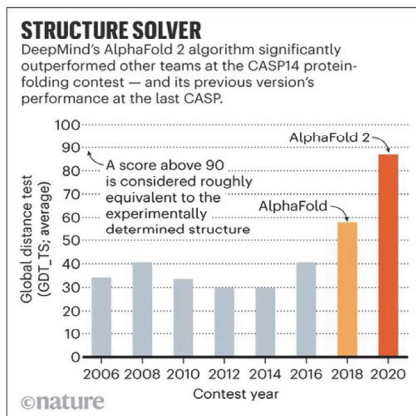
"for computational protein design"

and the other half jointly to

Demis Hassabis
Google DeepMind, London, UK

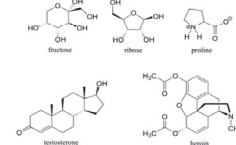
John Jumper
Google DeepMind, London, UK

"for protein structure prediction"

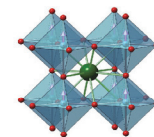


재료공학분야 물질의 복잡성

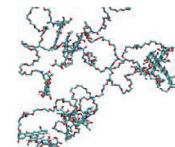
유기분자



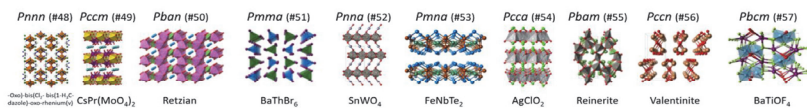
무기고체



폴리머



~90 개의 원소가 모두 쓰임 → “조합 폭발”



ICSD (~200k)

3

실험 데이터 확충을 위한 노력

- K-MDS 사업
- 소재 허브 사업
- 자율실험실

→ 장기적인 노력이 필요할 것으로 예상



단기적 관점에서 실현가능한 AX

- 계산과학데이터
- 문헌데이터

Scientific Background to the Nobel Prize in Physics 2024



“FOR FOUNDATIONAL DISCOVERIES AND INVENTIONS
THAT ENABLE MACHINE LEARNING
WITH ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS”

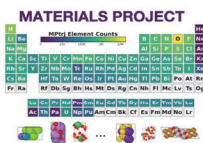
The Nobel Committee for Physics

...ANNs are increasingly playing an important role as a powerful tool for modelling and analysis in almost all of physics...
.... Significant advances have been achieved in this way, e.g. for quantum-mechanical many-body problems [37-39]. Here,
deep learning architectures are trained to reproduce ... the shape and strength of interatomic forces, with an accuracy
comparable to ab initio quantum-mechanical models. With these ANN trained atomic models, considerably faster
determination of phase stabilities and the dynamics of new materials can be made. [40-41]....

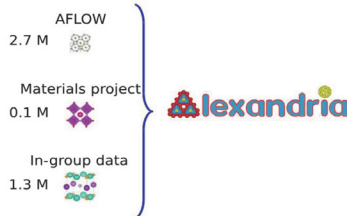
Machine learning interatomic potential: $O(N^3) \rightarrow O(N)$

5

DFT 학습 데이터

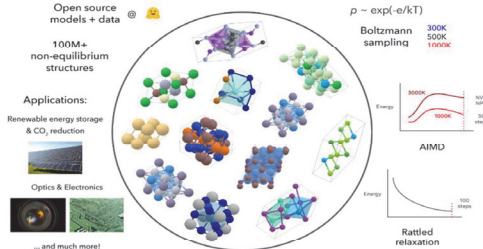


PBE (v.5.2), 1.6 M structures



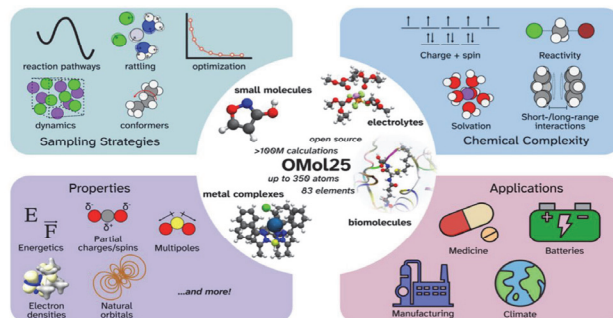
PBE (v.5.2), 100 M structures

Open Materials 2024 (OMat24)



PBE, 100 M structures

arXiv:2410.12771



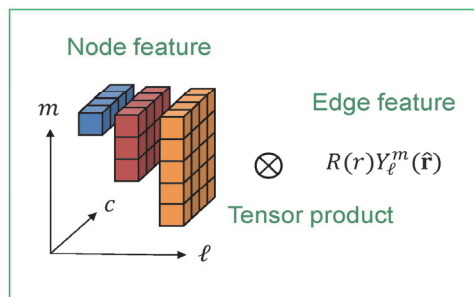
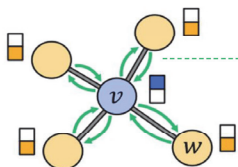
arXiv:2505.08762

6



(Scalable equivariance-enabled neural Network)

- Nequip architecture
- 병렬화
- Multi-task or multi-fidelity 학습 가능

박유탉 et al, J. Chem. Theory Comput. **20**, 4857 (2024)김재선 et al, J. Am. Chem. Soc. **147**, 1042 (2025)

7

Matbench Discovery

Full Test Set Unique Prototypes 10k Most Stable

Click on column headers to sort table rows

Compliant models Non-compliant models Energy-only models Heatmap Columns

Org	Model	CPS ↑	Acc ↑	F1 ↑	DAF ↑	Prec ↑	MAE ↓	R ² ↑	K _{SRME} ↓	RMSD ↓	Training Set	Params	Targets	Date Added	Links	r _{cut}	Org
ICAMS	eSEN-30M-OAM	0.888	0.977	0.925	6.069	0.928	0.018	0.866	0.170	0.061	6.6M (113M) OMat24+MPtrj+sAlex	30.2M	EFS _G	2025-03-17	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	ORB v3	0.861	0.971	0.905	5.912	0.904	0.024	0.821	0.210	0.075	6.47M (133M) MPtrj+Alex+OMat24	25.5M	EFS _G	2025-04-05	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	SevenNet-MF-ompa	0.845	0.969	0.901	5.825	0.890	0.021	0.867	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	GRACE-2L-OAM	0.837	0.963	0.880	5.774	0.890	0.021	0.866	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	eSEN-30M-MP	0.797	0.946	0.831	5.260	0.890	0.021	0.866	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	MACE-MPA-0	0.795	0.954	0.852	5.582	0.890	0.021	0.866	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	MatterSim v1.5M	0.767	0.959	0.862	5.852	0.890	0.021	0.866	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	DPA3-v2-OpenLAM	0.762	0.966	0.890	5.747	0.890	0.021	0.866	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	GRACE-1L-OAM	0.761	0.944	0.824	5.255	0.890	0.021	0.866	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	SevenNet-13i5	0.714	0.920	0.760	4.629	0.890	0.021	0.866	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	MatRIS v0.5.0 MPtrj	0.681	0.938	0.809	5.049	0.890	0.021	0.866	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	GRACE-2L-MPtrj	0.681	0.896	0.691	4.163	0.890	0.021	0.866	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	DPA3-v2-MPtrj	0.646	0.929	0.786	4.822	0.890	0.021	0.866	0.317	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	25.7M	EFS _G	2025-03-13	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	MACE-MP-0	0.644	0.878	0.669	3.777	0.577	0.057	0.697	0.647	0.091	146k (1.58M) MPtrj	4.69M	EFS _G	2023-07-14	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	AlphaNet-MPTrj	0.566	0.933	0.799	4.863	0.743	0.041	0.745	1.310	0.107	146k (1.58M) MPtrj	16.2M	EFS _G	2025-03-05	info link link	6 Å	ICAMS
ICAMS	eqV2 M	0.558	0.975	0.917	6.047	0.924	0.020	0.848	1.771	0.069	3.37M (102M) OMat24+MPtrj	86.6M	EFS _G	2024-10-18	info link link	12 Å	ICAMS
ICAMS	ORB v2	0.529	0.965	0.880	6.041	0.924	0.028	0.824	1.732	0.097	3.25M (32.1M) MPtrj+Alex	25.2M	EFS _G	2024-10-11	info link link	10 Å	ICAMS
ICAMS	eqV2 S DeNS	0.522	0.941	0.815	5.042	0.771	0.036	0.788	1.676	0.076	146k (1.58M) MPtrj	31.2M	EFS _G	2024-10-18	info link link	12 Å	ICAMS
ICAMS	ORB v2 MPtrj	0.470	0.922	0.765	4.702	0.719	0.045	0.756	1.725	0.101	146k (1.58M) MPtrj	25.2M	EFS _G	2024-10-14	info link link	10 Å	ICAMS
ICAMS	M3GNet	0.428	0.813	0.569	2.882	0.441	0.075	0.585	1.412	0.112	62.8k (188k) MPF	228k	EFS _G	2022-09-20	info link link	5 Å	ICAMS
Berkeley	CHGNet	0.400	0.851	0.613	3.361	0.514	0.063	0.689	1.717	0.095	146k (1.58M) MPtrj	413k	EFS _G M	2023-03-03	info link link	5 Å	Berkeley
Berkeley	GNoME	NaN	0.955	0.829	5.523	0.844	0.035	0.785	n/a	n/a	6M (89M) GNoME	16.2M	EF _G	2024-02-03	info link link	5 Å	Berkeley

한승우

김재선

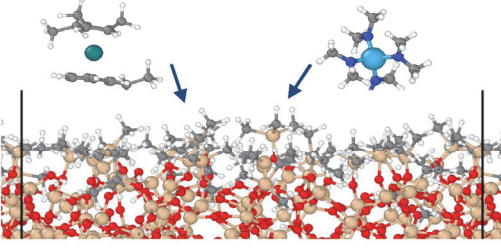
박유탉

이승렬
이재욱

재료과학

컴퓨터공학

Open					Inorganic DB / Organic (molecular) DB
Model	7net-0	7net-I3i5	7net-MF-ompa	7net-MF-ompas	7net-Omni
Date	2024/06/11	2024/12/12	2025/03/17	2025/04/20	WIP
# params	0.84 M	1.17 M	25.7 M		25.7 M
Dataset	MPtrj (PBE_5.2)	MPtrj (PBE_5.2)	MPtrj (PBE_5.2) sAlex (PBE_5.2) OMat (PBE_5.4)	MPtrj (PBE_5.2) sAlex (PBE_5.2) OMat (PBE_5.4) SPICE (ω B97M)	MPtrj (PBE) Alex (PBE) OMat (PBE) MP(r^2 SCAN) MatPES (PBE) MatPES (r^2 SCAN) OC20 (RPBE) OC22(PBE) SPICE (ω B97M) QCML(PBE0) OMol25 (ω B97M-V)
# of structures	1.6 M	1.6 M	113 M	115 M	> 200 M
Inference time	1	2.0	5.1		5.1

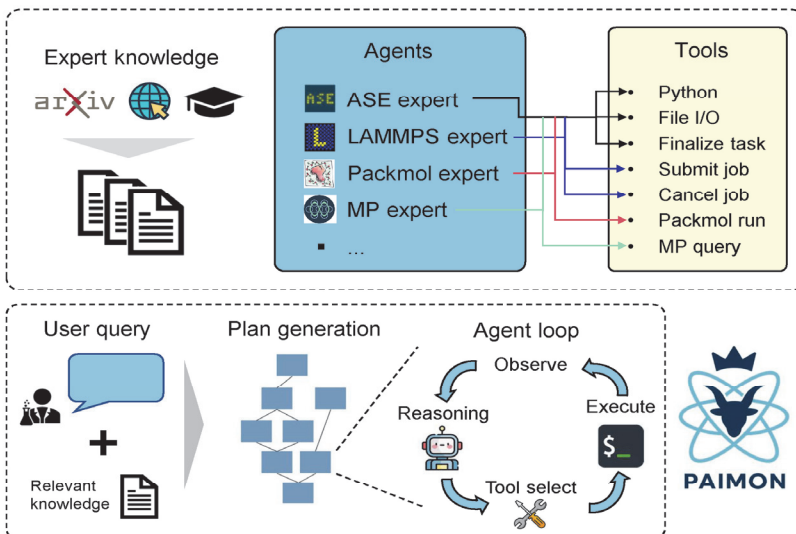


Inhibitor-coated α -SiO₂

9

계산 자동화

Paimon: multi-agent, dynamic planning framework for meta-automation of materials computation



- Multi-agent framework designed for atomistic simulations
- Llama-index as LLM framework
- Covers entire simulation process (planning, execution, analysis)
- SevenNet force field
- Integrated with SLURM

10

사례: 액체전해질 밀도



What is the liquid density of {molecule} at room temperature? Compute it via atomistic simulations.

	Ref.* ρ (g/cm ³)	Paimon ρ (g/cm ³)	# Subtasks	# LLM call
EC	1.3661	1.3628	5	46
DFEC	1.5153	1.5086	6	60
MFDMC	1.4279	1.3895	9	80
TFDMC	1.6173	1.5893	9	116
EA	1.0281	1.0234	9	88
EP	1.0194	1.0092	7	53
PC	1.2627	1.2672	6	62
FEC	1.5027	1.5172	8	84

- Planner LLM: OpenAI – o3
- Agent LLM: OpenAI – o4 mini
- LLM – generated expert knowledge from reference*. (o3)
- Initial geometries of molecule are given.
- SevenNet-0 + D3

* Digital Discovery 4, 1544 (2025)

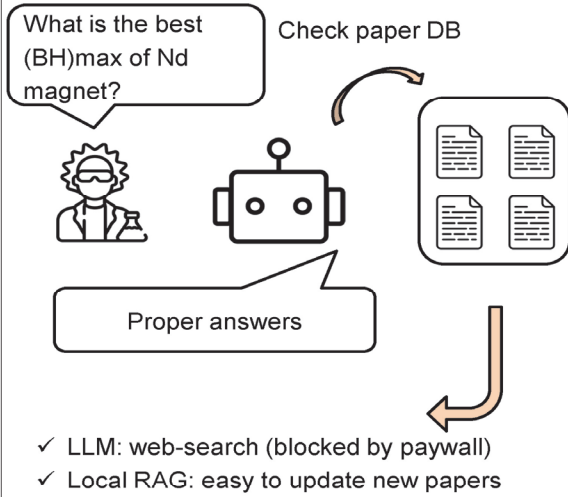
11

언어 모델과 문헌 데이터를 활용한 AX

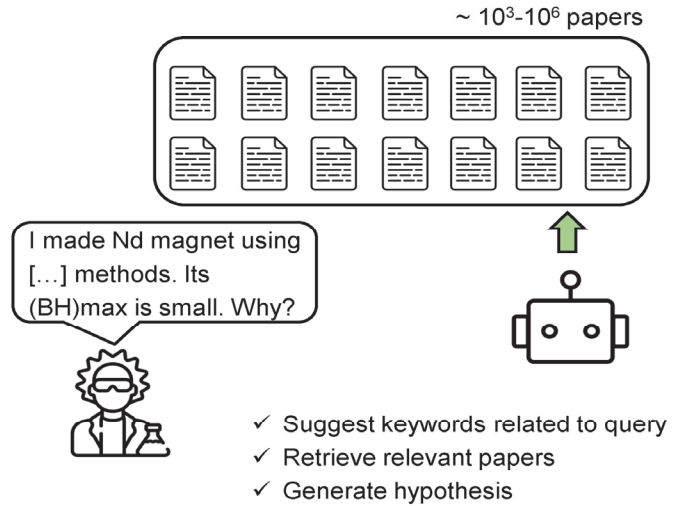
- 재료공학 분야는 많은 문헌을 (6백만편으로 추산) 축적하고 있고 매년 15-20만편의 논문이 쏟아지고 있음. (By GPT-5)
- 경험 많은 연구자라고 해도 본인 분야의 논문을 다 따라가지 못함.
- 타 분야의 논문도 참고해야 하는 경우가 많은데 필요한 정보를 얻는데 많은 시간이 소요됨.
- 학생들 또한 넘치는 문헌 속에서 옥석을 가리기 어려움.

발달된 언어 모델을 통해서 필요한 정보를 빠르고 정확하게 얻을 수 있다면
재료공학 분야 발전에 큰 도움이 될 것으로 예상함.

• Retrieval-augmented generation (RAG)



• Reasoning + RAG



13

Bohrium

what is the typical density of OH group on SiO₂ surface?

what is the typical density of OH group on SiO₂ surface?

Understood the question and identified the research direction

Q OH group Q hydroxyl group Q SiO₂ Q silica Q surface density

Delved deeper

How does the OH group density vary with surface treatment or conditions?

Q OH group Q hydroxyl group Q surface treatment Q surface conditions Q density

What factors influence the OH group density on SiO₂?

Q OH group density Q SiO₂ Q surface chemistry Q silicon dioxide Q surface hydroxyl groups

What measurement units are used to express OH group density?

Answer from literature

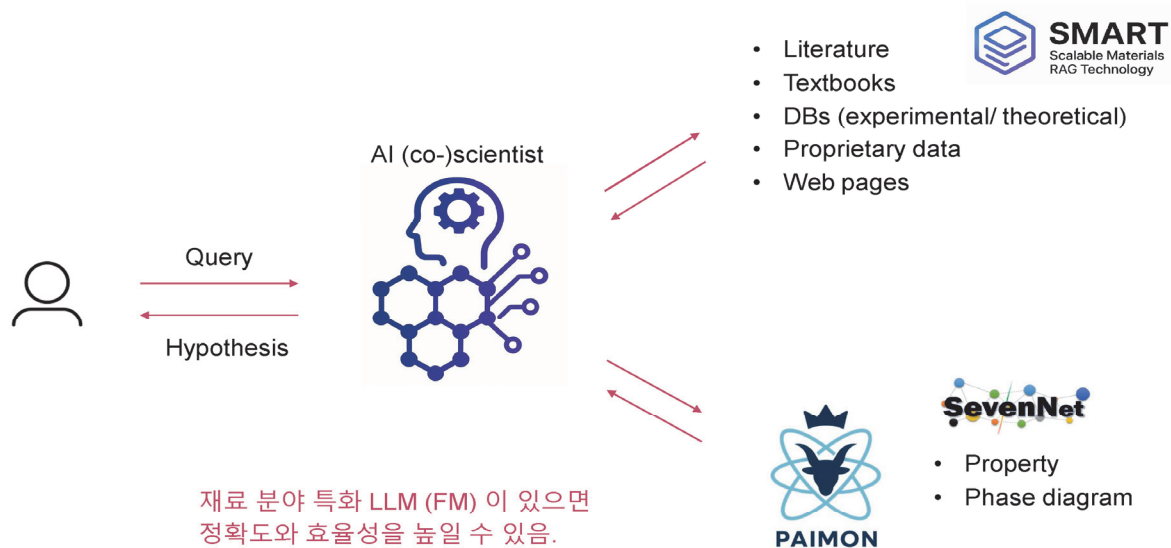
Total of 78 resources Relevance first Filter

1. Concentration of hydroxyl groups on the surface and in the volume of silicas
A. A. Agzamkhodzha... L. T. Zhuravlev
1969-10-01 | Bulletin of the Academy o...
2. Relationship between activity of silica thin films and density of cells occupation
V. Jokanovic B. Colovic
2013-06-22 | Journal of Biomedical Ma... (IF 3.9)
3. Surface OH group governing wettability of commercial glasses
Satoshi Takeda Kiyoshi Yamamoto
1999-07-01 | Journal of Non-Crystallin... (IF 3.5)

Chat with papers Add

14

Cognitive Materials Intelligence System



15

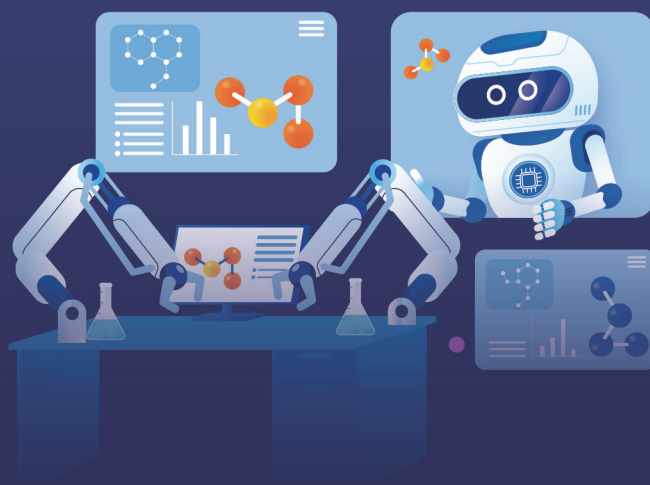
한림원탁토론회 :

AI 프런티어 시리즈

주제발표 3

AI 활용을 위한 생태계 기반의 빅데이터 구축

신정호 한국화학연구원 화학플랫폼연구본부 디지털화학연구센터 센터장



AI 활용을 위한 생태계 기반의 빅데이터 구축

KRICT
한국화학연구원

Virtual Lab

KMIST

KIMS

KRISs
한국표준과학연구원

KMI

KIST

Korea Research Institute of Chemical Technology

한양대학교
HANYANG UNIVERSITY

KU

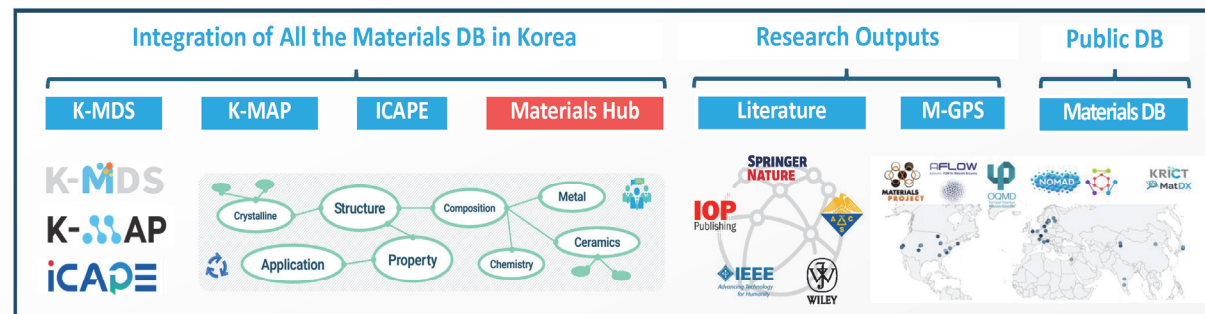
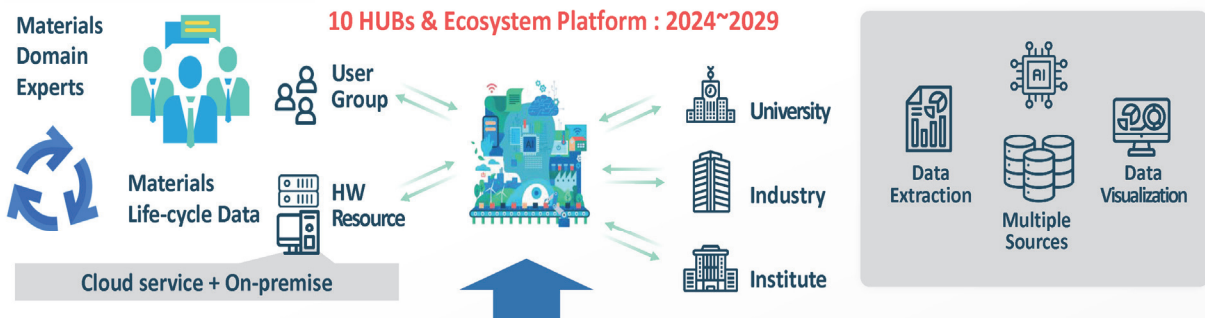
순천대학교
SUNGCHUN UNIVERSITY

KGU

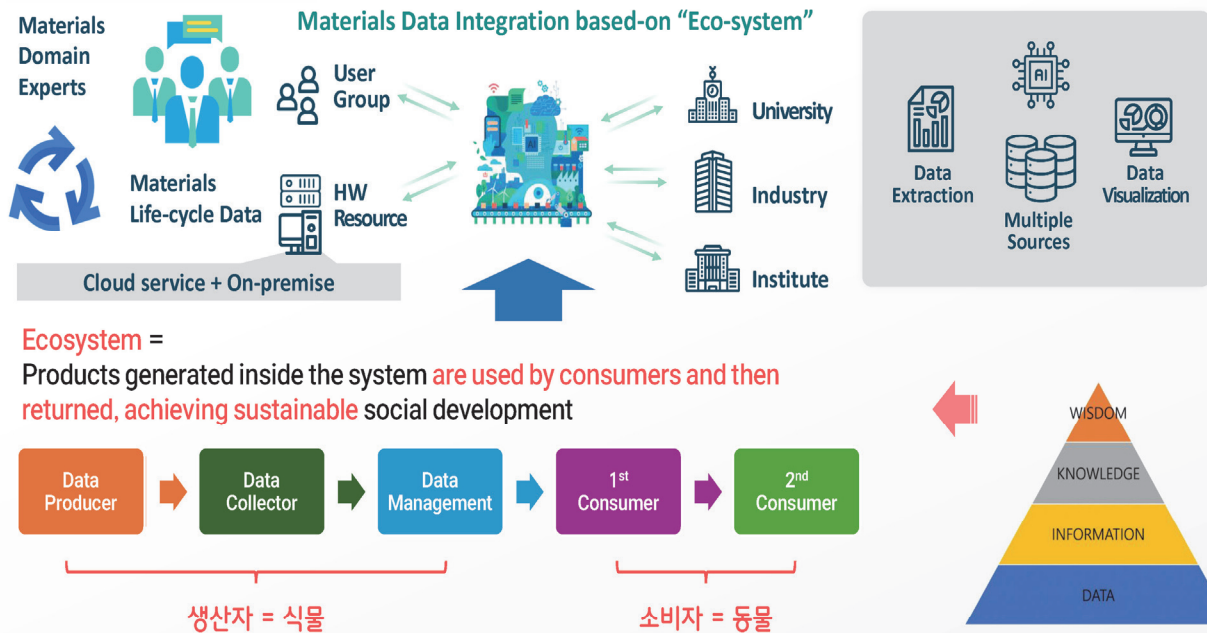
경기도대학교

경북대학교

생태계 – 생태계 플랫폼

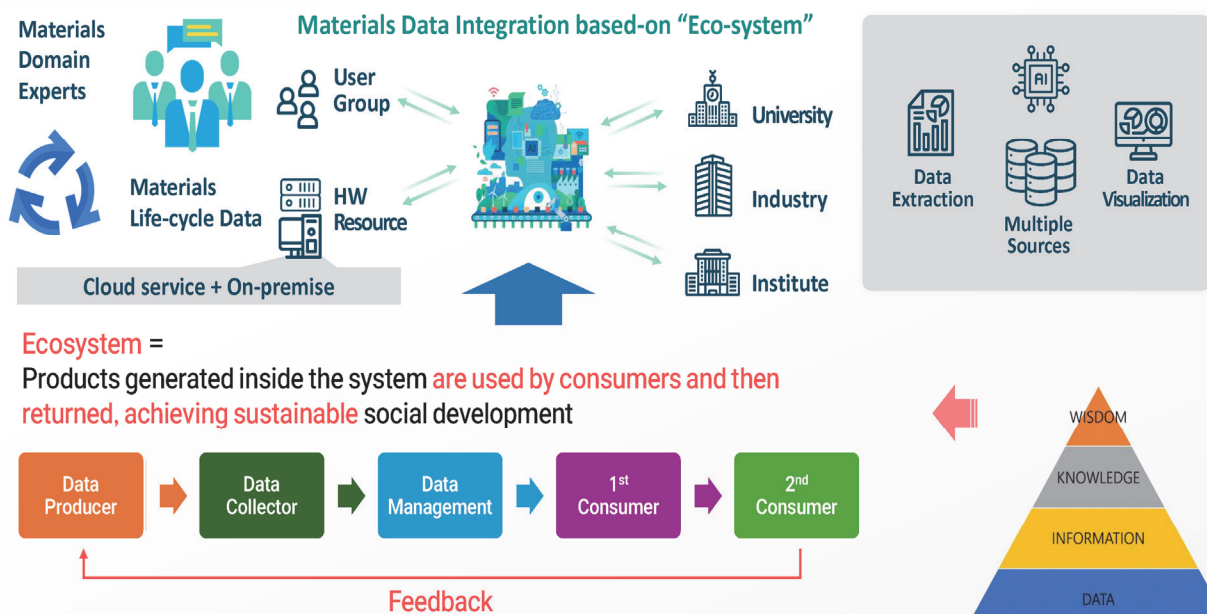


생태계 – 생태계 플랫폼



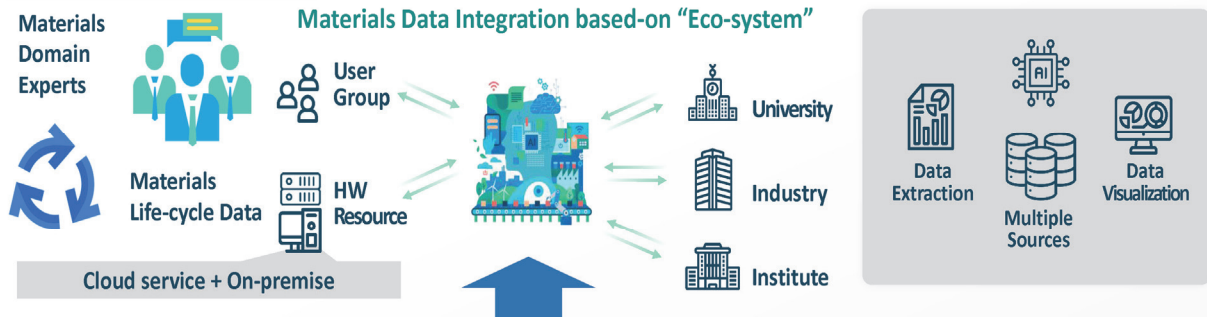
3

생태계 – 생태계 플랫폼



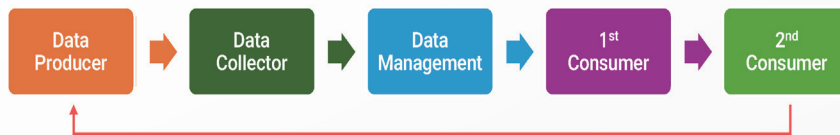
4

생태계 – 생태계 플랫폼



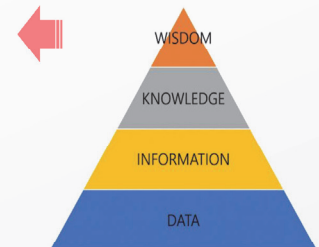
Ecosystem =

Products generated inside the system are used by consumers and then returned, achieving sustainable social development



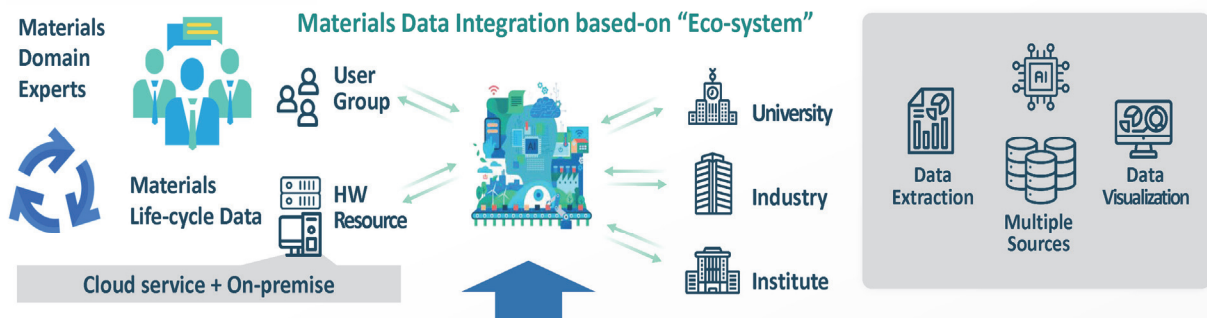
법칙 1 : 닫힌 사회에서의 자급자족 구현 : 외부 개입없이 스스로 환원 과정에 도달

법칙 2 : 후세대가 전세대의 유산을 바탕으로 더욱 유능해질 것 = 보전 & 번영



5

생태계 – 생태계 플랫폼

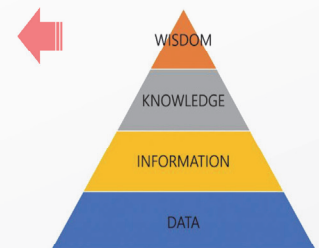


Ecosystem =

Products generated inside the system are used by consumers and then returned, achieving sustainable social development



Feedback = 온톨로지 = 트리플 & 공리



6

트리플 & 공리

온톨로지 및 지식 그래프에서 정보를 표현하는 기본 단위로,
주어(subject), 술어(predicate), 목적어(object)로 구성된 3항 구조
= RDF(Resource Description Framework)의 핵심 개념

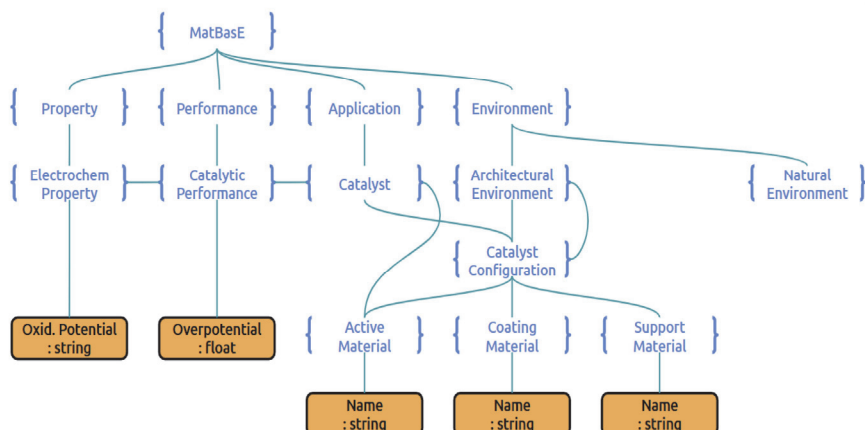
- 주어 (Subject): 어떤 개체(클래스나 인스턴스)를 의미
- 술어 (Predicate): 두 개체 간의 관계 또는 속성(property)
- 목적어 (Object): 또 다른 개체이거나 리터럴 값(숫자, 문자열 등)일 수 있습니다.

```
<Sample_001> <hasBandGap> "1.53 eV"
<Sample_001> <measuredBy> <UV-Vis>
<Sample_001> <composedOf> <MAPbI3>
```

Triple store : 트리플들을 저장하는 데이터 베이스

7

트리플 & 공리



예: "1.5 eV 이상의 밴드갭을 갖고, 전도도는 10 S/m 이상인 재료는?"

- 이런 질의는 전통적인 엑셀/SQL에서는 매우 복잡하지만,
- 트리플 기반 RDF + 온톨로지라면 **간결하고 명확한 질의가 가능**

8

트리플 & 공리

공리(Axiom)**는 개념들(클래스, 속성, 개체 등) 간의 논리적 관계나 규칙을 정의하는 문장

```
:Oxide owl:equivalentClass [
  owl:intersectionOf (
    :Material
    [ owl:Restriction (owl:onProperty :hasElement owl:hasValue :Oxygen) ]
  )
] .
```

→ "산소(O)를 포함한 재료는 산화물이다."

⇒ 이를 통해 자동 분류 가능 (Reasoner가 추론)

9

트리플 & 공리

3. 공리 vs 트리플

요소	트리플 (Triple)	공리 (Axiom)
역할	사실/데이터 단위 표현	논리 규칙/제약 조건 설정
예시	<code><MAPbI3> <hasBandGap> "1.53 eV"</code>	<code>Oxide ≡ Material ∩ hasElement(O)</code>
확장성	사실을 단순 수집	새로운 사실 자동 도출 (추론 가능)
사용 도구	RDF 기반 그래프 도구	OWL 기반 온톨로지 모델러 (e.g., Protégé)

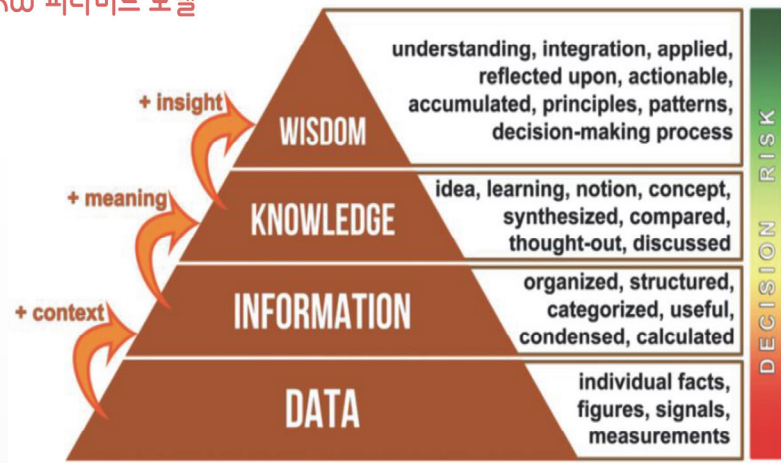
→ 공리가 없다면 온톨로지는 단순한 데이터 집합일 뿐, 의미 기반 추론은 불가능

10

생태계 – 생태계 플랫폼

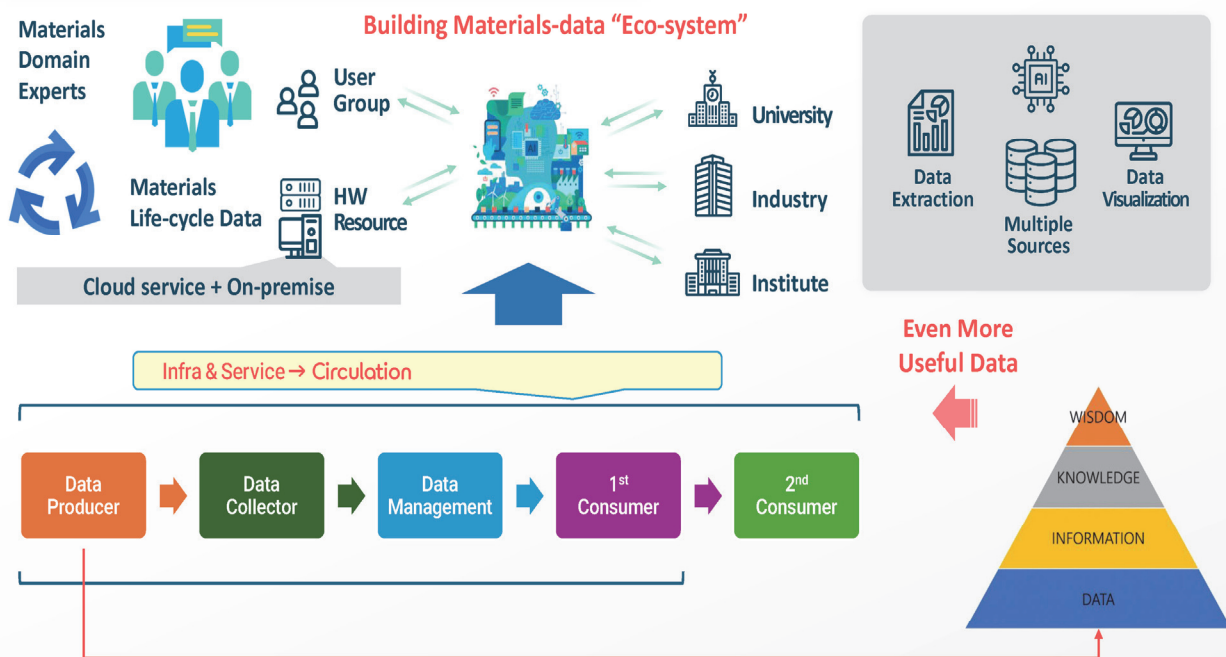
데이터 활용 → knowledge로의 전환 → **wisdom**

DIKW 피라미드 모델



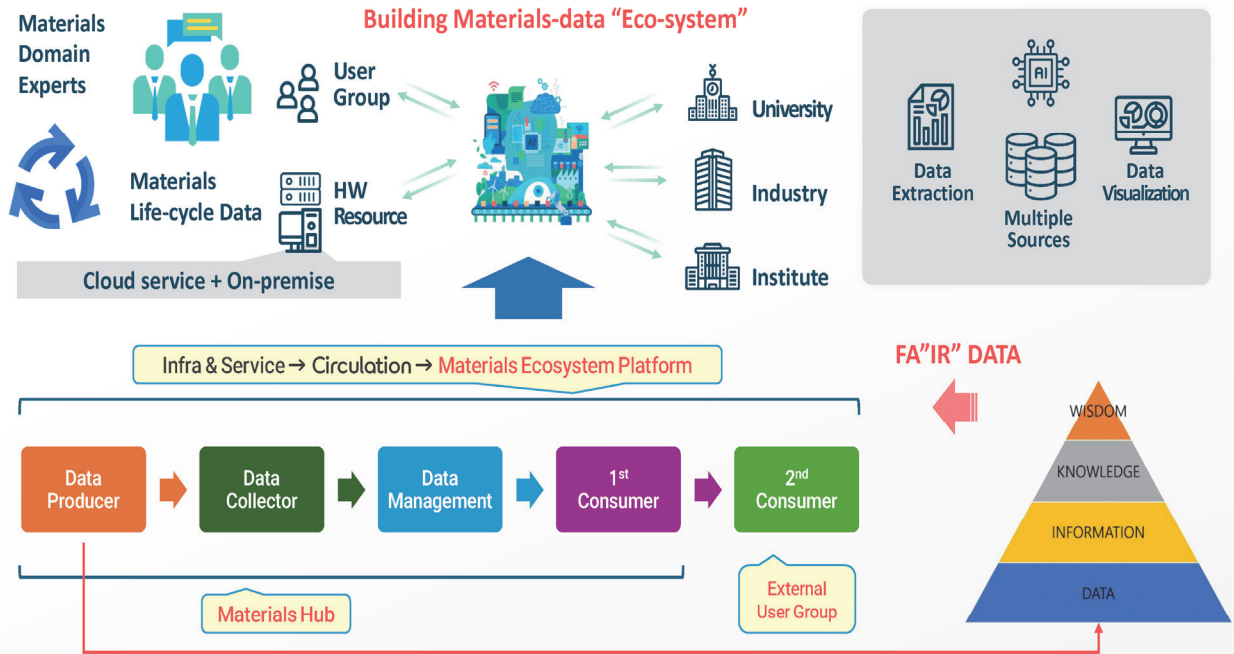
11

Ecosystem Platform for Materials Data



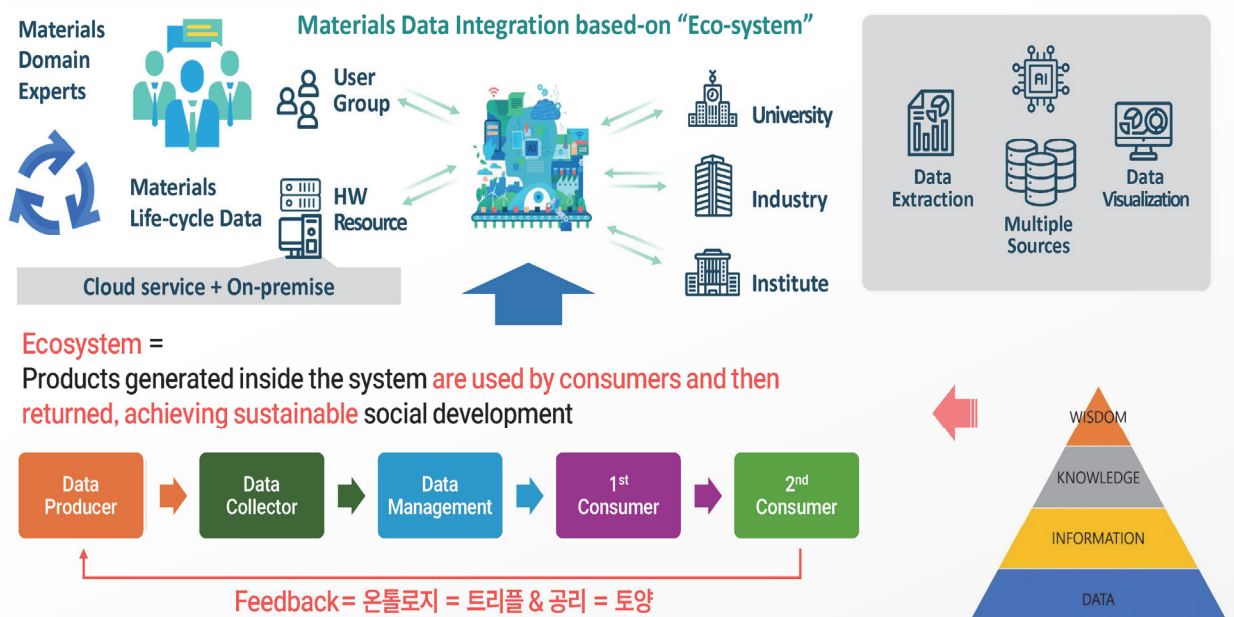
12

Ecosystem Platform for Materials Data



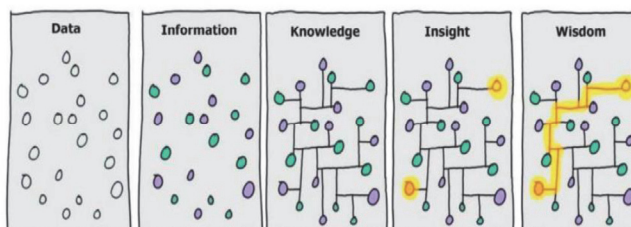
13

생태계 - 생태계 플랫폼



14

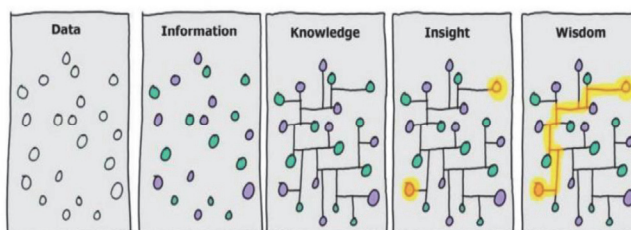
데이터 활용 목적



- 1. 데이터(Data)**는 가공되지 않은 객관적인 사실이다. 무언가를 의미하거나, 의미없는 일련의 임의의 점들로 표시된다
- 2. 정보(Information)**는 특정 목적에 따라 데이터를 가공해 낸 결과이다. 원시 데이터 중에서 의미나 관계를 가지는 것이 정보가 된다. 데이터와 다른 색상으로 표시된다
- 3. 지식(Knowledge)**는 구구단과 같이 다양한 정보를 체계화시켜 암기할 수 있을 때 얻어진다. 지식을 얻음에 따라 우리는 사물을 이해하기 시작하고, 서로 다른 정보를 연결할 수 있다
- 4. 통찰(Insight)** 단계에서 부터 데이터가 유용하게 사용된다. 통찰, 다른 말로 인사이트는 주어진 상황에 대한 깊은 이해를 바탕으로 지식을 종합하고 패턴화하는 능력이다
- 5. 지혜(Wisdom)**란 종합된 지식, 패턴화된 지식을 바탕으로 올바른 의사결정을 수행하는 능력이다

15

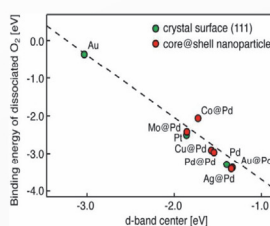
데이터 활용 목적



Data

Knowledge

	Bare Au ₁₃		CO/Au ₁₃	
	ϵ_{LSPR} (eV)	W_{LSPR} (eV)	ϵ_{LSPR} (eV)	W_{LSPR} (eV)
Au ₁₃	-1.89	1.64	-1.52	4.85
Au ₁₄	-2.63	2.36	-2.05	3.44
Au@1	-2.66	2.22	-2.78	2.87
Au@2	-2.60	2.48	-3.32	3.93
Au ₁₅	-3.25	3.24	-3.38	3.89
Au@1	-3.42	3.26	-3.47	3.83
Au@2	-3.21	3.28	-4.18	4.55
Au@3	-3.14	3.17	-2.48	2.87
Au ₁₆	-2.59	2.72	-3.13	5.26
Au@1	-2.59	2.65	-2.76	2.61
Au@2	-2.54	2.77	-2.55	2.50
Au@3	-2.59	2.78	-4.40	4.72
Au@4	-2.62	2.68	-2.81	2.66



catalytic activity
≡
d-band center

16

트리플 & 공리

SWRL (Semantic Web Rule Language)

: 의미 기반 웹을 위한 규칙 언어로 OWL(온톨로지 언어) + RuleML(규칙 언어)의 결합

- 조건(Antecedent) → 결과(Consequent) 구조로 되어 있음
- "만약 A라면, B라고 결론 내릴 수 있다" 형태의 논리적 규칙

▶ 예시 (산화물 분류 규칙)

swrl

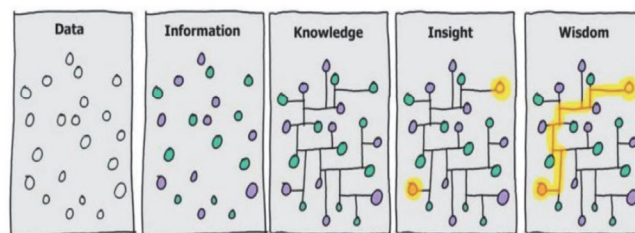
복사 편집

```
Material(?x) ^ hasElement(?x, Oxygen) → OxideMaterial(?x)
```

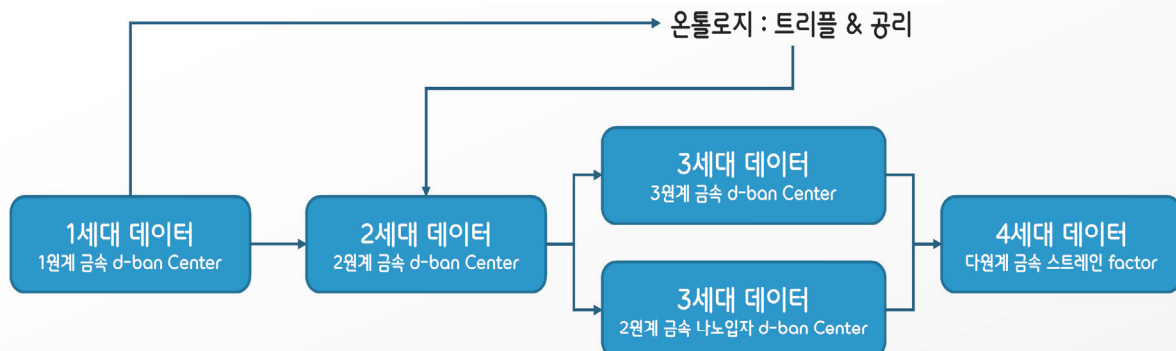
- 의미: "어떤 개체 x가 Material이고, Oxygen을 포함하면 → 그 x는 OxideMaterial이다."

17

데이터 활용 목적

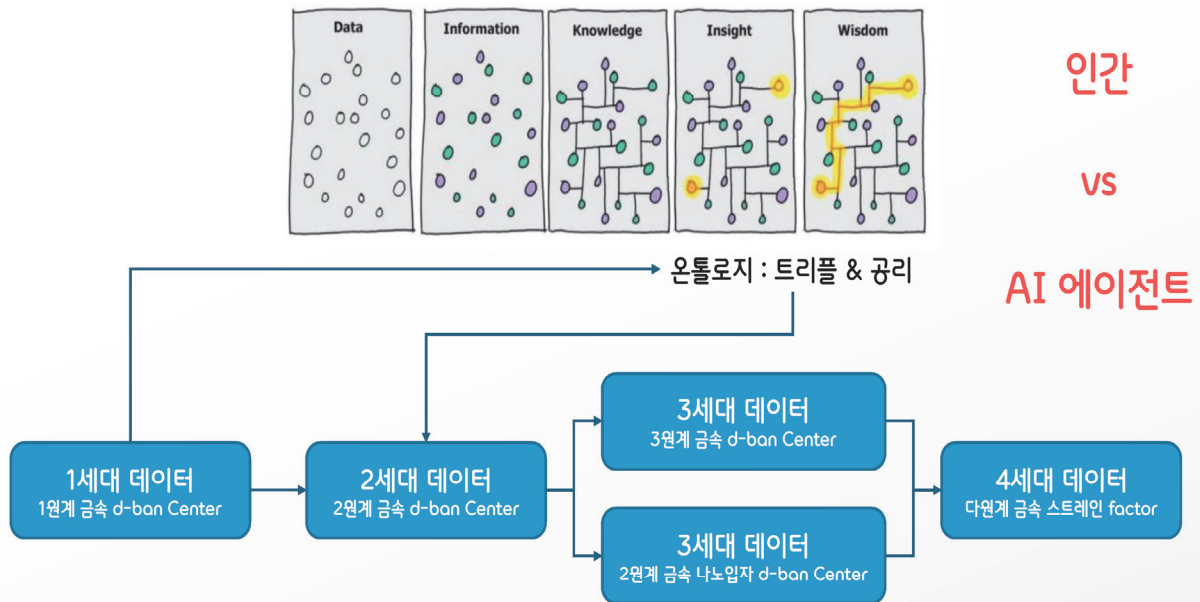


온톨로지 : 트리플 & 공리



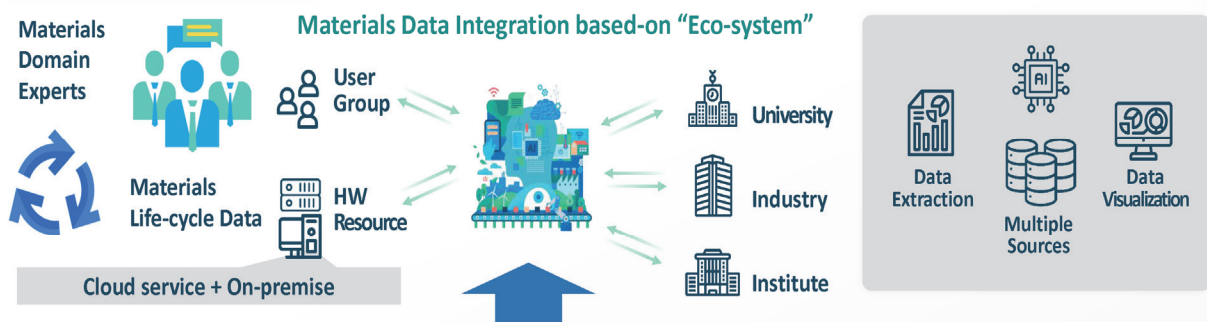
18

데이터 활용 목적



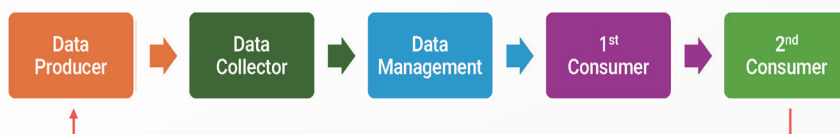
19

생태계 - 생태계 플랫폼



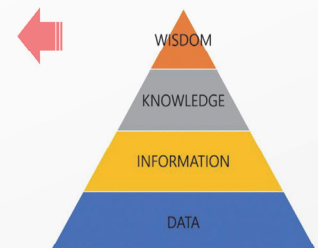
Ecosystem =

Products generated inside the system are used by consumers and then returned, achieving sustainable social development



법칙 1 : 닫힌 사회에서의 자급자족 구현 : 외부 개입없이 스스로 환원 과정에 도달

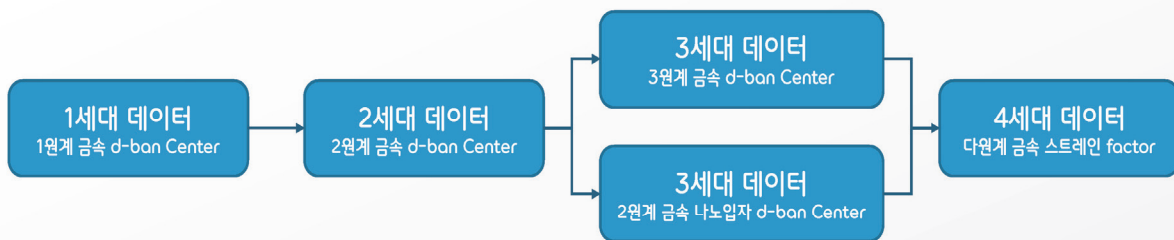
법칙 2 : 후세대가 전세대의 유산을 바탕으로 더욱 유능해질 것 = 보전 & 번영



20

논의 사항

AI 에이전트가 인간보다 빠르게 해답을 찾아낼 것인가?



21

MatBasE & MaThod

한림원탁토론회 :

AI 프런티어 시리즈

토론

제4회 「AI x 신소재」 : 미래 산업소재의 혁신 설계

AI 무인실험실

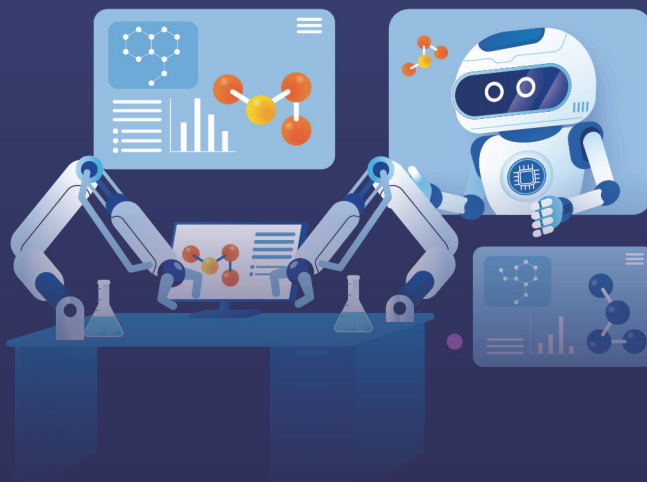
소재 AI 플랫폼

Domain 지식과 AI

서동화 KAIST 신소재공학과 교수

조기섭 국민대학교 신소재공학부 교수

김석구 LG에너지솔루션 상무



토 론 1

AI 무인실험실

서동화 KAIST 신소재공학과 교수

자율실험실은 단순한 실험 자동화 장치가 아니라, 연구 패러다임의 혁신을 이끌어낼 실험 생태계의 전환점입니다. 이를 위해서는 소재 분야 지식과 자동화 장비, AI 기술, 데이터 인프라를 연결할 **융합형 실무 인재의 체계적 양성**이 시급합니다.

자율실험실은 인공지능과 로봇, 실험 자동화, 데이터 기술을 융합해 연구의 효율성과 속도를 비약적으로 높일 수 있는 차세대 연구 인프라입니다. 그러나 이 시스템을 설계·구축해서 소재를 개발하는 연구의 핵심은 기계 장치가 아닌 연구자입니다. 현재 국내 연구 현장에서 이를 설계·구축하고 운영해서 소재 개발할 수 있는 연구 인력이 절대적으로 부족한 상황입니다. 소재 연구자는 장비 제어나 AI 모델링 경험이 부족하고, AI 전공자는 물리적 실험과 공정 이해가 미흡합니다. 그 결과, 자율실험실이 구축되어도 장비는 멈추고 의미 없는 데이터가 쌓이기만 하는 ‘비가동형 실험실’이 될 가능성이 높습니다. **장비 구축에도 사람이 필요하고, 구축 이후의 운영과 고도화에도 사람이 필요합니다.** 자율실험실 혁신의 병목은 기술이 아니라 인력입니다.

따라서 자율실험실을 국가 혁신 인프라로 발전시키기 위해서는 장비와 인재를 병행하여 육성해야 합니다. 첫째, 단기적으로는 Micro-degree 중심의 실습형 교육체계가 시급합니다. 대학, 출연연, 기업이 함께 참여하는 단기 집중 프로그램을 통해 연구자와 대학원생이 실제 자율실험실의 장비 제어, 데이터 처리, AI 실험계획 수립 등을 직접 수행해볼 수 있어야 합니다. 이러한 교육은 자율실험실 구축과 초기 운용을 지원할 현장형 인력을 신속히 확보하는 데 효과적입니다.

둘째, 중·장기적으로는 전문대학원 중심의 인재양성 체계를 구축해야 합니다. 자율실험실은 물리·화학·소재·기계·데이터과학이 융합된 복합 영역이므로, 기존의 단일 전공 교육으로는 한계가 뚜렷합니다. 실험 자동화, 로봇 제어, AI 모델링, 소재 분석을 통합적으로 교육하는 **전문대학원 프로그램**을 통해 시스템 설계부터 운영, 데이터 표준화, 알고리즘 개발까지 아우를 수 있는 연구리더형 인재를 체계적으로 육성해야 합니다.

이러한 인력양성 체계는 인프라 투자 이상의 효과를 가져올 것입니다. **자율실험실의 경쟁력은 하드웨어의 정교함이 아니라 이를 설계하고 활용할 인재의 역량에 달려 있습니다.** 따라서 자율실험실을 위한 융합형 인재가 함께 양성되었을 때 자율실험실은 단순한 자동화 시설을 넘어 **AI 기반 연구혁신의 중심 플랫폼**, 그리고 국가 과학기술 경쟁력의 핵심으로 자리매김할 것입니다.

토 론 2

소재 AI 플랫폼

조기섭 국민대학교 신소재공학부 교수

1. 소재 개발은 왜 오래 걸릴까?

신소재를 개발하려면 원소 조합, 공정 조건, 합성 환경 등 수많은 변수를 검증해야 합니다. 방대한 문헌 검토와 반복 실험이 필요한 목표 물성을 얻기까지 상당한 시행착오가 요구되며, 시간과 비용 부담이 큼니다.

2. AI가 바꾸는 연구 패러다임

AI는 기존 데이터를 학습해 물성을 예측하고, 수천 가지 조합 중 유망한 후보를 빠르게 선별합니다. 또한 이미지 분석으로 미세구조와 물성의 상관관계를 파악해 실험 방향을 정밀하게 설정할 수 있습니다. 이로써 연구 효율과 개발 속도를 크게 높일 수 있습니다.

3. 자율화 실험실과 AI 플랫폼의 시너지

자율화 실험실은 AI가 제안한 조건을 자동 수행하여 실험 효율을 극대화하고, 통합 AI 플랫폼은 데이터 관리·물성 예측·최적화 기능을 제공해 하드웨어가 없는 연구실에서도 AI 기반 연구를 가능하게 합니다. 두 인프라가 결합되면 소재 개발의 속도와 정확도가 동시에 향상됩니다.

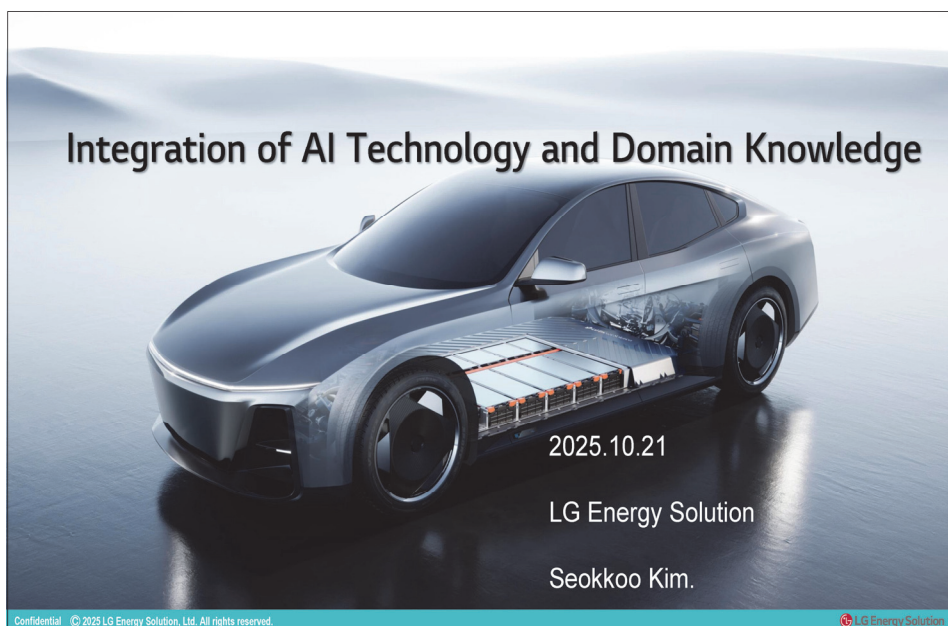
4. 남은 과제와 앞으로의 방향

AI 예측의 신뢰성, 연구 데이터의 소유권과 접근권, 연구자의 창의성 약화 가능성은 여전히 논의가 필요한 부분입니다. AI는 연구자를 대체하는 기술이 아니라, 반복적 업무를 줄여 창의적 탐구에 집중하게 하는 협력 도구로 활용되어야 합니다.

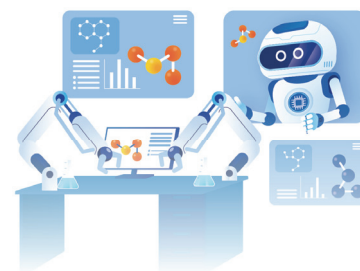
토 론 3

Domain 지식과 AI

김석구 LG에너지솔루션 상무



한림원탁토론회는...



한림원탁토론회는 국가 과학기술의 장기적인 비전과 발전전략을 세우고, 동시에 과학기술 현안문제에 대한 해결방안을 모색하기 위한 목적으로 개최되고 있는 한림원의 대표적인 정책토론 행사입니다.

지난 1996년 처음 개최된 이래 지금까지 200회 이상에 걸쳐 초·중·등 과학교육, 문·이과 통합문제, 국가발전에 미치는 기초과학 등 과학기술분야의 기본문제는 물론 정부출연연구소의 발전방안, 광우병의 진실, 방사능, 안전 방제 등 국민생활에 직접 영향을 미치는 문제에 이르기까지 광범위한 주제를 다루고 있습니다.

한림원은 과학기술 선진화에 걸림돌이 되는 각종 현안문제 중 중요도와 시급성에 따라 주제를 선정하고, 과학기술 유관기관의 최고책임자들을 발제자로 초빙하여, 한림원 석학들을 비롯해 산·학·연·정의 전문가들이 심도 깊게 토론을 진행하고 있습니다.

토론결과는 책자로 발간, 정부, 국회와 관련기관에 배포함으로써 정책 개선방안을 제시하고 정책 입안자료를 제공하여 여론 형성에 기여하도록 힘쓰고 있습니다.

한림원탁토론회 개최실적(2022년~2025년)

회차	일 자	주 제	발제자
194	2022. 1. 25.	거대한 생태계, 마이크로바이옴 연구의 미래	이세훈, 이주훈, 이성근
195	2022. 2. 14.	양자컴퓨터의 전망과 도전: 우리는 무엇을 준비해야 할까?	이진형, 김도현
196	2022. 3. 10.	오미크론, 기존 바이러스와 무엇이 다르고 어떻게 대응할 것인가?	김남중, 김재경
197	2022. 4. 29.	과학기술 주도 성장: 무엇을 해야 할 것인가?	송재용, 김원준
198	2022. 6. 2.	더 이상 자연재난은 없다: 자연-기술 복합재난에 대한 이해와 대비	홍성욱, 이호영, 이강근, 고상백
199	2022. 6. 17.	K-푸드의 가치와 비전	권대영, 채수완
200	2022. 6. 29.	벤자민 버튼의 시간, 노화의 비밀을 넘어 역노화에 도전	이승재, 강찬희
201	2022. 9. 26.	신약개발의 새로운 패러다임	김성훈, 최 선, 김규원
202	2022. 9. 29.	우리는 왜, 어떻게 우주로 가야 하는가?	문홍규, 이창진
203	2022. 10. 12.	공학과 헬스케어의 만남 - AI가 여는 100세 건강	황 희, 백점기
204	2022. 10. 21.	과학기술과 사회 정의	박범순, 정상조, 류석영, 김승섭
205	2022. 11. 18.	지속 가능한 성장과 가치 혁신을 위한 수학의 역할	박태성, 백민경, 황형주
206	2022. 12. 1.	에너지와 기후변화 위기 극복을 위한 기초과학의 역할	유석재, 하경자, 윤의준
207	2023. 3. 15.	한국 여성과학자의 노벨상 수상은 요원한가?	김소영, 김정선
208	2023. 3. 22.	기정학(技政學) 시대의 새로운 과학기술혁신정책 방향	이승주, 이 근, 권석준
209	2023. 4. 13.	우리 식량 무엇이 문제인가?	곽상수, 이상열
210	2023. 5. 24.	대체 단백질 식품과 배양육의 현재와 미래	서진호, 배호재

회차	일 자	주 제	발제자
211	2023. 6. 14.	영재교육의 내일을 생각한다	권길현, 이덕환, 이혜정
212	2023. 7. 6.	후쿠시마 오염수 처리 후 방류의 국내 영향	정용훈, 서경석, 강건욱
213	2023. 7. 12.	인구절벽 시대, 과학기술인재 확보를 위한 답을 찾아서	오현환, 엄미정
214	2023. 8. 17.	과학·영재·자사고 교장이 이야기하는 바람직한 학생 선발과 교육	허우석, 오성환, 김명환
215	2023. 10. 27.	과학기술을 통한 삶의 질 향상 시리즈 (Ⅰ) 국민 삶의 질 향상을 위한 과학기술정책의 대전환	정선양, 박상철
216	2023. 11. 9.	과학기술을 통한 삶의 질 향상 시리즈 (Ⅱ) 삶의 질 향상을 위한 데이터 기반 식단 및 의학	박용순, 정해영
217	2023. 12. 5.	과학기술을 통한 삶의 질 향상 시리즈 (Ⅲ) 삶의 질 향상을 위한 퍼스널 모빌리티	공경철, 한소원
218	2023. 12. 19.	새로운 의료서비스 혁명: 디지털 치료제	서영준, 배민철
219	2024. 1. 31.	노쇠와 근감소증	원장원, 권기선, 고홍섭
220	2024. 3. 13.	필수의료 해결을 위한 제도적 방안	박민수, 김성근, 홍윤철
221	2024. 3. 19.	코로나보다 더 큰 위협이 올 수 있다, 어떻게 할까?	송대섭, 신익철
222	2024. 3. 20.	퍼스트 무버(First Mover)로의 필수 요소 - 과학네트워킹	김형하, 이상엽, 조희용
223	2024. 5. 10.	시민, 과학자가 되다	홍성욱, 박창범, 김 준
224	2024. 5. 29.	GMO, 지속가능성을 위한 전략	하상도, 김해영
225	2024. 6. 21.	전략기술시리즈 (Ⅰ) K-반도체 위기 극복을 위한 국제 협력 전략	정은승
226	2024. 8. 21.	조류인플루엔자의 위협: 팬데믹의 전조인가?	윤철희, 김우주, 송대섭

회차	일 자	주 제	발제자
227	2024. 8. 28.	전략기술시리즈 (Ⅱ) AI로 과학하기: 새로운 패러다임	문용재, 백민경, 서재민
228	2024. 11. 18.	전략기술시리즈 (Ⅲ) K-방산의 완성: 첨단 항공기 엔진 독자 개발	심현석, 이홍철, 김재환
229	2024. 12. 3.	과학기술 정책은 얼마나 과학적인가?	이정동, 이성주
230	2024. 12. 17.	전략기술시리즈 (Ⅳ) 첨단 바이오, 난치병 치료의 게임 체인저	최강열, 신영기, 천병년
231	2024. 12. 20.	뉴럴링크: 뇌와 세상의 소통	임창환, 정재승
232	2024. 12. 24.	전략기술시리즈 (Ⅴ) 식탁 위 숨겨진 건강 비밀: 마이크로바이옴이 열어가게 미래	이주훈, 김상범, 방예지
233	2025. 2. 25.	연구성과의 가치, 어떻게 평가할 것인가?	이학연
234	2025. 4. 29.	한국 AI의 미래 시리즈(Ⅰ) AI 3대 강국을 향한 우리의 전략	이경우, 김진형
235	2025. 5. 9.	흥미로운 양자정보기술 ±20년	이승우, 안재욱, 김기환, 배준우, 이수준, 김윤호, 최정운
236	2025. 5. 15.	한국 AI의 미래 시리즈(Ⅱ) 국가 AI 특화 인재 육성과 확보방안	이상원, 신진우
237	2025. 5. 29.	한국 AI의 미래 시리즈(Ⅲ) AI+X 대전환의 양면성: 혁신, 도전, 한계	이상근, 박준기
238	2025. 7. 9.	동물실험 없는 미래, 정말 가능할까?	박준원, 임경민
239	2025. 9. 10.	AI 프런티어 시리즈(Ⅰ) 「AI x STEM 교육」: 교실에서 시작되는 미래 인재	유연주, 차대길, 권가진
240	2025. 9. 18.	AI 프런티어 시리즈(Ⅱ) 「AI x K-방산」: AI로 국방의 혁신을 이룬다	곽기호, 서영우
241	2025. 9. 29.	AI 프런티어 시리즈(Ⅲ): 양자, 물질, 우주를 다시 쓰다	박경덕, 이인호, 홍성욱

한림원탁토론회 :
AI 프런티어 시리즈

제 4 회

「AI x 신소재」: 미래 산업소재의 혁신 설계

