

Materials Project 를 활용한 신소재 개발 플랫폼 구축 및 데이터 주도 분석 연구 Platform Development and Data-Driven Analysis for Materials Discovery Using the Materials Project

Young-Jin Yu^{1, 2}, Won-Yong Shin^{†1, 2}, Jun-Chae Na², Sung-Il Yang², Ju-Hye Lee², Min-Hee Lee^{1, 2}, Yong-eun Cho^{*1, 2}, Chan Jung^{1, 2}, Seung-Jun Han^{2, 3}

¹School of Mathematics and Computing (CSE), Yonsei University, Seoul 03722, Republic of Korea

²KAILOS LAB Co. Ltd., Seoul 06349, Republic of Korea

³Department of Mechanical Engineering (ME), Kyung Hee University, Yongin 17104, Republic of Korea

Email: lucy.yu@kailoslab.com, wy.shin@yonsei.ac.kr, david@kailoslab.com, simon.yang@kailoslab.com, may.lee@kailoslab.com, chloe@kailoslab.com, kevin@kailoslab.com, chann.jung@kailoslab.com, hansj2k@khu.ac.kr

요 약

본 논문은 인공지능과 계산과학의 발전에 따라 변화하는 신소재 개발 방식의 흐름 속에서, 계산 기반 소재 데이터 플랫폼인 Materials Project 의 데이터 구성과 활용 가능성을 분석한다. 해당 플랫폼은 약 15 만 건 이상의 시뮬레이션 기반 물성 데이터를 제공하며, 밴드갭, 형성에너지, 결정 구조 등의 특성을 포함한다. 본 논문은 플랫폼의 데이터 제공 범위와 이를 활용한 소재 필터링, 기계학습용 데이터 구성 등의 가능성을 중심으로 정리하였으며, 향후 실험 기반 데이터와의 통합을 통한 인공지능 기반 신뢰도 높은 소재 발굴/추천 시스템의 확장 방향성을 제시한다.

I. 서 론

본 논문에서는 인공지능 (AI) 기술과 계산 과학의 발전에 따라 신소재 개발 방식이 시뮬레이션 기반 고속 계산과 데이터 기반 예측 중심으로 전환되고 있는 흐름을 배경으로, 전통적인 실험 기반 접근의 한계를 극복하고자 하는 연구 방향을 제시한다.

II. 본론

미국 Lawrence Berkeley Laboratory 에서 운영하는 Materials Project [1], [2]는 전 세계 연구자들에게 널리 활용되는 고신뢰도 계산 데이터를 제공하는 대표적인 소재 데이터 플랫폼으로써, 약 15 만 건 이상의 무기 소재 데이터를 기반으로 밴드갭, 형성에너지, 밀도, 열역학적 안정성 등 다양한 물리적 특성을 제공한다 (그림 1 참고). 이 데이터는 공개적으로 활용 가능하며, 소재 후보군 선별, 전자 소자 특성 평가, 학습용 입력값 생성 등 여러 분야에서 응용되고 있다. 특히 밴드갭 등 특정 조건을 기준으로 한 소재 필터링은 기초연구와 산업현장에서 모두 유용하게 활용된다. 이러한 필터링은 소재 개발의 실용성을 높이는 핵심 과정이다. 한편, 현재 제공되는 데이터는 시뮬레이션 기반이며 실제 실험 데이터는 포함되지 않기에, 향후 실험 기반 데이터와의 통합이 이뤄질 경우 AI 기반 소재 조합 발굴/추천 시스템의 신뢰도와 실용성이 크게 향상될 것으로 기대된다.

III. 결론

본 논문에서는 Materials Project 의 데이터 제공 구조와 신소재 개발에서의 활용 가능성을 분석하였다. 이 플랫폼은 계산 기반 물성 정보를 바탕으로 신소재 탐색 및 예측 시스템 개발에 핵심적인 기반을 제공하고 있으며, 향후 실험 데이터와의 융합을 통해 보다 정밀하고 현실 적용 가능한 AI 기반 신소재 설계 시스템으로 확장될 수 있을 것이다.

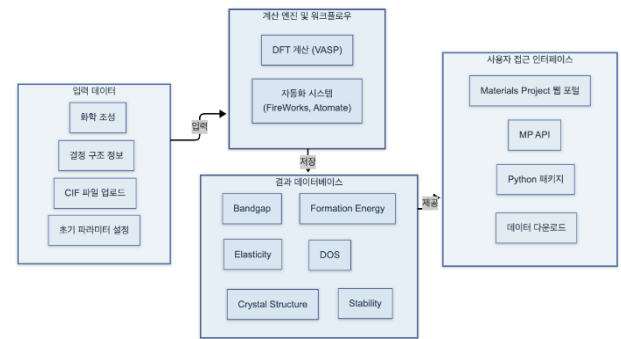


그림 1. Materials Project 구성 개요

ACKNOWLEDGMENT

This research was supported by SMEs Technology Innovation Development Program through the Technology Innovation and Promotion Agency (TIPA), funded by Ministry of SMEs and Startups (RS-2024-00511332) and by the National Research Foundation of Korea (NRF) grant funded by the Korea government (MSIT) (No. RS-2021-NR059723, No. RS-2023-00220762).

참 고 문 헌

- [1] A. Jain *et al.*, "The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation," *APL Materials*, 2013.
- [2] K. Persson, "Materials data infrastructure and materials design: The Materials Project," *MRS Bulletin*, 2016.