

과제번호
RS-2023-00278594

데이터 기반 미래소재(HUB구축) 신규사업 기획 연구

(Planning of data-driven future material research project :
including R&D HUB)

연구기관 : (주)로운인사이트
연구책임자 : 이흥권

2024. 03. 26.

과 학 기 술 정 보 통 신 부

안 내 문

본 연구보고서에 기재된 내용들은 연구책임자의
개인적 견해이며 과학기술정보통신부의 공식견
해가 아님을 알려드립니다.

과학기술정보통신부 장관 이 종 호

제 출 문

과 학 기 술 정 보 통 신 부 장 관 귀하

본 보고서를 “ 데이터 기반 미래소재(HUB구축) 신규사업 기획 연구 ”의
최종보고서로 제출합니다.

2024 . 3 . 26 .

연구기관명 : 로운인사이트

연구책임자 : 이흥권

연 구 원 : 최일엽

연 구 원 : 박소희

연 구 원 : 김종수

연 구 원 : 김현수

연 구 원 : 신주영

연 구 원 : 조예나

연 구 원 : 황지영

연 구 원 : 윤세찬

연 구 원 : 이시영

요 약 문

과제번호	RS-2023-00278594		연구기간	2023 년 7 월 1 일 ~ 2024 년 1 월 31 일	
과제명	(한글) 데이터 기반 미래소재(HUB구축) 신규 사업기획 연구 (영문) Planning of data-driven future material research project : including R&D HUB				
연구책임자 (주관연구기관)	이흥권	참여 연구원수	총 10명	연구비	50,000천원
요약					
- (배경) 소재는 부품 및 제품의 성능과 부가가치를 좌우하는 핵심 요소로서 최근 전 세계적으로도 소재 원천기술 확보 및 자원 보호주의적 입장이 점점 격화되고 있음 - (필요성) 신소재 탐색·설계부터 상용화까지의 단계를 가속화하기 위해서는 ‘소재-시스템’ 사이의 간극 해소가 필수적임 - (사업 목표) 계산과학, AI, 실험로봇 등을 기반으로 소재개발 전주기 데이터를 조속히 확보하여 소재탐색 및 시스템·소자 최적화를 가속화하고 원천소재의 사업화 가능성을 극대화 함 - (주요 연구 내용) 계산과학, AI, 실험로봇 등을 통한 원천소재 발굴 및 공정조합설계 기술 개발, 원천소재의 시스템·소자 제작 및 최적화 등 - (연구 체계) ①소재 설계·합성-②분석·물성평가-③신소재 공정성 검증-④시스템·소자 설계·제조(공정)-⑤시스템·소자 성능평가까지 전주기 데이터를 연계 및 활용한 원천소재 개발 - (추진전략) ①선기획+2+3(2단계) 기술개발 추진을 통한 체계적 지원, ②연구단의 자체적인 소재-시스템(소자) 전주기 데이터 체계 및 수집·활용 계획 수립을 통해 고품질 데이터베이스 구축, ③기존 시스템과의 연계를 통한 데이터 기반 소재연구의 노하우 축적 및 후속연구로의 연구 확장에 기여, ④산업계 참여를 통한 연구개발 성과의 사업화 가능성 제고 등					
비공개 사유			비공개 기간		

목차

1. 사업 개요	1
1.1. 사업 추진배경 및 필요성	1
1.1.1. 사업 추진 배경	1
1.1.2. 사업 추진의 필요성 및 시급성	4
1.2. 사업 추진근거	9
1.2.1. 국정과제	9
1.2.2. 필수계획	10
1.2.3. 부처계획	11
1.3. 사업기획 추진체계 및 경과	18
1.3.1. 사업기획 추진체계	18
1.3.2. 사업기획 추진경과	19
1.3.3. 사업기획 추진절차	21
1.4. 사업 정의 및 범위(안)	22
2. 대내외 환경분석	24
2.1. 정책적 환경분석	24
2.1.1. 국내 동향	24
2.1.2. 국외 동향	27
2.2. 소재데이터 및 AI 기반 연구동향 분석	34

2.2.1. 국내 동향	34
2.2.2. 국외 동향	39
2.3. 데이터 기반 소재연구 성공사례 분석	74
2.3.1. 국내 동향	74
2.3.2. 국외 동향	78
2.4. 종합분석 및 시사점	94
3. 유사사업·과제 현황 및 중복성 검토	96
3.1. 유사사업·과제 현황분석	96
3.2. 유사사업·과제와의 차별성 및 연계방안	99
4. 사업 추진계획(안)	100
4.1. 사업 추진 방향 및 추진 전략(안)	100
4.1.1. 사업 추진방식에 대한 검토	100
4.1.2. 전주기 데이터 연계·활용 기반 소재 연구 방향	106
4.1.3. 사업추진의 기본방향 및 전략	109
4.2. 사업의 비전 및 목표(안)	111
4.3. 상세 사업설계(안)	112
4.3.1. 사업개요	112
4.3.2. 주요 내용 및 추진절차	117
4.3.3. 추진체계	128

4.3.4. 소요예산(안)	128
4.3.5. 기대효과	129
4.3.6. 기업 참여 방식	130
4.3.7. 소재연구데이터 품질 관리계획	132
4.3.8. 과제 종료 후 유지관리 계획	133
4.3.9. 분산된 소재 관련 연구데이터 등의 효과적 연계 방안	133
4.4. 결론 및 정책 제언	135
[부록]	139
1. 소재 HUB 범위 및 구성 방향 검토	139
2. 소재 HUB 예시	144
3. 소재분류체계(안)	146
4. 기술수요조사서 양식	151
5. 선기획 일정(안)	159
6. 제안서 핵심목표 및 예상 성과물 예시	161
7. 국내 소재분야 계산과학 및 데이터과학 인력 현황 분석	171
8. 해외 주요 데이터베이스 목록	174

[표 목차]

< 표 1 > 3대 분야 8대 선도 프로젝트	13
< 표 2 > 소재 계층 이니셔티브(MGI) 주요 내용	28
< 표 3 > 미국 정부 지원 소재 연구 프로그램	29
< 표 4 > FAIR 원칙	40
< 표 5 > NIST 주요 데이터베이스	42
< 표 6 > NASA의 소재 관련 2040 비전 로드맵 ·	48
< 표 7 > BioChemGRAPH 프로젝트의 데이터베이스	53
< 표 8 > NOMAD Lab의 연혁	56
< 표 9 > 마켓 플레이스 플랫폼이 시장 참여자에게 제공하는 기회	57
< 표 10 > 새로운 소재 연구 패러다임 Material 4.0 ·	63
< 표 11 > 이노베이션 허브구축 지원사업의 프로 젝트 및 주관기관	68
< 표 12 > 연구주제(비경쟁형R&D) 도출 방안 ·	100
< 표 13 > 경쟁형 R&D와 비경쟁형 R&D 방식의 동 사업 적용(안) 비교	101
< 표 14 > 선기획과 예비연구의 주요 내용 비교 ·	103
< 표 15 > 연구개발계획서 주요 항목	117
< 표 16 > 지원 대상 과제 선정 평가항목(안) ·	121

< 표 17 >	연구개발과제평가단 평가위원 제척기준 ..	122
< 표 18 >	선기획연구 추진 목적 및 주요 내용 ..	123
< 표 19 >	선기획연구 수행결과 평가항목(안) ...	124
< 표 20 >	단계평가 평가항목(안)	126
< 표 21 >	최종평가 평가항목(안)	127
< 표 22 >	기업멤버십 신청요건(안)	131

[그림 목차]

< 그림 1 >	소재 기술개발 방식 변화를 통한 원천기술 개발 기간 단축	3
< 그림 2 >	전통적 소재개발과 新 연구방법론의 차이점	5
< 그림 3 >	MGI(2021) 패러다임	7
< 그림 4 >	소재연구 변화도 및 동 사업(소재허브)의 특성 ·	8
< 그림 5 >	소재 HUB 개념	22
< 그림 6 >	데이터 기반 소재 허브 연구단 추진체계(소재- 시스템 선순환 체계)	23
< 그림 7 >	MGI 인포그래픽	27
< 그림 8 >	The Materials Project 개요	31
< 그림 9 >	Materials Innovation Platforms	31
< 그림 10 >	Horizon Europe 프로그램 구성	33

< 그림 11 > 소재 연구데이터 플랫폼 서비스 개념도	35
< 그림 12 > AI 기반 초임계 소재 과제 개념도	36
< 그림 13 > Material Data Facility	44
< 그림 14 > Material Data Facility 서비스 개요	44
< 그림 15 > DL Hub 개요	45
< 그림 16 > 특성화된 데이터베이스에서 제공되는 서비스 예시	46
< 그림 17 > 소재 정보 시스템에서의 Materials Commons	47
< 그림 18 > MGI 기반의 교육 커리큘럼 예시	49
< 그림 19 > ICSD 등록 정보	51
< 그림 20 > ICSD 특징	52
< 그림 21 > CSD의 등록 정보	52
< 그림 22 > Materials Cloud 개요	54
< 그림 23 > NOMAD 데이터베이스 개요	55
< 그림 24 > NOMAD AI ToolKit	55
< 그림 25 > Materials Modeling MarketPlace 프로젝트 및 플랫폼 개요	58
< 그림 26 > SimDOME 프로젝트 EMMO 개요	59
< 그림 27 > OpenModel 프로젝트 컨소시움	60
< 그림 28 > ReaxPro 프로젝트 개요	60
< 그림 29 > 온톨로지 에코시스템 개요	61
< 그림 30 > 온톨로지 도구(Ontopanel) 구조	62

< 그림 31 > MITS의 데이터베이스를 활용하는 센터들	64
< 그림 32 > DICE 주요 기능	66
< 그림 33 > 중국의 소재 분야 투자 추이	71
< 그림 34 > NMDMS 개요 및 프로세스	72
< 그림 35 > AlphaMat 개요	73
< 그림 36 > 전남대 연구팀의 연구성과가 게재된 영국 왕립 학회지 에너지 & 환경 사이언스 11월호 표지 ·	74
< 그림 37 > 카이탈 금 나노 입자의 규칙적 조립 구조 제작에 대한 모식도	76
< 그림 38 > 카이탈 금 나노 입자의 규칙적 조립 구조의 암시야상 현미경 사진과 실제 소자의 사진	76
< 그림 39 > 타이어 컴파운드 분자구조 개념도	77
< 그림 40 > 소재탐색을 위한 그래프 네트워크 활용	91
< 그림 41 > A-Lab을 사용한 자율적인 소재 발견	92
< 그림 42 > MLOps(Machine Learning & Operations) 개념 ·	93
< 그림 43 > 데이터 기반 소재 허브 연구단 추진체계(소재- 시스템 선순환 체계)	106
< 그림 44 > 소재 HUB 예시	115

1. 사업 개요

1.1. 사업 추진배경 및 필요성

1.1.1. 사업 추진 배경

□ (新소재 경쟁 격화) 소재는 부품 및 제품의 성능과 부가가치를 좌우하는 핵심요소로 특히 첨단산업의 경우 소재혁신을 통해 산업의 주도권 선점이 가능하여 전 세계적으로 소재 원천기술 확보와 동시에 수출 규제 등 기술 경쟁이 가속화되고 있음

○ 소재·부품·장비는 산업에 필수적인 ‘보이지 않는 기술 속의 기술’로, 제조업의 회복력(Resilience), 공급망 안보와 미래경쟁력 결정하고 특히 소재는 산업 밸류체인의 첫 단계에 투입되어 제품의 기능과 품질 좌우

○ 부품 및 완제품의 기본 구성 물질이 되는 소재는 개발을 위한 연구가 순차적으로 진행되어야하기 때문에 오랜 기간과 많은 자원이 필요하지만 개발에 성공할 경우 여러 산업에 다양한 영향을 미칠 수 있는 기반 기술*에 해당

* 첨단산업에서 소재 기여도는 IT에서 70%, 에너지에서 60%, 바이오에서 50% 등으로 매우 높은 수준임('16, The Advanced Materials Revolution)

○ 반도체, 디스플레이, 배터리 등 활용도가 높은 첨단 소재 분야에서는 기술 경쟁이 더욱 가속화 되고 있으며 전 세계적으로 기술패권을 선점하기 위하여 소재의 수출규제*, 압박정책, 핵심소재의 국산화율 제고 등 소재의 무기화 및 보호주의적 행태가 팽배해져 가고 있음.

* (中) 희토류 수출 중단 위협, 요소수 수출 제한, (日) 반도체 핵심 소재 3개 품목 수출 규제 강화 등

□ (소재 원천기술 확보를 위한 노력 필요) 미·중 무역갈등, 신보호 무역주의 대두 등 글로벌 공급망 충격에 대응하고 우리나라가 소재 원천기술의 주도권을 선점하기 위해서는 기존의 핵심 원료를 대체할 수 있는 신소재·대체 소재 확보가 중요

- 공급망, 신산업, 외교·안보 등 관점에서 기술 주도권 확보를 위한 국가전략기술 육성을 위해 그 기반이 되는 핵심 소재의 안정적 확보가 중요하며 재자원화, 저감기술 확대 등을 통해 한정적 자원을 효율적으로 활용할 국내 기술 개발·확보가 필요함
- 소재·부품·장비는 오랜 시간 축적된 기술력을 바탕으로 경쟁력을 유지하며, 특히 소재는 최초 개발에서 사업화까지의 주기가 매우 길 뿐만 아니라 가격변동이나 공급 차질이 있으므로 공급망 충격 대비를 위한 대체재 개발이 필수적임
- 또한, 미-중 패권 경쟁 등 신냉전 시대 진입에 따라 첨단소재가 국가안보 경제 과학기술 주권 확보를 위한 핵심 전략 기술로 부상함
- 미래소재는 기존 소재의 분류와 한계를 뛰어넘을 수 있는 신소재를 의미하며, 지금까지 구현이 불가능했던 부품 혹은 시스템을 실현함으로써 미래 신산업과 일자리 창출의 씨앗이 되는 소재를 의미함
- ※ 우주항공, 심해저 개발 등 미래 유망산업 육성에는 극한 소재 개발이 필수적으로 이뤄져야 하며 미래 유망산업이 부상할수록 기술 경쟁력 유지와 시장 선점을 위해 극한 환경을 극복해 사용할 수 있는 또 다른 소재 개발 필요성이 높아짐(항공기 엔진구조재, 수소·LNG 화물창 단열재, 가스터빈 블레이드 등)

□ (기존 개발방식의 한계 대두) 신소재 및 대체 소재 확보를 위해서는 소재 원천기술 개발이 필수적이나 기존의 소재 개발방식은 많은 비용과 시간의 투자가 필요하므로 연구 기간 단축 등 기존 개발방식의 혁신이 필요

- (전통적 개발 방식의 한계) 소재 개발은 장기간에 걸쳐 경험 및 시행착오에 의해 제품 개발이 이루어지지만 제품의 수명주기가 짧아지고, 개발 속도 경쟁이 치열해짐에 따라 주관적 경험과 암묵지에 기초한 전통적 개발방식의 한계가 부각 되고 있음
- 특히, 소재 개발은 공정(제조, 합성)-미세구조-물성 관계를 파악하고 최적화하는 일련의 과정으로 시행착오에 의한 반복적, 경험적 연구에 의존하기 때문에 시간과 비용이 많이 소요됨

- (연구기간 단축 필요) 이처럼 소재 연구는 장기간 투자가 필요하지만 승자 독식의 성격이 커 연구 기간 단축을 통한 원천기술 선점이 중요
- 소재분야는 원천기술 개발기간 단축이 기술 선점을 위한 필수조건으로 전통적 개발방식의 한계를 넘어서는 새로운 연구개발 방법론의 필요성이 대두됨



< 그림 1 > 소재 기술개발 방식 변화를 통한 원천기술 개발기간 단축

※ 출처 : 과기정통부(2019). 2019년도 국가연구개발사업 자체평가 보고서

1.1.2. 사업 추진의 필요성 및 시급성

- (새로운 소재연구 패러다임 Material 4.0의 부상) 최근 사이버 물리적 공간 및 소재 정보학 도구를 활용하여 새로운 소재의 발견, 혁신 및 검증을 가속화할 디지털 소재 혁명인 Material 4.0이 부상
 - 기존의 지식 기반(knowledge-based)에서 AI 등을 활용한 연결성(connectivity)을 중심으로 소재개발의 패러다임 변화 중
 - 디지털 데이터와 물리적 데이터를 연결하여 새로운 소재의 예측, 분류 및 성능 제어를 극대화할 수 있을 것으로 기대
 - (소재 개발 방식 변화를 통한 초격차 확보) 미국, 유럽, 일본 등 해외 소재 연구 선진국에서는 MGI 전략 수립(美), 新원소전략(日) 등 새로운 연구개발 방법을 활용하기 위한 전략을 수립하고 있으며 신규 연구 기반 조성에 모든 역량 집중
 - (新연구방법론 대두) 4차 산업혁명 및 기술 개발로 인한 기존 전통 개발방식의 한계를 극복할 수 있는 혁신적 개발방식이 대두되며 ICT(SW 및 HW) 기술을 활용한 소재 정보기술, 계산재료과학, 조합실험법을 통틀어 일컫는 기술이 등장
- ※ 출처 : KISTEP(2022). 소재 신(新)연구방법론
- (계산재료과학) 컴퓨터를 이용하여 소재 정보를 바탕으로 물성을 빠르게 예측하거나 소재 물성으로부터 정보(구조·조성)를 예측하는 역설계 기술로 시행착오를 최소화하는 개발 기술
 - (조합실험법) 단순 자동화(automation)를 넘어 데이터·AI·로봇공학 등의 융합을 통해 연구자의 개입을 최소화하여 신소재 탐색·설계 → 합성 → 결과 분석·환류까지 자율적(autonomous) 수행이 가능한 스마트 재료연구실 기술

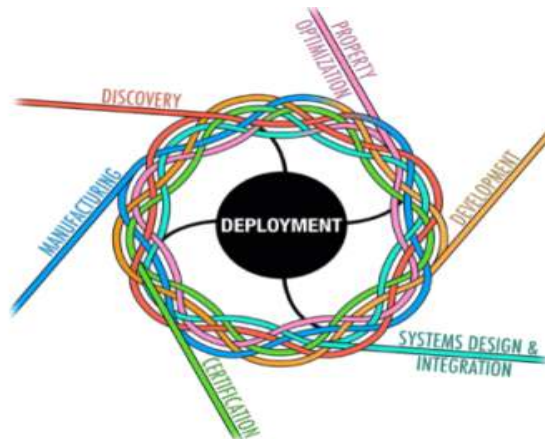
	As-Is		To-Be
데이터	암묵지(暗黙知)	⇒	객관적
개발방식	실험반복	⇒	데이터 기반 물성 예측
특징	선형(Linear) 모델	⇒	선순환(Circular) 모델
Cost	장시간·비용多	⇒	개발 Cycle 단축

< 그림 2 > 전통적 소재개발과 新 연구방법론의 차이점

- (소재강국의 원천기술 초격차 확보 전략) 미국, 유럽, 일본 등의 소재 강국에서는 수집된 양질의 디지털 데이터를 기반으로 계산과학 등 신 연구방법론을 이용한 소재개발 방식으로 빠르게 전환하고 있으며 이를 통해 소재 원천기술 超격차 확보 중
- (미국) 구체적 프로젝트 중심 소재개발, 계산과학 방식 데이터 수집. 소재개발의 디지털화를 통한 소재개발 기간·비용을 최소 2배를 단축시키기 위한 MGI(Material Genome Initiative) 전략 수립('11~, 2.5억달러)
- (유럽) 가장 큰 규모의 구조정보 데이터베이스를 구축하고 주기적으로 업데이트 중이며 독일은 FIZ Karlsruhe 기관 주도하에 세계 최대 규모의 무기결정구조 데이터베이스 ICSD(Inorganic Crystal Structure Database) 구축
- (일본) 데이터 관련 제도 확충 선행, 계산과학과 실험데이터를 중시하며 잃어버린 10년을 회복하고 자국의 강점인 소재부품의 글로벌 경쟁력을 강화하기 위한 「新원소전략」 등 국가전략 수립('12~, 700억엔)
- (영국) 연구자 중심 프로젝트, 계산과학 방식으로 데이터 공개·공유, 데이터베이스 구축 등 디지털 기반의 소재개발 혁신을 위한 「Horizon 2020」 전략 수립('14~, 491만 유로)
- (우리나라 소재 연구 현황) 우리나라도 소재 강국 실현을 위해 '15년부터 '미래소재디스커버리사업'을 수행하고 있고 '20년부터 소재 연구데이터 플랫폼을 구축 중이나, 현재 탐색-설계에 집중되어 있어 공정 간 연계성 강화, 양질의 데이터 확보 등의 과제를 안고 있음

- (R&D전략) 12대 국가전략기술('22.10)과 국가첨단산업 육성전략('23.3)을 발표하며, 반도체, 디스플레이, 미래차 등 국가첨단산업의 기술확보를 위한 의지를 표명
- (미래소재 확보 정책) 국가 외교 및 안보에 영향을 미치는 기술 패권 시대가 도래하여 국가적 역량을 결집할 수 있는 12대 국가전략기술 별 미래소재 확보의 필요성이 대두. 이에, 우리나라의 우수한 나노소재 연구성과와 탁월한 ICT 인프라를 활용할 수 있는 100대 미래소재 발굴
 - ※ 출처 : 과기정통부 보도자료(2023). 대한민국을 먹여 살릴 100대 미래소재 발굴
- (미래소재디스커버리 사업) 미래소재 확보를 통한 신산업 육성 및 소재 강국 실현을 위해 신 연구방법론을 활용하여 기존에 존재하지 않는 새로운 물성과 기능을 구현하는 신소재 개발을 추진하였음
 - (현황) 기존의 소재 연구개발과 달리 계산과학 등 새로운 연구방법을 활용하도록 하여 소재 개발기간 단축 및 연구개발 비용 감축. 4대 중점 지원분야*를 중심으로 계산과학 등 신 연구방법론을 활용하여 혁신적 물성의 신소재 개발 및 미래소재 원천기술 확보
 - * 극한물성 구조·환경 소재, 양자 알케미 조성제어 소재, 스케일링 한계극복 ICT 소재, 인간오감 증강소재
 - (한계) 데이터 활용을 통한 미래소재 개발의 세 단계('탐색·설계'-'측정·분석'-'공정설계') 중 '탐색·설계' 과정에 연구가 집중되어 이루어져 있음
- (K-MDS) 계산과학(시뮬레이션)·빅데이터·인공지능을 연계한 연구개발이 신소재 연구개발 효율화 및 새로운 부가가치 창출을 위한 혁신적 연구방법론으로 급부상하며 우리나라도 '20년부터 국가 소재 연구데이터 공유와 활용을 위한 플랫폼(K-MDS) 구축
 - (현황) `20년 에너지·환경, 스마트·IT, 구조·안전 3대 분야를 중심으로 플랫폼 1단계 구축에 착수 및 소재 연구개발을 위한 데이터 표준화 및 다운로드 등 K-MDS 서비스 활용을 위한 H/W 구축은 완료되어 초기 서비스 제공

- (한계) 연구자와 수요자 활용을 위한 서비스 개발이 필요하며 축적되는 데이터의 양 부족으로 공백 영역 발생, 연구 공정끼리의 연계성 부족 등의 문제점을 가지고 있음
- (전주기 통합 네트워크 구축 필요) 기존 사업 및 플랫폼의 한계를 극복하고 소재 원천 분야 기술 격차 감소를 위해서는 전주기 공정 간 연계성을 강화할 수 있는 통합 네트워크 구축이 필요
 - (공정 간 연계 필요) MGI(2021)에서는 시스템을 사용할 수 있도록 만드는 모든 활동(deployment)이 연계되어야 함을 강조하고 있으며 우리나라도 기존 사업의 연구 결과 활용 및 K-MDS 활용 확대를 위해 전주기 공정 간 연계성을 강화할 필요가 있음
 - (HUB를 통한 연계 강화) 소재별로 AI·SW 등을 포함하는 소재 연구, ‘탐색·설계’-‘측정·분석’-‘공정설계’ 등의 각 연구진들로 구성된 HUB를 구축하여 공정별 연계를 강화함
 - ※ HUB는 특정 소재의 이슈 해결을 위해 관련 기존 데이터, 공백분야와 연관된 계산과학·공정·실험 등의 데이터를 수집·생성·활용
- ‘탐색·설계’-‘측정·분석’-‘공정설계’ 각 사업에서 축적한 노하우를 기반으로, 데이터 활용 전주기 순환형 소재개발 생태계 구축

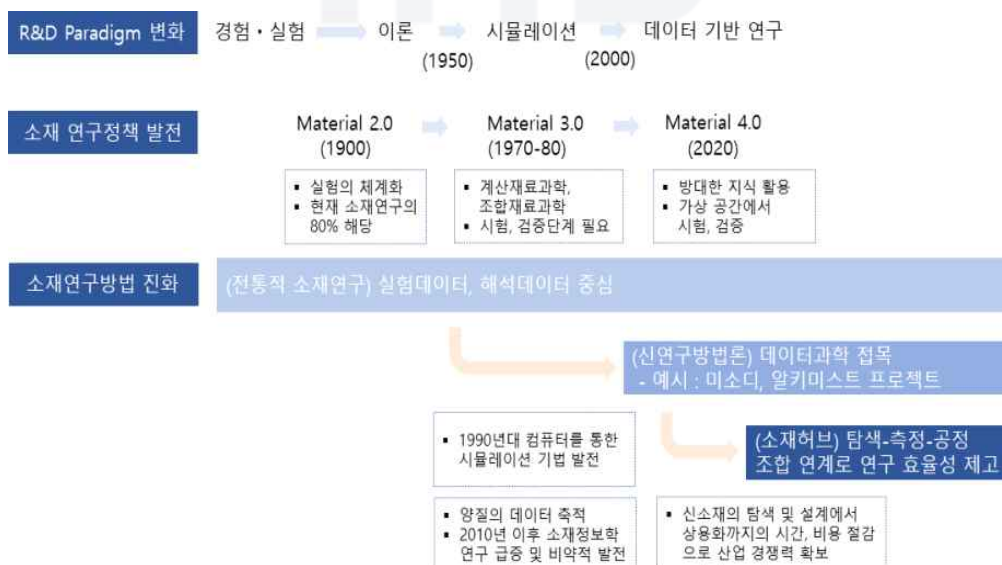


< 그림 3 > MGI(2021) 패러다임

※ 출처 : National Science and Technology Council. (2021). Materials Genome Initiative Strategic Plan

□ ('소재-시스템' 사이의 간극 해소) 개발 신소재의 상용화 가속화를 위해서는 전주기 데이터 기반 연구를 통한 '소재-시스템' 사이의 death valley 극복 필요

- (필요성) 실험실 수준에서 개발된 소재가 우수한 성능을 보이더라도 시스템/소자 수준에서는 전혀 다른 성능을 보이는 경우가 많아 개발 소재의 상용화까지 진행되기 위해서는 '소재-시스템' 사이의 간극 해소가 필수적으로 요구됨
- (한계) 현재 국내 소재 R&D는 대부분 '소재탐색' 연구와 '시스템검증' 연구를 별개로 진행하고 있어 소재개발 전주기 데이터 확보에 어려움이 존재함
- (HUB 연구단 추진 방향) ①소재 설계·합성-②분석·물성평가-③신소재 공정성 검증-④시스템·소자 설계·제조(공정)-⑤시스템·소자 성능평가 전주기의 데이터를 확보하고 AI 기술과 접목하여 소재개발 각 단계별 상관관계 유추를 통해 최적의 시스템·소자 성능을 갖도록 하는 원천소재 확보 가능



(출처) 이하 자료를 참고하여 연구진 재구성

- A. Agrawal et al. *APL Material*, 4 (2016) 053208, R. Jose et al. *Applied material today*, 10 (2018) 127~132.

< 그림 4 > 소재연구 변화도 및 동 사업(소재허브)의 특성

1.2. 사업 추진근거

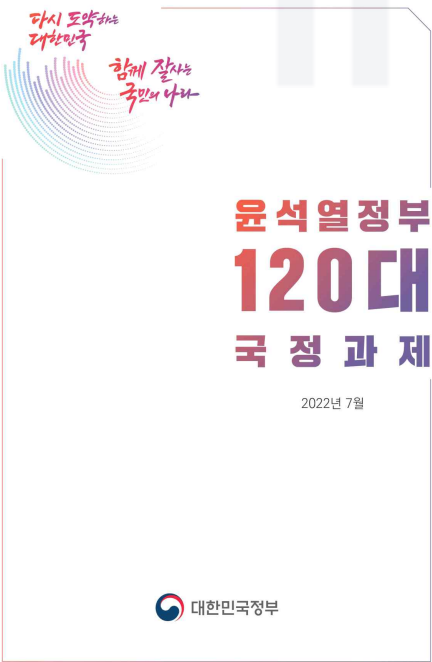
1.2.1. 국정과제

□ 윤석열 정부 120대 국정과제(2022)

○ ‘다시 도약하는 대한민국, 함께 잘 사는 국민의 나라’를 비전으로 4대 기본부문(정치·행정, 경제, 사회, 외교·안보)+미래+지방시대 등 6대 국정목표 설정

－ 이 중 ‘(국정목표 4) 자율과 창의로 만드는 담대한 미래’에 속하는 ‘(과제 74) 국가혁신을 위한 과학기술시스템 재설계’의 세부추진 내용으로 디지털 연구환경 조성 계획* 마련

* (연구자 지원) 연구자의 창의적·혁신적 연구성과 창출을 위해 국가 연구 데이터 플랫폼 구축, 대학·연구기관의 디지털 전환 등 디지털 연구환경 조성



다시 도약하는
대한민국
함께 잘 사는
국민의 나라

**윤석열정부
120대
국정과제**

2022년 7월

대한민국정부

74 국가혁신을 위한 과학기술 시스템 재설계 (과거정부)

□ 과제목표

- 국가 R&D 100조원 시대를 맞이하여 정부와 민간의 역량을 모아 과학기술 강국으로 도약하기 위한 국가 과학기술 시스템 재설계 추진

□ 주요내용

- (과학기술 역량 강화) 과학기술 기반의 혁신으로 경제대국·강한안보·행복 국가를 달성 할 수 있도록 과학기술 정책 대관환
- (탄소중립·고령화 등 국가가 당면한 문제를 해결하기 위한 임무지향적 과학기술 체계 마련, 민간·지방 주도로 전환, 산·학·연 융합·협력 강화
- 국가과학기술자문회의 개편 등을 통한 민간참여 및 부서 협업·조정 강화
- (질적 성장 R&D) R&D 예산을 정부 총지출의 5% 수준에서 유지하고, 중장기 투자원천 수립 및 통합적·전략적 R&D 예산 배분·조정체계 마련
- 기술환경변화에 적시대응이 가능한 신속·유연 예산 추진 R&D 예산 기준 1,000억원으로 상향, 활용성 높은 성과창출을 위한 평가제도 개선 및 성과 활용 지원체계 마련
- (민간 과학기술 역량 강화) 세제 지원 확대 등 다양한 민간 R&D 지원 강화, 기술영양평가 등을 통해 선제적 규제 이슈를 발굴·대응
- 민간의 성장 활력 제고를 위해 기업의 혁신역량별 맞춤형·패커지형 R&D를 지원
- (연구자 지원) 연구자의 창의적·혁신적 연구성과 창출을 위해 국가 연구 데이터 플랫폼 구축, 대학·연구기관의 디지털 전환 등 디지털 연구환경 조성
- 연구행정시스템 고도화, 연구행정 제도개선, 연구자 권리제고를 통한 연구자 지원 강화, 국제공동연구 및 장비공동활용 등 공동·협업연구 활성화

□ 기대효과

- 과학기술 시스템 재설계를 통해 과학기술 5대 강국 달성 및 경제성장·강한안보·국민행복에 기여

- 127 -

1.2.2. 필수계획

□ 제5차 과학기술기본계획('23~'27)(관계부처 합동, 2022)

- 과학기술기본법 제7조에 따른 과학기술 분야 최상위계획
- 윤석열 정부의 과학기술 국정방향을 반영한 과학기술 정책의 기본 방향과 과제를 향후 5년간 40여개 부·처·청·위원회와 함께 이행하기 위한 계획
- ‘(과제 3-5-2) 전환적 변화에 대응하는 미래 공급망 예측·선점 역량 확보’를 위해 ‘12대 전략기술별 소재기술 난제, 한계돌파형 초격차 소재, 극한소재 등 지원’ 및 ‘빅데이터·AI 등 디지털 연구개발 방법론을 접목하여 연구기간을 단축하고 비용을 절감, 혁신적 연구를 촉진’ 계획 마련

공개 <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse; margin-top: 10px;"> <tr> <td style="width: 30%;">의안번호</td> <td style="width: 30%;">제 1 호</td> <td rowspan="2" style="width: 40%; text-align: center; vertical-align: middle;">심 의 사 항</td> </tr> <tr> <td>심 의 연 월 일</td> <td>2022. 12. 14. (제 1 회)</td> </tr> </table> 제5차 과학기술기본계획('23~'27)(안) 국가과학기술자문회의 심의회의 <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse; margin-top: 10px;"> <tr> <td style="width: 15%; text-align: center; vertical-align: middle;">제출자</td> <td style="width: 15%;">국무조정실장</td> <td style="width: 15%;">방문규</td> <td style="width: 15%;">국토교통부장관</td> <td style="width: 15%;">원희룡</td> </tr> <tr> <td></td> <td>기획재정부장관</td> <td>추경호</td> <td>해양수산부장관</td> <td>조승환</td> </tr> <tr> <td></td> <td>교육부장관</td> <td>이주호</td> <td>중소벤처기업부장관</td> <td>이영</td> </tr> <tr> <td></td> <td>과학기술정보통신부장관</td> <td>이광호</td> <td>개인정보보호위원장</td> <td>고학수</td> </tr> <tr> <td></td> <td>법무부장관</td> <td>박진</td> <td>원자력안전위원장</td> <td>유국희</td> </tr> <tr> <td></td> <td>행정안전부장관</td> <td>이종심</td> <td>식품의약품안전처장</td> <td>오유경</td> </tr> <tr> <td></td> <td>문화체육관광부장관</td> <td>이상민</td> <td>경관</td> <td>임동환</td> </tr> <tr> <td></td> <td>농림축산식품부장관</td> <td>박보균</td> <td>농촌진흥청장</td> <td>윤희근</td> </tr> <tr> <td></td> <td>산업통상자원부장관</td> <td>정황근</td> <td>산림청장</td> <td>조재호</td> </tr> <tr> <td></td> <td>보건복지부장관</td> <td>이정양</td> <td>특허청장</td> <td>남성현</td> </tr> <tr> <td></td> <td>환경부장관</td> <td>조규홍</td> <td>질병관리청장</td> <td>이인실</td> </tr> <tr> <td></td> <td>고용노동부장관</td> <td>이정식</td> <td>배양정</td> <td>윤희동</td> </tr> <tr> <td>제출연월일</td> <td colspan="4" style="text-align: center;">2022. 12. 14.</td> </tr> </table>	의안번호	제 1 호	심 의 사 항	심 의 연 월 일	2022. 12. 14. (제 1 회)	제출자	국무조정실장	방문규	국토교통부장관	원희룡		기획재정부장관	추경호	해양수산부장관	조승환		교육부장관	이주호	중소벤처기업부장관	이영		과학기술정보통신부장관	이광호	개인정보보호위원장	고학수		법무부장관	박진	원자력안전위원장	유국희		행정안전부장관	이종심	식품의약품안전처장	오유경		문화체육관광부장관	이상민	경관	임동환		농림축산식품부장관	박보균	농촌진흥청장	윤희근		산업통상자원부장관	정황근	산림청장	조재호		보건복지부장관	이정양	특허청장	남성현		환경부장관	조규홍	질병관리청장	이인실		고용노동부장관	이정식	배양정	윤희동	제출연월일	2022. 12. 14.				- 기술 블록화 관련 공급망 리스크를 상시 분석하고, 공급망 대응 기술개발 포트폴리오 도출 및 R&D 투자 연계 추진 · 비교우위·대체 가능·열위 기술 등을 식별하여 기술개발 포트폴리오 도출 ○ 국가 전략기술 관련 미래 공급망 선점 역량 확보 - 반도체·이차전지 등 전략기술별로 극복이 필요한 소재기술 난제를 도출하여 지원, 한계돌파형 초격차 소재 확보 추진 - 우주, 수소, 양자 등에 활용되는 초고온·극저온·초전도 등 극한소재 조기 확보를 위한 실증연구 기반 조성 및 지원 - 빅데이터·AI 등 디지털 연구개발 방법론을 접목하여 연구기간을 단축하고 비용을 절감, 혁신적 연구를 촉진 ※ (예시) AI 활용 스마트 소재연구소 신설, 나노랩 공정데이터 스마트서비스 구축 등을 통한 소재연구 생산성 향상 ○ 광물자원 및 에너지 원료, 식량자원 확보의 전략성 강화 - 핵심 자원의 탐사·개발 기술 고도화를 통한 자원개발 영역 확대하고, 국내 광물자원 활용성 제고 및 광물 고부가가치화 신산업 창출 ※ 공급계약 가능성·산업 중요도를 고려한 핵심자원 선별, 탐사·개발 기술 고도화 지원, 디지털 기술 접목 비대면·교효율·친환경 자원기술 개발 ※ 데이터·네트워크·인공지능 분야 사용 소재 원료 광물 고도화 기술 고도화, 전기차, 드론, 신재생에너지 등의 핵심 자원순환 기술 개발·실증, 국내 부존 미이용 광물자원의 고부가가치 활용기술 등 - 우량품종 개발, 농업생산 과정의 기계화·자동화, 수산물 생산량 수급예측 등 식량자원 확보를 위한 융복합 핵심 기술개발 추진 ※ 5G, 빅데이터, 인공지능 등을 접목한 ICT 융복합 스마트 농축수산업 기반 강화 및 생명공학 기술(BT) 적용 확대, 다부처/간·과 협업 융복합 연구체계 구축
의안번호	제 1 호	심 의 사 항																																																																					
심 의 연 월 일	2022. 12. 14. (제 1 회)																																																																						
제출자	국무조정실장	방문규	국토교통부장관	원희룡																																																																			
	기획재정부장관	추경호	해양수산부장관	조승환																																																																			
	교육부장관	이주호	중소벤처기업부장관	이영																																																																			
	과학기술정보통신부장관	이광호	개인정보보호위원장	고학수																																																																			
	법무부장관	박진	원자력안전위원장	유국희																																																																			
	행정안전부장관	이종심	식품의약품안전처장	오유경																																																																			
	문화체육관광부장관	이상민	경관	임동환																																																																			
	농림축산식품부장관	박보균	농촌진흥청장	윤희근																																																																			
	산업통상자원부장관	정황근	산림청장	조재호																																																																			
	보건복지부장관	이정양	특허청장	남성현																																																																			
	환경부장관	조규홍	질병관리청장	이인실																																																																			
	고용노동부장관	이정식	배양정	윤희동																																																																			
제출연월일	2022. 12. 14.																																																																						

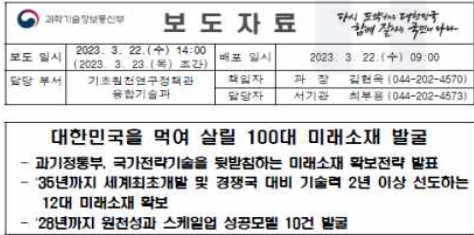
1.2.3. 부처계획

□ 국가전략기술을 뒷받침하는 미래소재 확보 전략(과기정통부, 2023)

○ '22년 10월 수립된 12대 국가전략기술을 뒷받침할 수 있는 미래소재를 확보하기 위해 국가전략기술 분야별 미래에 필요한 100대 미래소재*를 발굴하고, 글로벌 기술우위 선점을 위해 향후 10년 뒤까지 확보해야 할 기술로드맵을 수립

* 국가전략기술이 미래 적용시점에 직면할 어려운 도전을 선제적으로 해결할 기술난제 해결형 첨단소재

- 12대 국가전략기술 연계 100대 미래소재 확보 방안으로 '신소재 또는 대체소재 확보를 위해 계산과학·측정분석·공정·실험 데이터를 수집·생성·활용하는 소재별 HUB 구축 추진'계획을 포함



대한민국을 먹여 살릴 100대 미래소재 발굴

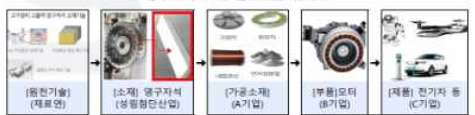
- 과기정통부, 국가전략기술을 뒷받침하는 미래소재 확보전략 발표
- '36년까지 세계최초개발 및 경쟁국 대비 기술력 2년 이상 선도하는 12대 미래소재 확보'
- '28년까지 원천성과 스케일업 성공모델 10건 발굴'

과학기술정보통신부(장관 이종호, 이하 '과기정통부')는 3월 22일(수) 오후 2시, 서울 인터컨티넨탈 코엑스에서 '국가전략기술을 뒷받침하는 미래소재 확보 전략(이하 '미래소재 확보전략')'을 발표하고, 연구자들과 함께 효과적인 미래소재 연구개발 지원 전략에 대해 논의하였다.

행사 1부는 과기정통부의 '미래소재 확보전략' 발표와 장관과 연구자와의 대화 '미소톡톡'이 진행되었으며, 이어 2부에서는 기업인과 대학, 출연연 연구자가 함께 미래소재 분야의 연구개발 현황과 지원 방향 등을 주제로 토론하였다.

이날 행사에는 기업, 대학, 출연연의 다양한 소재 연구자 200여 명이 참석하여 상호 교류하고 연구현황을 공유하는 한편 전시된 대표성 성과를 관람하였다.

최근 과학기술 경쟁력이 국가의 외교안보에도 영향을 미치는 기술 패권 시대가 도래하면서, 각 국가는 핵심기술을 전략적으로 육성하고 있다. 정부도 필수적으로 확보해야 하는 12대 국가전략기술을 선정하여 육성키로 하였으며('국가전략기술 육성방안' 발표, '22.10.28. 과학기술자문회의')



< 연구자식 소재 분류체인 예시 >

출연연 기본과제와 정부 국책연구 간 연계를 통해 R&D효율성 제고

- (소재 기술난제 지속발굴) 국가전략기술 뒷받침을 위해 실무위원회와 분야별 국가기술전략센터 간 협업, 전략기술 관련 기술난제 상시 대응
- 발굴한 기술난제는 매년 재검토하여 최신 산업기술동향과 매칭, 미래소재 목록 및 기술목표를 갱신하는 통합 플랫폼(무빙타겟) 운영
- (소재HUB 구축) 신소재 또는 대체소재 확보를 위해 계산과학·측정 분석·공정·실험 데이터를 수집·생성·활용하는 소재별 HUB 구축 추진
- (신소재) 100대 미래소재 중, 특정 물질 구현을 위해 신소재 확보가 필요하고 AI 활용 필요성, 경제작가기술적 우선순위가 높은 소재 지원
- (대체소재) 글로벌 수요·공급 예측, 국내 기업 점유율, 소재 확보 여건 등 종합 분석평가를 통해 대상 소재 선정
- (임무기반 사업관리) R&D를 통해 달성하고자 하는 임무를 명확화 하고 달성기한을 설정, 과제기획과 중간점검 시 관련 기업 참여를 확대
- 수행 중에도 기술환경변화를 반영한 성과목표, 사업내용 변경을 허용하여 유연한 무빙타겟 방식 운영 • 국가연구개발혁신법 제15조제1항제2호
- 논문특허 위주의 사업관리에서 벗어나, 직접 활용될 수 있는 핵심 특허 및 기술이전, 기술실증 등 명확한 성과기준을 설정
- (장기연구 지원) 우수한 연구성과는 연구에서 사업화까지 목표할 수 있도록 후속지원, 부처 간 이어달리기를 통해 인센티브 확대

□ 소재부품장비 글로벌화 전략(관계부처 합동, 2023)

○ (미래소재) 국가전략기술을 뒷받침하는 미래 소재기술 확보

－ 12대 국가전략기술 100대 미래소재*에 대한 범부처 협업 R&D

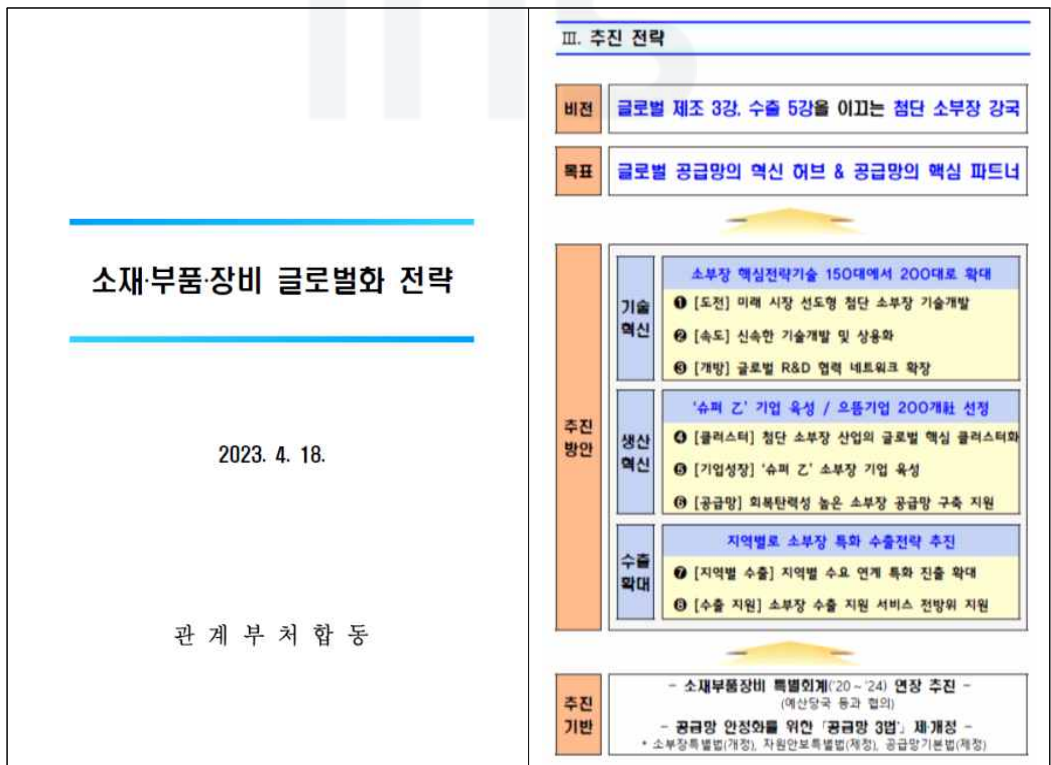
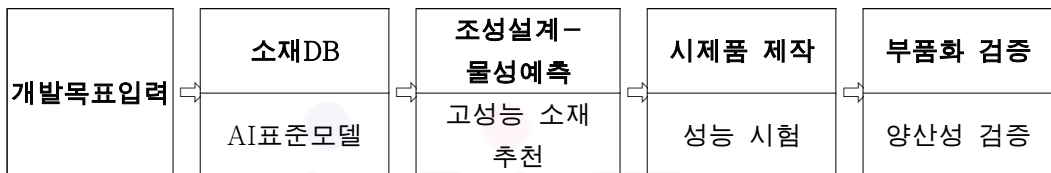
* 반도체(11), 디스플레이(8), 이차전지(8), 차세대 원자력(8), 첨단 모빌리티(10), 수소(9), 첨단 바이오(9), 첨단로봇(8) 등 ('23. 3월, 과기부 미래소재 확보전략)

○ (소부장 DX) AI기반 소부장 개발* 확산을 통해 연구기간 획기적 단축

* 소재 데이터(원료·조성·공정·물성)를 활용하여, AI기반 조성설계·물성예측 등 수행

－ 공공기관* 중심 빅데이터, AI를 활용하여 신소재 개발 가속화

* 4대 소재 연구기관 : 화학연, 재료연, 세라믹연, 다이텍



□ 디지털 소재혁신 강화 실행계획(산업부, 2021)

○ 4차 산업혁명 대응 및 친환경·고부가 산업으로의 전환을 위해 디지털 데이터를 활용한 혁신적 소재부품 기술확보 추진

－ 데이터 기반 소재개발로 소부장 미래 경쟁력 선점과 디지털 소재개발 플랫폼 구축을 통한 글로벌 경쟁우위 확보를 기본 방향으로, 3대 추진전략*과 5대 주요 추진과제** 마련

* ① 8대 핵심소재 프로젝트 선정 및 10만건 이상 데이터 확보(∼'22년), ② 데이터표준화 중점추진 + 공공부문 우선→민간확산 등 단계적 추진, ③ 관련 기관간 강력한 협력 추진체계를 가동하고 주기적으로 점검

** 3대 분야 8대 선도 프로젝트 추진, 데이터 표준화, 데이터 축적과 활용, 데이터 기반 확충, 소재데이터 거버넌스 가동 등을 주요 추진과제로 제시

< 표 1 > 3대 분야 8대 선도 프로젝트

3대 분야	세부 프로젝트
수소경제	① 고효율 그린수소 생산용 금속 촉매소재 ② 양방향 연료전지용 All-Ceramic 전극소재
탄소중립	③ 대체원료 활용 올레핀 생산용 촉매소재 ④ 생분해성 고강도 섬유소재 ⑤ 가스터빈 부품용 고엔트로피 합금소재
미래 모빌리티	⑥ 미래모빌리티 내외장용 경량복합수지 ⑦ 미래수송기기용 고내광성 친환경 내장재 ⑧ 미래차 전장용 고신뢰성 커패시터 소재

**데이터의 축적과 활용을 통한
디지털 소재혁신 강화 실행계획(안)
- "DM(Digital Material)" 프로젝트 -**

2021. 3. 15.

산업통상자원부

DIGITAL MATERIAL 프로젝트

**데이터의 축적과 활용을 통한
디지털 소재혁신 강화 실행계획**

소부장 미래 경쟁력 선점 (+) 글로벌 소재 경쟁력 우위 확보

- 핵심 신소재 분야의 8대 프로젝트 중심 데이터 개발 플랫폼
- 데이터의 축적과 활용을 위한 산학연 "연대와 협력"
- 소재 개발 소요 비용과 시간의 획기적 단축

추진전략

01 8대 핵심소재 프로젝트 선정 및 10만건 이상 데이터 확보(∼'22년)

02 데이터표준화 중점추진 + 공공부문 우선 → 민간확산 등 단계적 추진

03 관련 기관간 강력한 협력 추진체계를 가동하고 주기적으로 점검

주요 추진과제

8대 선도 프로젝트 추진

데이터 표준화
표준입력 범용성 확보

데이터 축적과 활용
데이터 수집, 저장, AI모델 개발

데이터 기반 확충
신소문 구조의 데이터 활용 제도 마련

소재데이터 Governance 가동
소재부품정보 정보관리체계 구성·운영

**8대 소재 기반, 산학연 전문가 공동
3대 분야 선도 프로젝트 선정 추진**

표준화 및 연계를 위한 협력
표준화 및 연계를 위한 협력

데이터 축적과 활용
데이터 수집, 저장, AI모델 개발

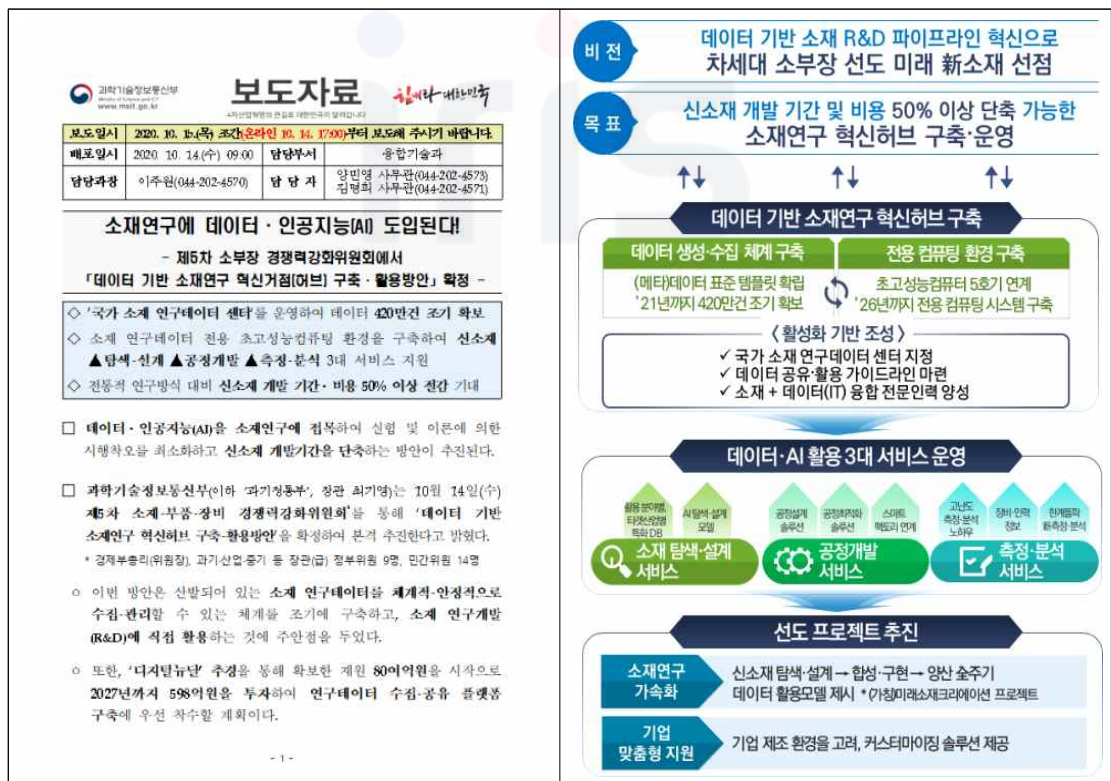
데이터 기반 확충
신소문 구조의 데이터 활용 제도 마련

소재데이터 Governance 가동
소재부품정보 정보관리체계 구성·운영

□ 데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축·활용방안(관계부처 합동, 2020)

- 소재 연구데이터 집적화를 위한 허브를 구축하고, 탐색·설계→공정 개발→양산의 ‘소재 R&D 전주기 가속화’ 성과 창출을 위해 데이터·인공지능(AI)을 소재연구에 접목하여 실험 및 이론에 의한 시행착오를 최소화하고 신소재 개발기간을 단축하는 방안을 마련
- 산발되어 있는 소재 연구데이터를 체계적·안정적으로 수집·관리할 수 있는 체계를 조기에 구축하고, 소재 연구개발(R&D)에 직접 활용하는 것에 초점
- 데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축, 데이터·인공지능(AI) 활용 3대 서비스 제공, 소재연구 가속화 선도 프로젝트 추진*

* 소재연구 혁신허브 및 3대 서비스를 소재 연구개발(R&D) 전주기에 활용하여 신소재 개발 시간·비용을 절반으로 절감하는 선도사업을 추진



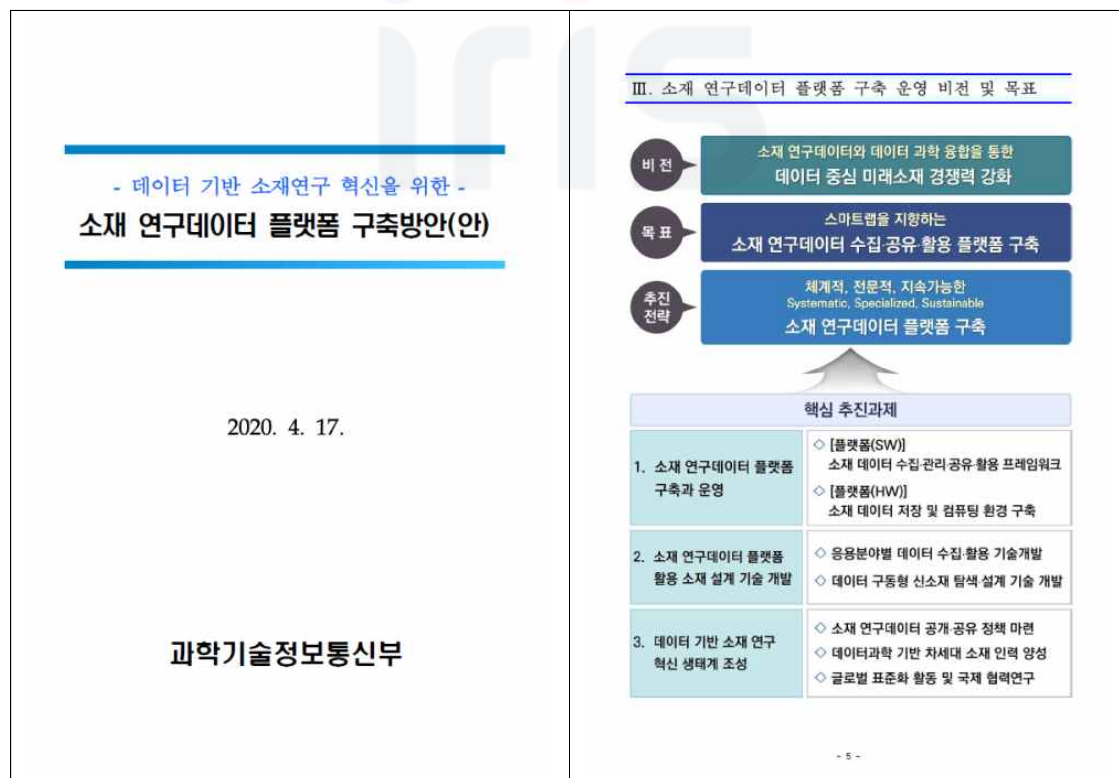
□ 소재 연구데이터 플랫폼 구축방안(과기정통부, 2020)

○ 데이터 기반 개방형 연구로의 연구 패러다임 변화 대응과 중장기 소재 분야 연구 경쟁력 제고를 위해 ‘소재 연구데이터와 데이터 과학 융합을 통한 데이터 중심 미래소재 경쟁력 강화’를 비전으로 하는 소재 연구데이터 플랫폼 구축 운영 방안을 마련

- 핵심 추진과제로 소재 연구데이터 플랫폼 구축과 운영, 소재 연구데이터 플랫폼 활용 소재 설계 기술 개발*, 데이터 기반 소재연구 혁신 생태계 조성을 제시

* 응용분야별 데이터 수집·활용 기술개발, 데이터 구동형 신소재 탐색·설계 기술 개발

- 체계적이고 전문적이며 지속가능한 소재 연구데이터 수집, 공유, 활용 가능 플랫폼 구축을 위해 ‘21~’27(7년) 동안 약 640억원 투자 계획 발표



□ 연구데이터 공유·활용 전략(과기정통부, 2018)

- 국가 R&D 추진 과정에서 축적되는 연구데이터를 체계적으로 관리·공유하고 연구자가 새로운 지식과 가치 창출에 연구데이터를 적극 활용토록 지원하기 위해 ‘연구데이터 지식자산화·빅데이터화’를 비전으로 하는 연구데이터 공유·활용 전략 마련
- 연구데이터 관리체계 구축 및 커뮤니티 형성 촉진, 국가연구데이터 플랫폼 구축 및 서비스 제공, 데이터 및 컴퓨팅 활용 인재 성장 지원, 연구 데이터 공유·활용에 관한 법·제도 마련, 연구데이터의 산업적 활용 및 일자리 창출 등의 과제 추진



보도자료

특단의 혁신을 낳는 과학기술 정책제언 전달 창구입니다

보도일시	2018. 1. 19(금) 오전(09:00)부터 보도제 추시기 바랍니다.	
배포일시	2018. 1. 18(목) 09:00	담당부서 HPC팀
담당과장	조경숙(02-2110-2360)	담당자 장완희 사무관(02-2110-2363)

사람 속 연구데이터 함께 쓰는 빅데이터로 새롭게 거듭난다

- 「혁신성장 촉진을 위한 연구데이터 공유·활용 전략」 수립 -

□ 과학기술정보통신부(장관 최성민, 이하 과기정통부)는 혁신성장 촉진을 위한 「연구데이터 공유·활용 전략」을 추진한다.

○ 「연구데이터 공유·활용 전략」은 국가 R&D 추진 과정에서 축적되는 연구데이터를 체계적으로 관리·공유하고 연구자가 새로운 지식과 가치 창출에 연구데이터를 적극 활용토록 지원하기 위해 마련됐다.

○ 과기정통부는 이번 전략을 1월 19일(금) 국가과학기술심의회 운영 위원회에 보고하고, 전략 추진에 본격 나설 계획이다.

□ 세계적으로 데이터 중심 R&D 활성화¹⁾에 데이터 분석이 연구개발의 주요 추진 동력으로 부각되고, 이를 활용한 다분야융합·공동연구가 활성화됨에 따라 연구데이터 공유·활용체계의 필요성이 천명하는 추세다.

* 1914년 이후 노벨상 수상 연구의 87%가 다학제·융합 연구로, 2010년 이후 100% 이상 다학제·융합 연구로 나타났다.

○ 주요국은 이와 같은 변화에 주목하고 연구성과와 과정을 개방화하는 오픈사이언스 정책²⁾을 본격 추진하고 있으며, 국내는 연구데이터를 실험결과로 관리하지 않는 등 관련 제도·인프라가 미비³⁾한 실정이다.

* 「미국」 연구데이터 관리 공유에 대한 지침(13) 발간, Open Access 2020, Preprint 등
** 연구개발 과정에서 산출된 연구데이터는 연구결과로서 가치가 높음에도 연구성과물(논문, 특허, 연구보고서, 장비·시설 등)에 미포함

■ 원리 비전 및 핵심 추진과제

비전	연구데이터 지식자산화·빅데이터화
목표	국가 연구데이터 공유·활용 활성화
추진 전략	① 연구데이터 공유·활용 기본원칙 제시 ② 융합·공동연구 역량 강화를 위해 분야별 연구공동체 형성 ③ 인프라 구축, 지원으로 연구자 부담 경감 ④ 데이터 집약형 연구부터 우선 추진, 단계적 확장 ⑤ 데이터 공유·활용의 가치·인기·보여주기 시범사업 추진

핵심 추진과제

1. 연구데이터 관리 체계 구축 및 공유 커뮤니티 형성 촉진	> 계층적 연구데이터 연계체계 마련 > 데이터 기반 연구커뮤니티 형성 촉진 및 확산
2. 국가연구데이터 플랫폼 구축 운영	> 국가 연구데이터 플랫폼 인프라 구축 운영 > 대·소분야 전문센터 플랫폼·인프라 지원
3. 데이터 및 컴퓨팅 활용 R&D 인재 양성 지원	> 연구자에 대한 데이터 및 컴퓨팅 활용 교육 제공 > 데이터 기반 연구참여를 통한 고급인력 양성 추진 > 전문센터 기반 강화를 위한 전문인력 양성
4. 연구데이터 관리 공유·활용 관련 법제도 마련	> 연구데이터의 관리·공유·활용 근거규정 마련 > 데이터 관리계획(Data Management Plan) 도입
5. 연구데이터의 산업적 활용 촉진 및 일자리 창출	> 연구데이터 활용기반 조성 > 연구데이터 사업화 촉진 > 연구데이터 서비스업 육성

□ 미래소재 원천기술 확보전략(과학기술정보통신부, 2018)

○ 최근 4차 산업혁명의 도래로 초연결 지능사회로 빠르게 진화하고, 세계적 문제로 부상하는 고령화, 환경오염 및 한정적인 자원 및 재난·재해 등에 선제적 대응을 위해 소재기술 혁신을 위한 중장기 세부전략 마련

－ 4차 산업혁명과 미래사회의 메가트렌드인 초연결·초고령·지속가능·안전한 사회에서 요구하는 과학기술적·사회적이슈를 선제적으로 대응하는 데 필요한 30대 미래소재* 도출

* 초연결 사회를 위한 스마트소재(8개), 초고령 건강사회를 위한 웰니스 바이오소재(9개), 지속가능한 사회를 위한 환경변화 대응소재(5개), 재해·재난으로부터 안전한 사회를 위한 안전소재(8개) 등

－ 미래소재의 원천기술 개발 성공 가능성 제고를 위해 중장기 R&D 투자전략 마련



보도자료 I-KOREA40

4차산업혁명의 손길로 대한민국이 달라집니다

보도일시	2018. 4. 25(수) 오전 10시 4. 24. 1200)부터 보도에 주시기를 바랍니다.	담당부서	융합기술과
배포일시	2018. 4. 24.(화) 09:00	담당자	이선미 사무관(02-2110-2413)
담당과장	최미경(02-2110-2410)		

4차 산업혁명의 원동력인 「미래소재 원천기술 확보전략」 수립

□ 과학기술정보통신부(장관 유영민, 이하 '과학기술부')는 4월 25일(수) 제1회 국가과학기술자문회의 심의회의 산하 운영위원회에서 '미래소재 원천기술 확보전략'을 심의하고 확정할 계획이다.

- 미래소재란 미래 산업업 창출과 혁신기술 개발의 기반이 되는 소재로, 인공지능, 빅데이터, IoT, 헬스케어, 환경·에너지, 안전분야 등 4차 산업혁명과 미래사회의 핵심영역을 뒷받침 할 원천소재
- 최근 4차 산업혁명의 도래로 초연결 지능사회로 빠르게 진화하고, 세계적 문제로 부상하는 고령화, 환경오염 및 한정적인 자원 및 재난·재해 등에 선제적 대응을 위해 원천소재 개발이 시급한 실정이다.







붙임2 미래소재 원천기술 확보 추진전략

비전	4차 산업혁명 경쟁의 원동력 확보 및 미래사회 대비														
목표	선진국과 기술격차 해소  신소재 산업 창출  융용산업 창출 														
추진 전략	1. 미래소재 원천기술 도출 [4대 이슈별 30대 미래소재] <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse; font-size: small;"> <tr> <th>[4대 이슈]</th> <th>[대응소재]</th> </tr> <tr> <td>① 초연결 사회: 8개 스마트 소재</td> <td></td> </tr> <tr> <td>② 초고령 사회: 9개 웰니스 바이오 소재</td> <td></td> </tr> <tr> <td>③ 지속가능 사회: 5개 환경변화 대응소재</td> <td></td> </tr> <tr> <td>④ 안전한 사회: 8개 안전소재</td> <td></td> </tr> </table> 2. 중장기 R&D 투자전략 <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse; font-size: small;"> <tr> <th>추진전략 및 체계</th> </tr> <tr> <td>① 도전·경쟁력 R&D 확대</td> </tr> <tr> <td>② 미래소재 연구혁신 인프라 구축</td> </tr> <tr> <td>③ R&D 전주기 지원체계 구축</td> </tr> </table>	[4대 이슈]	[대응소재]	① 초연결 사회: 8개 스마트 소재		② 초고령 사회: 9개 웰니스 바이오 소재		③ 지속가능 사회: 5개 환경변화 대응소재		④ 안전한 사회: 8개 안전소재		추진전략 및 체계	① 도전·경쟁력 R&D 확대	② 미래소재 연구혁신 인프라 구축	③ R&D 전주기 지원체계 구축
[4대 이슈]	[대응소재]														
① 초연결 사회: 8개 스마트 소재															
② 초고령 사회: 9개 웰니스 바이오 소재															
③ 지속가능 사회: 5개 환경변화 대응소재															
④ 안전한 사회: 8개 안전소재															
추진전략 및 체계															
① 도전·경쟁력 R&D 확대															
② 미래소재 연구혁신 인프라 구축															
③ R&D 전주기 지원체계 구축															
기반	미래소재 R&D 경쟁력 제고를 위한 정책기반 강화 (민관 협업체계 구축 + 미래소재 R&D로드맵 주기적 보완)														

1.3. 사업기획 추진체계 및 경과

1.3.1. 사업기획 추진체계

□ 추진체계

- 과기정통부 및 한국연구재단 총괄·관리하에 기획사에서 사업 추진 계획 수립 및 전문가 자문회의 개최



□ 추진 주체별 역할

- (과학기술정보통신부) 사업 주관부처로서, 사업 총괄관리 및 전문가 자문의견 등 종합검토
- (한국연구재단) 기획 전반을 주관하며, 사업기획 방향과 세부 내용 검토 및 과학기술정보통신부와 원활한 의사소통 유지
- (전문가 자문) 탐색·설계 공정, 측정·분석 공정, 공정설계 분야 등 사업기획 방향에 대한 전반적인 검토·자문 수행
- ((주)로운인사이트) 과제 수행을 실무 총괄하며 사업의 추진방향 설정, 대내외 환경분석, 상세 사업설계 등 과업의 체계적 수행 및 지원

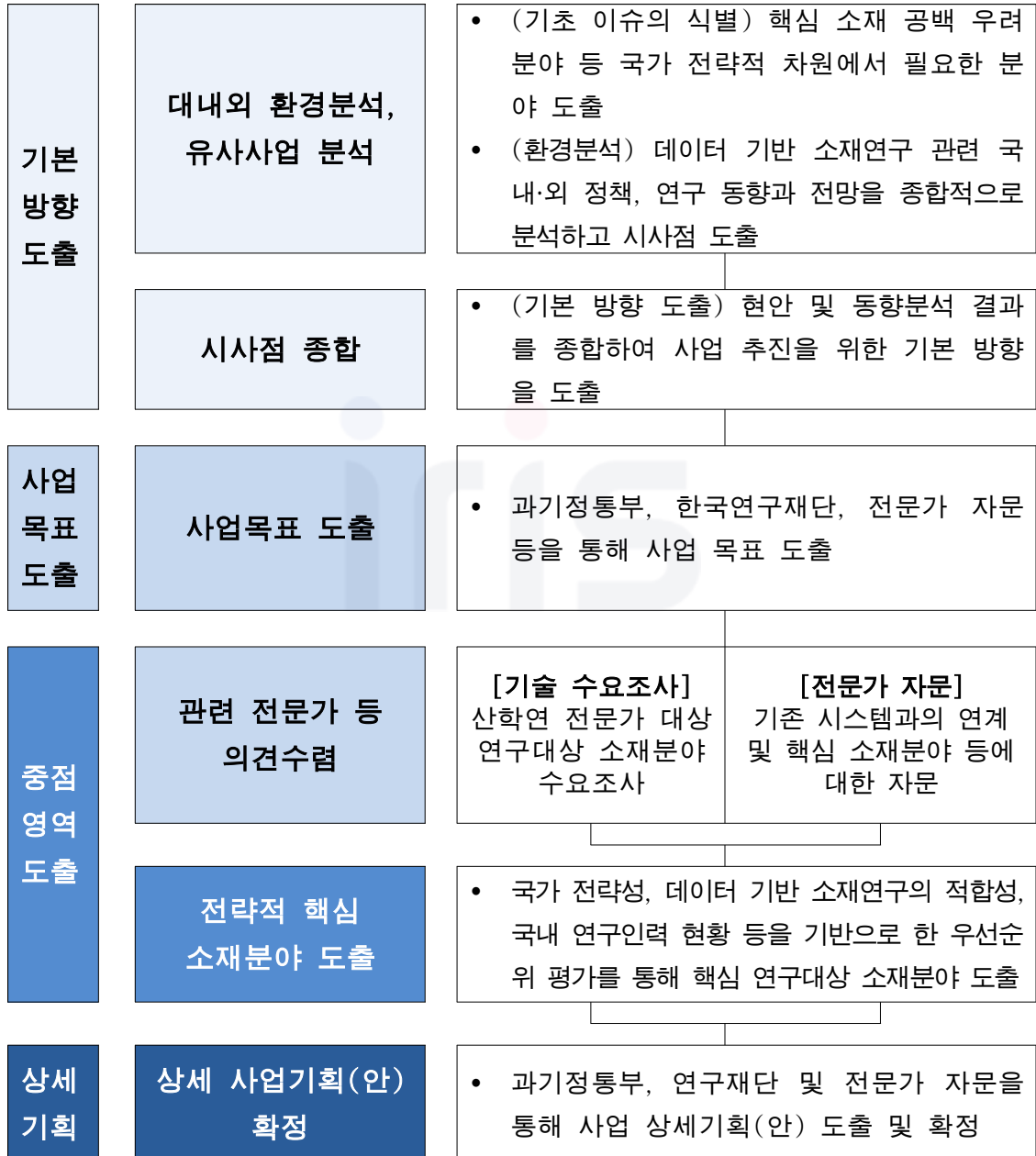
1.3.2. 사업기획 추진경과

일자	주요 내용
○ '23. 8. 3.	착수보고
○ '23. 8. 9.	자문회의 ※ 소재허브 유사사업 연구사례 논의 등
○ '23. 8. 10.	자문회의 ※ 소재분류체계(안) 도출방향 등
○ '23. 8. 17.	자문회의 ※ 사업기획 방향 및 주요 이슈 논의
○ ~'23. 8. 31.	사업 개요(배경 및 필요성, 사업 정의 및 범위 등), 대내외 환경분석
○ '23. 9. 6.	유사 연구사례 세미나 ※ AI 기반 초임계 소재(알키미스트), 가상공학 플랫폼 구축사업
○ '23. 9. 20.	자문회의 ※ 소재분류체계(안) 도출 방향, 사업기획 방향 등
○ '23. 9. 25.	자문회의 ※ 소재 연구데이터 플랫폼과 연계를 위한 소재분류체계(안) 도출
○ ~'23. 9. 27.	유사사업 분석, 중점 추진방향 설정
○ ~'23. 10. 11.	상세 사업설계(안) 작성
○ '23. 10. 17.	실무회의 ※ 상세 사업설계(안) 검토 등
○ ~'23. 10. 30.	사업 상세설계(안) 보완, 비전·목표 수립, 추진전략 수립
○ '23. 10. 31.	중간보고서 제출
○ '23. 11. 7.	중간평가 ※ 사업 기본 계획(안) 등에 관한 검토·조정 및 향후 계획 논의 등

일자	주요 내용
○ '23. 11. 14.	자문회의 ※ HUB 주제도출 및 소재분류체계 작성방향 논의
○ '23. 11. 16. ~11. 22.	기술수요조사 ※ 소재혁신선도본부 추진 협조
○ '23. 11. 24.	자문회의 ※ 수요조사 결과 검토, HUB 주제 도출방향, 소재분류체계 등 논의
○ '23. 12. 5.	자문회의 ※ HUB 주제도출, 기술트리 작성, 소재분류체계 검토 등
○ '23. 12. 8.	자문회의 ※ HUB 연구주제 도출 과정 및 내용의 적절성 검토
○ '23. 12. 22.	자문회의 ※ 선기획 도입 시 소재 분야 및 연구주제 도출방향, DB구축 방향, 선정평가 고려사항 등 논의
○ '23. 12. 26.	자문회의 ※ 소재시스템 순환체계도 검토, 최종 산출물 예시 등 논의
○ '24. 1. 2.	선기획 추진계획(안) 작성
○ '24. 1. 15.	최종보고서 초안 제출

1.3.3. 사업기획 추진절차

- 현안 이슈 도출과 대내외 환경분석 및 전문가 의견수렴을 거쳐 사업 방향과 목표를 도출하고, 중점영역과 상세 기획(안)을 확정함



1.4. 사업 정의 및 범위(안)

- (정의) 미래 국가안보, 과학기술주권에 필수적인 핵심 소재의 공백 우려 분야 등에 대해, 대체소재의 신속한 확보를 위해 新연구방법론을 적용한 데이터 시스템 기반 전주기 통합 신소재 개발 연구 사업



< 그림 5 > 소재 HUB 개념

- (목표) 계산과학, AI, 실험로봇 등을 기반으로 소재개발 전주기 데이터를 조속히 확보하여 소재탐색 및 시스템·소자 최적화를 가속화하고 원천소재의 사업화 가능성 극대화

< 예상 성과물 >

- ① 소재데이터 (소재-시스템·소자 전주기 데이터)
- ② 소재탐색용 계산과학 및 인공지능 프로그램
- ③ 공정 및 시스템최적화 계산과학 및 인공지능 프로그램
- ④ 원천소재 및 특허 (관련 소재 및 시스템·소자 포괄 특허포트폴리오)
- ⑤ 최적 시스템·소자

- (주요 내용) ①소재 설계·합성-②분석-③물성평가-④시스템·소자 설계·제조(공정)-⑤시스템·소자 성능평가 전주기의 데이터를 확보하고 AI 기술과 접목하여 소재개발 각 단계별 상관관계 유추를 통해 최적의 시스템·소자 성능을 갖도록 하는 원천소재 확보



< 그림 6 > 데이터 기반 소재 허브 연구단 추진체계(소재-시스템 선순환 체계)

※ 전문가 자문회의('23. 12. 8., 12. 22., 12. 26.)를 통해 작성

2. 대내외 환경분석

2.1. 정책적 환경분석

2.1.1. 국내 동향

□ 소재연구데이터 수집·공유 중요성 인식 및 기반조성 노력 확대

- '07년 산업자원부에서 시작한 소재정보 은행 구축사업을 통해 산업적으로 활용 가능한 소재 데이터의 체계적 구축 및 공개 진행
 - － 금속(재료연), 화학(화학연), 세라믹(세기원), 섬유(다이텍연) 분야에 대한 소재물성 데이터베이스 수집 및 기술 및 시장동향, 특허, 각종 보고서 등을 생성·수집 중이며, 축적된 정보를 기반으로 부품화에 필요한 물성 정보와 기술적 솔루션을 부품업체에 제공

※ 출처 : 융합연구정책센터(2021). 융합연구리뷰

- '18년 과기정통부는 세계적으로 데이터 중심 R&D가 활성화됨에 따라 국가 R&D 추진 과정에서 축적되는 연구데이터를 체계적으로 관리·공유하고 연구자가 새로운 지식과 가치 창출에 연구데이터를 적극 활용하도록 지원하기 위한 '연구데이터 공유·활용 전략(과기정통부, 2018)'을 발표

- － 연구데이터 지식자산화, 빅데이터화를 비전으로 국가 연구데이터 공유·활용 활성화를 위한 전략* 마련

* ① 연구데이터 공유·활용 기본원칙 제시, ② 융합·공동연구 역량 강화를 위해 분야별 연구공동체 형성, ③ 인프라 구축, 지원으로 연구자 부담 경감, ④ 데이터 집약형 연구부터 우선 추진, 단계적 확장, ⑤ 데이터 공유·활용의 가치를 단기간에 보여줄 시범사업 추진(미래소재 분야를 우선 추진분야로 선정('18년 시범과제 지원))

- － 핵심 추진과제 중 하나로 국가 연구데이터의 수집·관리 공유·활용을 위한 법·제도적 기반 마련을 위해 국가R&D에 데이터관리계획(DMP)을 도입('19)

- '20년 과기정통부는 데이터 기반의 개방형 연구로의 연구 패러다임 변화에 대응하고, 데이터 기반 소재 연구 효율화를 통한 중장기 소재

분야 연구 경쟁력 제고를 위해 ‘소재 연구데이터 플랫폼 구축방안(과기정통부, 2020)’을 발표

- 소재 연구데이터의 체계적인 수집·관리를 통해 소재 개발기간 단축 및 효율성 제고를 위한 소재 연구데이터 수집·관리·활용 플랫폼 구축을 목표로 ‘소재 연구데이터 플랫폼’ 구축을 위해 ‘21년부터 ’27년까지 7년간 약 640억원 투자 계획 발표(‘20년 5억원)
- ’22년 5월, ‘국가 소재 데이터 스테이션(Korea Material Data Station, K-MDS)’을 오픈하고 다양한 형식의 소재 연구데이터를 웹상에서 쉽게 등록·관리할 수 있도록 하고, 공개된 데이터를 활용할 수 있는 분석 서비스를 제공 중

※ 출처 : 과기정통부(2022). 소재 연구데이터 수집·활용을 위한 국가 소재 데이터 스테이션(K-MDS) 오픈

□ 최근 과기정통부는 데이터·AI를 활용한 소재연구 활성화에 강력한 드라이브를 걸고 다양한 전략 수립 및 지원정책 추진 중

- ’20년 수립된 ‘데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축·활용방안(관계부처 합동, 2020)’에서는 데이터 수집·공유 인프라 구축과 동시에 ‘데이터 활용’의 측면에서 데이터·AI가 소재 R&D 전주기*로 확대·연계·활용 활성화를 위한 방안 모색

* 탐색·설계→공정개발→양산

- 신소재 개발 기간 및 비용 50% 이상 단축 가능한 소재연구 혁신허브 구축·운영을 목표로 데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축, 데이터·AI 활용 3대 서비스 제공, 소재연구 가속화 선도 프로젝트 등을 추진
- 과학기술 분야 최상위 계획인 ‘제5차 과학기술기본계획(’23~’27)’에서도 12대 국가전략기술별 소재기술 개발 및 디지털 연구개발 방법론을 적용한 연구 촉진 계획 마련
- (추진과제 3-5-2) ‘전환적 변화에 대응하는 미래 공급망 예측·선점 역량

확보'를 위해 국가 전략기술 관련 미래 공급망 선점 역량 확보* 추진

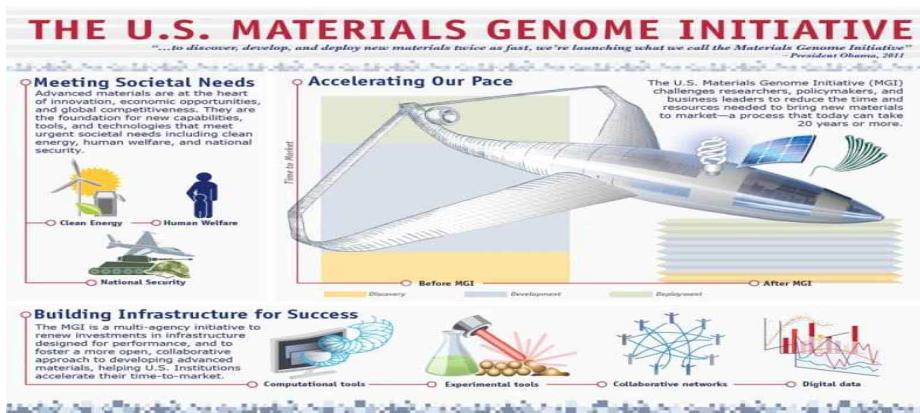
* 12대 전략기술별 소재기술 난제, 한계돌파형 초격차 소재, 극한소재 등 지원 및 빅데이터·AI 등 디지털 연구개발 방법론을 접목하여 연구기간을 단축하고 비용을 절감, 혁신적 연구 촉진

- '23년 3월, '국가전략기술을 뒷받침하는 미래소재 확보 전략(과기정통부, 2023)'에도 데이터 기반 소재연구를 통한 미래소재 확보전략 포함
- 디지털 기반 소재 연구 생태계 조성을 위해 '신소재 또는 대체소재 확보를 위해 계산과학·측정분석·공정·실험 데이터를 수집·생성·활용하는 소재별 HUB 구축 추진' 계획 발표



2.1.2. 국외 동향

- '11년 미국의 '소재게놈 이니셔티브(MGI, Materials Genome Initiative)' 선언 이후 소재 연구개발 디지털화가 급속히 진행 중이며, 전 세계적으로 소재데이터, AI, 자율실험(autonomous experimentation) 및 이를 통합한 디지털 인프라(플랫폼) 구축과 인력양성이 활발히 추진 중
- (미국) '11년 MGI를 발표한 이후 MGI 2014*, MGI 2021** 등 소재 정보학의 혁신을 위한 전략 마련 및 지속 수행
 - * (MGI2014 전략목표) ① 소재의 연구, 개발, 적용의 문화적 변모, ② 실험, 연산, 이론의 통합, ③ 디지털 데이터에 대한 접근성 개선, ④ 잘 훈련된 인력의 양성
 - ** (MGI2021 전략목표) ①소재 혁신 인프라 통합, ② 소재 데이터 활용, ③ 소재 R&D 인력 교육, 훈련 및 연결
- 자국 기관들이 더 적은 비용으로 첨단 소재를 신속하게 발견, 제조 및 확산할 수 있도록 지원하는 정책, 리소스 지원 및 인프라 구축
 - * MGI는 여러 연방기관이 참여하는 전략으로 표준과학기술연구원(NIST), 국방부(DOD), 에너지부(DOE), 국립과학재단(NSF), 국립보건연구소(NIH) 등이 주도



< 그림 7 > MGI 인포그래픽

※ 출처: <https://www.mgi.gov/content/mgi-infographic>

< 표 2 > 소재 계놈 이니셔티브(MGI) 주요 내용

- (목적) 21세기 선도적 글로벌 경쟁력 확보를 위해 신소재 개발부터 활용에 이르는 단계의 소요시간과 비용의 대폭 감축
- (추진방법) 범학제적, 범분야적, 범기관적으로 상호 연결되고 통합된 소재혁신 인프라를 활용하여 소재 발견부터 실적용에 이르는 전 단계의 효율적인 작동을 도모

구분	MGI(2014)	MGI(2021)
핵심 내용	인프라(문화, 네트워크, 장비, 저장소) 구축	데이터 인프라의 통합 및 연결
	 < 소재 혁신 인프라 구조 >	 < 변화된 MGI 패러다임 >
전략 목표 및 과제	• 목표① 소재의 연구, 개발, 적용의 문화적 변모 - 이론부터 실험까지의 통합적 R&D 조성 및 촉진 - 모든 소재 관련 산학연 기관이 MGI사업 방식을 채택하도록 촉진 - 국제 커뮤니티와 교류 • 목표② 실험, 연산, 이론의 통합 - MGI 디지털 자원 네트워크 구축 - 정확하고 안정적인 시뮬레이션 개발 - 향상된 실험 장비 개발 - 고급데이터 선별을 위한 데이터 분석기술 개발 • 목표③ 디지털 데이터에 대한 접근성 개선 - 소재데이터 인프라 시행을 위한 성공 사례 정립 - 소재 관련 데이터 접근이 용이한 저장소 구축 지원 • 목표④ 잘 훈련된 인력의 양성 - 새로운 교과과정 개발 및 실행 - 통합적인 연구경험이 가능하도록 기회 제공	• 목표①소재 혁신 인프라 통합 - 소재 혁신 인프라 요소들의 연결, 구축 및 보강 - 국가 소재 데이터 네트워크 구축 - 국가적 도전을 통한 소재 혁신 인프라 채택 가속화 • 목표② 소재 데이터 활용 - AI 적용을 통한 소재 R&D 적용 가속화 • 목표③ 소재 R&D 인력 교육, 훈련 및 연결 - 소재 R&D 교육의 현재 과제 해결 - 차세대 인력 교육 - 인재를 기회에 연결

※ 출처 : S&T GPS(2014). 미국, 소재계놈이니셔티브(MGI) 전략계획 발표(검색일 2023.06.04.); KIAT (2015). 미국의 소재계놈 이니셔티브 실행계획; National Science and Technology Council(2021). Materials Genome Initiative Strategic Plan

- '21년 새로운 전략을 통해 재료 혁신 인프라* 통합, 인공지능을 활용한 재료 R&D 가속화, 연구인력 교육, 훈련 및 커뮤니티 강화를 위한 노력 강조

* 계산(이론, 모델링 및 시뮬레이션) 도구, 실험(합성, 특성화 및 처리) 도구, 통합 연구 플랫폼, 데이터 인프라 포함

※ Materials Research Data Alliance (MaRDA): 재료 데이터 인프라를 연결하여 발견을 가속화하고, 재료 메커니즘에 대한 새로운 인사이트를 제공하며, 재료 설계에 대한 인간 중심 및 인공지능 지원 접근법의 토대를 마련하기 위한 통합적인 커뮤니티 플랫폼 구축

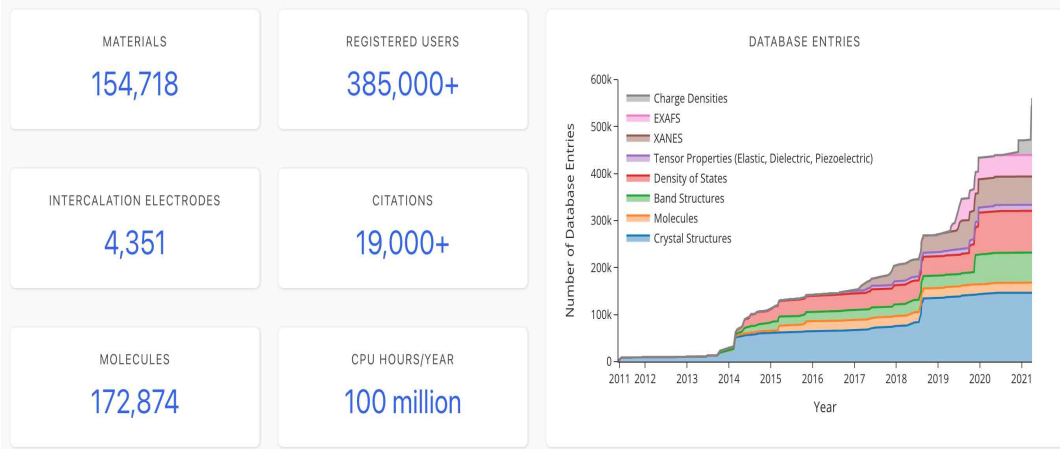
< 표 3 > 미국 정부 지원 소재 연구 프로그램

프로그램	주도 기관	주요 목표	정부 지원
Center for Complex Materials from First Principles (CCM)	Temple University	단순 및 복합재료 대해 향상된 전자 구조 계산 방법을 개발, 테스트, 적용 및 실험적으로 검증	에너지부 (DOE)
Center for Computational Materials Design (CCMD)	Penn State University	시스템 엔지니어링 설계 방법 확장을 통해 최적의 기능을 갖춘 재료를 설계	국립과학재단 (NSF)
Center of Excellence on Integrated Materials Modeling (CEIMM)	The Johns Hopkins University	계산 및 실험 방법론의 기초적 발전을 촉진하기 위한 다학제적 협업 연구 및 교육 프로그램	국방부 (DOD)
Center for Hierarchical Materials Design (CHiMaD)	North-western University	계층적 방법 및 재료의 설계 및 개발을 통해 재료 발견 및 상용화를 가속화	표준과학기술연구원 (NIST)
Center for Materials in Extreme Dynamic Environments (CMEDE)	The Johns Hopkins University	극한의 동적 환경에서 혁신적인 성능을 발휘하는 재료 시스템을 설계, 최적화 및 제작* *’22년 프로그램 종료	국방부 (DOD)
Center for Next Generation of Materials by Design (CNGMD)	National Renewable Energy Laboratory	다중 특성 탐색, 예측 설계에 메타안정 물질의 통합 등을 통해 새로운 기능성 에너지 재료 발견	에너지부 (DOE)
Center for Theoretical and Computational Materials Science (CTCMS)	NIST	최첨단 계산 접근법을 사용하여 재료 모델을 개발, 해결 및 정량화	표준과학기술연구원 (NIST)
Inorganometallic Catalyst Design Center (ICDC)	University of Minnesota	양자 시뮬레이션과 예측을 활용하여 새로운 촉매 물질의 합성, 특성화 및 촉매 작용을 지원	에너지부 (DOE)

프로그램	주도 기관	주요 목표	정부 지원
Joint Center for Artificial Photosynthesis (JCAP)	California Institute of Technology	인공 태양전지 기술개발에 전념하는 미국 최대 규모의 연구 프로그램	에너지부 (DOE)
Nanoporous Materials Genome Center (NMGC)	University of Minnesota	가능성 나노 다공성 재료의 화학적 분리 및 변형에 대한 예측적 계층적 모델링 등 미세 및 메조 다공성 재료를 발견하고 탐구	에너지부 (DOE)
Predictive Integrated Structural Materials Science (PRISMS)	University of Michigan	구조용 금속에 대한 예측 재료 과학을 가속화하기 위한 과학 플랫폼 구축	에너지부 (DOE)
Joint Center for Energy Storage Research (JCESR)	Argonne National Laboratory	여러 분야의 정부, 학계 및 산업계 연구자들이 모여 새로운 획기적인 에너지 저장 기술을 개발하는 주요 연구 파트너십	에너지부 (DOE)

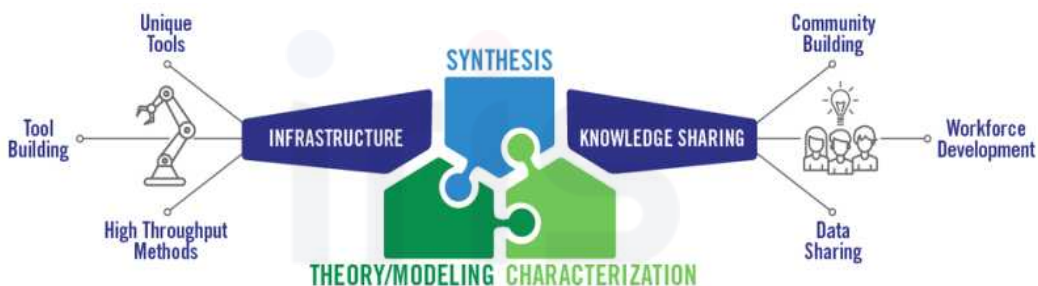
- 국립과학재단(NSF)의 주도로 MGI 관련 연구개발 지원 정책 추진
 - '12년 출범한 Designing Materials to Revolutionize and Engineer our Future(DMREF) 프로그램은 MGI 개념, 기초, 목표, 방법 및 도구를 홍보하기 위한 가장 일관되고 영향력 있는 자금원 중 하나
 - * 이 프로그램을 통해 MGI 관련 260개 이상의 대학 연구 프로젝트 전체 또는 일부를 지원하였으며 '23년 3월에 마감한 프로젝트 공모 상금은 4년에 걸쳐 150만-200만 달러(USD)로 예상
 - * 활발한 협업 연구 커뮤니티 구축, 데이터 과학과 머신러닝의 적극 활용 및 데이터 액세스, 미래 MGI 인력 교육을 통해 '21년 발표된 MGI 전략의 적극적 수행
 - 국립과학재단(NSF)의 주도로 재료 연구 발전을 가속화하기 위해 재료 혁신 플랫폼(Materials Innovation Platform) 프로그램 추진
 - * 재료 합성, 특성화, 이론/모델링을 통합할 수 있는 연구 인프라를 구축하고 재료 연구자들이 데이터, 노하우, 코드 등의 지식을 공유할 수 있는 생태계 설계

The Materials Project by the numbers



< 그림 8 > The Materials Project 개요

※ 출처 : <https://next-gen.materialsproject.org/>



< 그림 9 > Materials Innovation Platforms

※ 출처 : <https://mip.org/>

- * 현재 4개의 프로젝트 (플랫폼) 운영 중으로 '16년에 2차원 결정 컨소시엄 (2DCC-MIP)과 새로운 인터페이스 재료의 생성 및 발견을 위한 플랫폼 (PARADIM)을 런칭 후 갱신되었으며 '20년에 추가적으로 바이오폐리머 등 통합 화학 재료 혁신 플랫폼(BIoPACIFIC)과 글리코물질의 합성 자동화를 목표로 하는 플랫폼(GlycoMIP) 추진

- (일본) '19년 국가 산업 경쟁력 강화를 위해 새로운 개념의 '미래소재 개발 이니셔티브(Future Materials Exploring Initiative)*'를 발표하여, 효율적 미래소재개발을 위해 소재 정보학(Materials Informatics)을 강조하고 있으며, 빅데이터 분석, 기계학습 등 데이터 과학과 로봇 등의 방식을 접목

* (3대 추진과제) ❶소재 개발 범위 확대, ❷제조 공정 전반 반응경로 제어, ❸공정 제어 수단을 활용한 목표 안정화 상태 달성

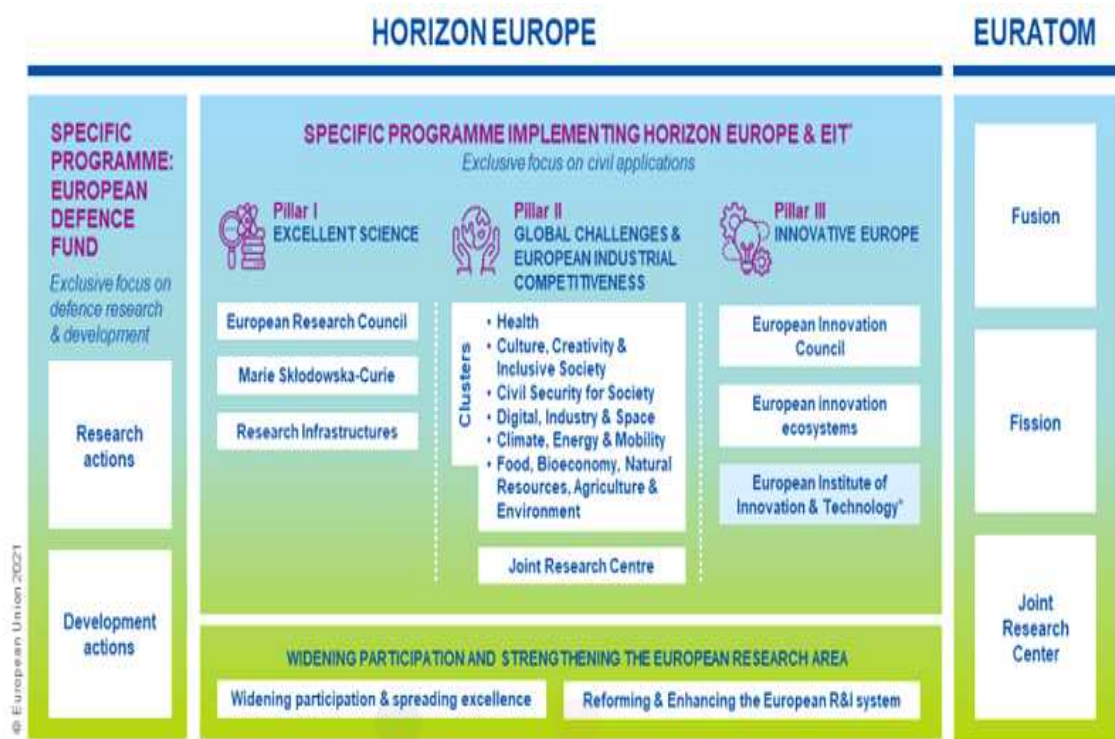
※ 출처 : S&T GPS(2019). [이슈분석] 128호 일본의 미래소재 개발 전략과 시사점

- (유럽) Horizon Europe(2021~2027)*을 발표, 컴퓨터 모델링, 재료 합성, 소재 특성 측정 등을 통합한 플랫폼 구축을 통해 고성능·장수명 배터리 소재 탐색**에 2천만 유로 예산 편성

* 유럽연합(EU)의 제9차 프레임워크 프로그램으로, EU의 과학기술 기반 및 산업경쟁력 강화를 촉진하고, 지속가능한 개발목표(SDGs)를 포함한 글로벌 사회과제를 해결하는 데 기여하는 것을 목표로 함

** Furthering the development of a materials acceleration platform for sustainable batteries(combining AI, big data, autonomous synthesis robotics, high throughput testing)(Batteries Partnership)

※ 출처: 한국에너지기술연구원(2022). Horizon Europe(2021~2027) EU 연구혁신 프로그램 - “기후변화대응기술” 중심으로



* The European Institute of Innovation & Technology (EIT) is not part of the Specific Programme

< 그림 10 > Horizon Europe 프로그램 구성

2.2. 소재데이터 및 AI 기반 연구동향 분석

2.2.1. 국내 동향

- 소재 연구데이터를 수집하고 활용하기 위한 사업·과제로, 미래소재 디스커버리사업, 소재 연구데이터 플랫폼 구축사업, AI 기반 초임계 소재 등이 진행 중
 - 미래소재 디스커버리 사업(과기정통부, '15~'24)은 新연구방법론을 활용*하여 기존 소재에서 볼 수 없는 새로운 물성과 기능을 구현하는 미래소재 개발 및 미래소재 원천특허 확보를 위한 사업으로, 10년간 총 사업비 3,066억 규모로 28개 연구단 지원
 - * 전산재료과학, 조합실험법, 다중분석법 등 창의적인 새로운 연구방법론
 - ※ (4대 중점추진분야) 극한물성 구조·환경 소재, 양자 알케미 조성제어 소재, 스케일링 한계 극복 ICT 소재, 인간오감 증강소재
 - ※ (주요 과제) 휴리스틱스 전산기반 기능성 무기소재 창제 연구('15~'21), 레이저-소재 상호작용 기반 디스플레이 핵심소재 개발('16~'22), 결정화학 엔지니어링 기반 분자운동성 이온결정 소재 개발('16~'22), 파지 메타물질 기반의 시각 증진용 소재 개발('17~'23) 등
 - 이를 통해 논문, 특허 등에서 우수한 성과를 창출 중이나, 데이터 활용을 통한 미래소재 개발 단계 3가지('탐색·설계'-'측정·분석'-'공정설계') 단계 중 '탐색·설계' 과정에 연구가 집중되어 이루어져 있다는 한계가 존재
- 소재 연구데이터 플랫폼(과기정통부, '20~'27)은 신소재 연구개발 효율화 및 새로운 부가가치 창출을 위한 혁신적 연구방법론이 급부상함에 따라 '20년부터 국가 소재 연구데이터 공유와 활용을 위한 플랫폼 구축에 착수, '22년 5월 오픈
 - 플랫폼 구축, 나노·소재 연구데이터 수집·저장, 국가 R&D사업 데이터 수집 및 플랫폼간 연계를 위한 가이드라인 수립, 연구 논문데이터 표준화 및 템플릿 작성·활용, AI 활용 서비스 기반 마련 등의 성과 창출 중
 - 그러나 연구자와 수요자 활용을 위한 서비스 개발이 필요하며 축적되는 데이터의 양 부족으로 공백 영역 발생, 연구 공정끼리의 연계성 부족 등의 문제점을 가지고 있음



< 그림 11 > 소재 연구데이터 플랫폼 서비스 개념도

※ 출처: 과기정통부 보도자료(2022.05.19.). 소재 연구데이터 수집·활용을 위한 ‘국가 소재 데이터 스테이션(K-MDS)’ 오픈

- AI 기반 초임계 소재*(연세대, '20~ '27)는 산업기술알키미스트프로젝트(산업부, '22~'31) 사업의 과제로, AI를 활용한 데이터 기반 소재개발 연구를 바탕으로 미래 모빌리티에 사용될 가능성이 큰 초임계 소재들(초고장력강** 및 초이온전도체***)을 개발 중

* 인공지능(AI)을 기반으로 설계, 제조, 평가 등 공정 단계를 통합 설계해 이론 물성의 임계치(70%) 이상을 가지는 소재

** 연질의 조직에 경질조직을 첨가해 강도를 높인 것으로, 미래 모빌리티의 보강재 및 배터리 케이스를 경량화하고, 차량 충돌 시 승객 안전성을 확보 가능할 것으로 기대

*** 이동성이 높은 이온을 가진 고체 전도체로, 높은 에너지밀도 및 안전성을 확보할 수 있는 미래 모빌리티용 전고체 전지를 개발하는데 필요

- 연구팀은 AI 기술을 도입하는 한편, 소재의 설계, 제조, 분석 및 평가 단계를 아우르는 ‘통합 AI 플랫폼*’을 구축

- ** 계산데이터뿐만 아니라 실험데이터까지 활용하고, 1개 이상의 물성을 목표로 할 수 있는 재료설계뿐만 아니라 실제 공정조건까지 설계
- 새로운 연구방법론 활용을 통해 목표 물성을 5년이라는 단기간에 달성 가능할 것으로 기대되며, 미래 항공소재, 국방소재, 연료전지 부품, 차세대 에너지저장시스템 등 고부가가치 영역에서 부가가치 창출 전망



< 그림 12 > AI 기반 초임계 소재 과제 개념도

※ 출처 : Forbes(2022.5.23.). [알키미스트 프로젝트] AI 기반 초임계 소재 | 연세대 이영국 교수. <https://jmagazine.joins.com/forbes/view/336123>

- 이 외에도 한국과학기술연구원(KIST)은 2017년부터 촉매 및 전지 소재에 대해 기계학습을 통한 신소재 설계를 위한 기초 사업을 수행 중이며, 한국화학연구원(KRICT)은 화학데이터의 수집 플랫폼 구축과 열전 및 유기태양전지 데이터 수집을 통해 소재 예측과 개발에 필요한 기초 사업을 수행 중
- 산업계에서도 AI를 활용한 소재개발 연구에 관심을 가지고 활발히 진행 중

- LG사이언스파크는 ‘20년 9월부터 캐나다의 토론토대학교와 맥마스터대학교, 프랑스 에너지·석유회사 토탈(Total)과 함께 ‘AI 기반 소재 개발 컨소시엄(A3MD, The Alliance for AI-Accelerated Materials Discovery)’을 결성*, 친환경 촉매, 차세대 소재 등 화학소재 개발을 목표로 공동연구를 시작

* 글로벌 최고 수준의 학계와 산업계가 참여하는 세계 최초 AI 연합으로, 화학소재 분야에 인공지능 및 로봇기술을 활용

※ 출처 : 융합연구정책센터(2021). 융합연구리뷰

- LG AI 연구원은 다양한 분야에 데이터와 인공지능 기술을 활용하여 물질 개발을 가속화

- 바이오 분야는 환자 개인 맞춤형의 면역 항암 치료제 개발에 대한 것으로, 무수히 많은 실험 데이터를 확보하여 AI 모델을 학습시키고 유력한 후보 물질을 찾은 결과 바이오 분자 간의 상호 결합을 예측할 수 있는 어텐션 기반의 AI 모델을 개발, 기존 모델을 상회하는 예측 정확도를 달성
- 전자재료 분야는 OLED 디스플레이에 사용되는 발광재료 개발로, 발광 재료 탐색에 AI를 활용하여 이전보다 월등히 빠른 시간 안에 후보 물질을 탐색, 좋은 성능이 예상되는 후보 재료를 선별함

※ 출처 : LG AI 연구원(2021.12.14.). 『LG AI Talk Concert - The Best of 2021』 으로 살펴본 LG AI연구원의 현재와 미래. <https://www.lgresearch.ai/news/view/?seq=163>

- 최근에는 연구자들의 모델링, 단순한 반복 작업 등을 최소화하고 성공 확률이 높은 실험을 선별함으로써 소재 개발의 효율성을 제고하는 ‘엑사원 디스커버리*’라는 플랫폼을 개발, 범용 AI에 도전

* 논문에서 과학 지식을 자동으로 추출하고, 분자 구조나 화학 반응의 결과를 단시간에 예측

※ 출처 : 전자신문(2023.10.4.). [ET단상] AI와 소재과학: 새로운 과학적 발견의 기대. <https://www.etnews.com/20231003000033>

- 삼성전자는 사회적, 과학적 문제를 해결하기 위해 인공지능 기반의 소재 설계에 높은 관심을 가지고 있으며, 삼성 AI 포럼 2021에서

최근 분자의 핵심 특성을 예측하는 인공지능 알고리즘 개발 성공 소식을 발표

- 최신 DFT(Density Functional Theory)는 시뮬레이션 분자특성을 평가하는데 몇 시간이 걸리지만, 삼성이 개발한 딥러닝 모델은 수 초안에 특성을 빠르게 평가가 가능하며 새로운 분자구조를 설계하는 기술개발 가능
- 유기분자 합성을 위한 자동화 물질 개발 플랫폼도 개발 중으로, 현재 합성과 검증을 위해 로봇기술이 적용된 자동화된 화학실험을 수행하고 있음
- 삼성종합기술원은 지금까지 축적한 경험과 전문가 지식, 데이터를 통합해 반도체, 디스플레이, 배터리 소재 설계에 활용 중

※ 출처 : AI타임스(2021.11.01.). [삼성 AI 포럼 2021] 새로운 소재 개발에 드는 막대한 시간, 이제 인공지능으로 극복한다.
<https://www.aitimes.com/news/articleView.html?idxno=141300>

iris

2.2.2. 국외 동향

- 데이터 과학 및 AI의 비약적인 발전을 바탕으로 새로운 소재의 발견과 개발을 보다 효율적이고 협력적이며 혁신적으로 만들기 위한 글로벌 노력이 활발히 진행 중
 - 재료 과학, 물리학, 화학, 컴퓨터 과학 등을 융합한 학제 간의 협업 증가 추세
 - 각국의 연구결과물 공유 정책 확대에 따라 전 세계 연구자들에게 데이터 공유 및 오픈 사이언스 문화 장려
- 머신 러닝과 AI, 자동화된 실험, 양자 컴퓨팅, 데이터 프레임워크 등의 연구 트렌드에 주목
 - 머신 러닝 알고리즘을 활용하여 재료 특성을 예측하고 기존 데이터 세트를 기반으로 새로운 재료를 발견하거나 AI와 결합된 자동화된 실험을 통해 실험 프로세스 가속화
 - 데이터의 수집량뿐만 아니라 품질, 일관성, FAIR*(Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) 원칙을 보장하기 위한 새로운 프레임워크 개발 노력
 - * '16년 Scientific Data에 발표된 논문에서 제시된 원칙으로 데이터를 찾고, 접근하고, 상호 운용하고, 재사용할 수 있는 전산 시스템의 능력을 강조
 - ※ 출처 : Wilkinson, M. D. et al.(2016). The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship.
- 제품의 특정 성능 기준을 충족하는 맞춤형 소재 개발에 대한 업계의 관심 증가로 재료 인포매틱스(materials informatics) 역량 강화를 위한 투자 증가
 - 항공우주, 자동차, 제약, 전자 등의 분야에서 경쟁 우위를 확보 및 다양한 조건에서의 재료 거동 예측, 공급망 운영을 최적화하기 위해 재료 정보학 활용
 - 재료 연구 데이터 관리, 소재 개발 시뮬레이션 및 결과 예측을 위한 AI 기반 상용 플랫폼 개발* 추세
 - * Citrine Informatics, Kebotix, Schrödinger, Materials Design, AI Materia, Uncountable, Mat3Ra, MaterialsZone 등

< 표 4 > FAIR 원칙

- FAIR Principle¹⁾은 과학 데이터의 재사용성을 촉진하고 연구에 대한 투자수익을 극대화하기 위해 제정되었으며 재료 과학 및 소재정보학 연구에서도 중요성 부각²⁾³⁾
- Findable (검색 가능): 데이터는 사람과 컴퓨터 모두 쉽게 찾을 수 있어야 하며, 속성이 명확하게 정의되어 있어야 하고, 데이터베이스와 같이 검색 가능한 리소스에 등록 필요
 - 데이터베이스: NOMAD, Material Project, AFLOW, OQMD와 같은 플랫폼은 머티리얼 속성에 대한 계산 데이터를 쉽게 검색할 수 있도록 설계
 - 고유 식별자: 재료 데이터 세트에 고유 식별자를 할당하면 효율적으로 검색 가능
 - 메타데이터: 데이터에 대한 조건, 방법 및 기타 관련 정보를 자세히 설명하는 적절한 메타데이터를 통해 데이터 세트를 정확하게 검색 가능
- Accessible (접근성): 데이터가 발견되면 표준화된 통신 프로토콜을 통해 쉽게 액세스할 수 있어야 하며 적절한 인증 및 권한 부여 절차가 마련되어 데이터 보안 보장 필요
 - 오픈 액세스 플랫폼: 많은 이니셔티브는 데이터 액세스를 위한 명확하고 표준화된 프로토콜을 통해 데이터에 대한 개방형 액세스를 제공하기 위해 노력
 - 인증 및 권한 부여: 일부 데이터는 민감하거나 독점적일 수 있지만, 적절한 권한 부여를 통해 액세스 조건이 충족되면 불필요한 장벽 없이 데이터에 쉽게 액세스할 수 있어야 한다는 원칙 강조
- Interoperable (상호 운용성): 데이터는 다른 데이터 세트와 쉽게 통합되고 데이터 분석, 저장 및 처리를 위한 애플리케이션 또는 워크플로우에서 쉽게 사용가능 필요
 - 표준화된 데이터 형식: 표준화된 형식을 따르는 데이터는 다른 데이터 세트와 더 쉽게 통합하고 조합하여 사용가능⁴⁾
 - 어휘 및 온톨로지: 유럽 재료 및 모델링 온톨로지(EMMO)와 같이 같은 공유 어휘를 통해 다양한 맥락에서 데이터를 쉽게 이해하고 사용가능⁵⁾
 - 데이터 세트 간 링크: 서로 다른 데이터 집합 간에 관계형성을 통해 보다 통합적이고 심층적인 분석 가능
- Reusable (재사용 가능): 데이터가 풍부하게 기술되어 시간이 지나도 그 가치를 유지해야 하며, 다른 연구 질문에 재사용 가능 필요
 - 명확한 라이선스: 데이터 집합에는 재사용 방법, 조건 및 적절한 속성에 대한 명확한 정보가 포함 필요
 - 데이터 출처: 데이터가 어떻게 생성, 처리, 검증되었는지에 대한 정보는 다양한 상황에서 연구자가 안심하고 재사용할 수 있도록 보장

미국

□ 연방국립연구소 및 대학의 R&D 인프라를 활용하여 다양한 소재 물성 정보 데이터베이스 구축

- Materials Project는 국립 연구소들의 슈퍼컴퓨팅 클러스터*를 활용하여 계산, 데이터 및 알고리즘을 비교할 수 없는 속도로 실행할 수 있는 소재 물성 데이터베이스 구축

* 로렌스 버클리 국립연구소의 NERSC 과학 컴퓨팅 센터와 계산 연구 부서를 주축으로 오크 리지 연구소의 OLCF, 아르곤 국가연구소의 ALCF, 샌디에이고 대학의 SDSC와도 활발히 협력

- 모든 무기 재료의 특성을 계산하고 데이터 분석 관련 알고리즘을 사용자에게 무료로 제공
- 많은 비용 및 시간이 소요되는 실험을 계산적으로 가장 가능성이 높은 화합물에 집중함으로써 새로운 물질을 발명하는 데 필요한 시간을 획기적으로 단축
- 플랫폼의 데이터를 사용하여 탄소 포집, 형광체, 광촉매, 자기 열전학 및 열전 등 다양한 응용 분야를 포함한 많은 재료의 실제 합성 및 특성 분석에 성공

※ '23년 9월 기준, 15만 4천 건의 소재 계산물성 제공, 38만 명 이상 사용자 등록, 1만 9천 건 이상 피인용 실적

- 프로젝트의 주 재원은 미국 에너지부(DOE) 과학국의 기초 에너지 과학(BES) 및 첨단 과학 컴퓨팅 연구(ASCR) 프로그램과 에너지 효율 및 재생 에너지국(EERE)의 배터리 재료 연구(BMR, 이전 BATT)

1) <https://www.go-fair.org/fair-principles/>.

2) Barker, M., Chue Hong, N.P., Katz, D.S. *et al.* (2022). Introducing the FAIR Principles for research software. *Sci Data* **9**, 622

3) Scheffler, M., *et al.* (2022). FAIR data enabling new horizons for materials research. *Nature* **604**, 635-642

4) 관련 링크 Crystallographic Information Framework, <https://iucr.org/resources/cif/>, Core Scientific Metadata Model, <http://icatproject-contrib.github.io/CSMD/>, NeXus (<https://nexusformat.org/>)

5) 관련 링크 NIST(<https://data.nist.gov/od/dm/nerdm/>), Materials Ontologies RDA Task Group (<https://rd-alliance.org/>), EMMC (<https://emmc.info/>), OPTIMADE(<https://optimade.org/>), FAIRmat(<https://FAIRmat-NFDI.eu/>)

프로그램을 통해 지원

- MGI의 중추적 추진 기관인 표준과학기술연구원(NIST)은 재료 관련 데이터 검색, 다운로드 및 표준화 뿐만 아니라 연구자 커뮤니티에서의 데이터의 공유 및 재사용을 촉진하기 위한 각종 데이터베이스 구축 운영
- 대표적인 Materials Resource Registry는 재료 연구와 설계에 유용한 데이터 컬렉션, 도구, 소프트웨어 및 서비스의 포괄적인 인벤토리 제공

< 표 5 > NIST 주요 데이터베이스

데이터 베이스	주요 기능
Materials Resource Registry (https://materials.registry.nist.gov/)	데이터 세트의 등록 및 검색뿐만 아니라 소프트웨어, 프로젝트 및 재료 과학과 관련된 조직을 등록하고 검색할 수 있도록 구축된 연합 레지스트리
NIST Materials Data Repository (https://materialsdata.nist.gov/)	재료 데이터 공유 및 재사용을 촉진하기 위한 범용 데이터베이스로 광범위한 큐레이션을 거치지 않은 데이터라도 다른 사람이 사용할 수 있도록 제공 ※ 공공 서비스로 제공되는 이 데이터에 대해 NIST는 책임소재가 없음을 명시화
NIST Schema Repository and Registry (https://schemas.nist.gov/)	재료 관련 스키마, 데이터 모델, 온톨로지 등의 검색, 액세스 및 재사용을 개선하기 위해 운영되는 서비스
Materials Data Curation System (https://mdcs.nist.gov/)	Configurable Data Curation System을 통해 비정형 데이터를 구조화된 형식으로 변환하여 데이터 분석에 즉시 액세스할 수 있는 잘 구조화된 형태의 데이터를 제공, 재료 데이터를 캡처 및 공유하여 XML 기반 또는 다른 형식으로 전환 가능하도록 구조화된 형식으로 변환
TRC Alloy Data (http://trc.nist.gov/metals_data)	공개된 실험 열물리 및 열화학적 특성 데이터 모음
PhaseData Repository (https://phasedata.nist.gov/)	다양한 0차원, 1차원, 2차원, 3차원 계산 및 실험 데이터가 포함되어있으며 현재는 확산 데이터와 다 성분 실험 데이터에 중점
High-Throughput Experimental Materials Collaboratory (https://mgi.nist.gov/htemc)	현재 고처리량 실험(HTE)을 할 수 없는 연구자들의 접근성을 높이고 실험 데이터 세트의 가용성을 더욱 확대하기 위해 추진

□ 머신러닝 및 AI와 재료과학의 효율적인 접목을 위해 새로운 데이터 생태계 구축 노력

- 고처리량 실험 방법론이 MGI의 목표를 효과적으로 달성하려면 생성되는 수많은 데이터를 큐레이팅, 분석, 마이닝하여 가치있는 지식으로의 전환 필요

※ 출처 : M. L. Green, C. L. Choi, J. R. Hattrick-Simpers, A. M. Joshi, et al. (2017). Fulfilling the promise of the materials genome initiative with high-throughput experimental methodologies.

- NIST 산하의 Center for Hierarchical Materials Design 주도로 소재 데이터를 등록/공유/검색할 수 있는 플랫폼 Material Data Facility(MDF) 구축

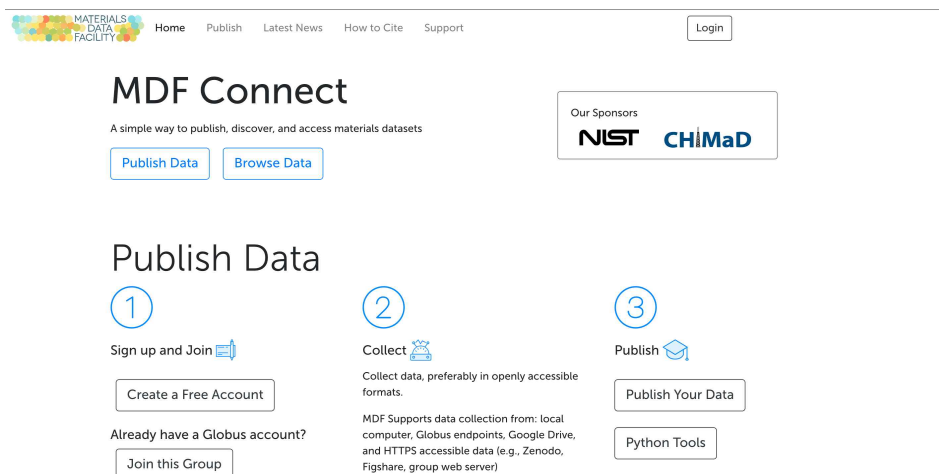
※ 유사한 오픈 액세스 데이터 공유/등록 플랫폼으로는 Zenodo, Materials Cloud가 있음

- MDF는 개방형 데이터 공유 촉진 및 재사용 장려를 위해 데이터 큐레이션 워크플로를 단순화하고 효율적인 데이터 검색 서비스 등을 개발

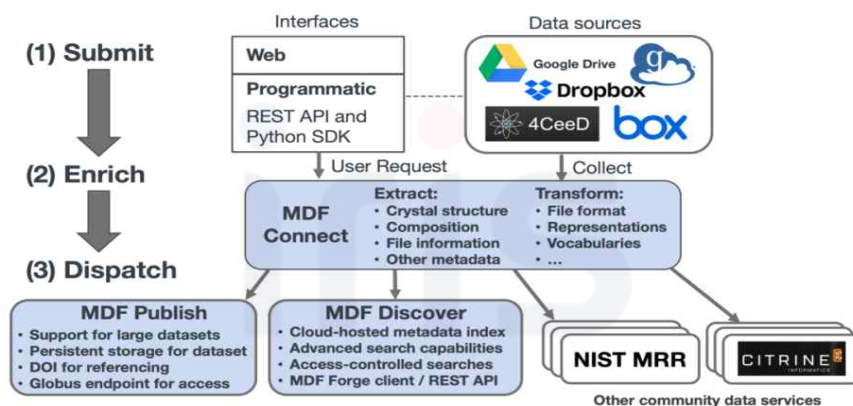
※ 과학적 데이터의 활용성을 극대화하기 위해 사용자가 원하는 데이터를 쉽게 찾을 수 있는 기능뿐 아니라 데이터를 검증하고 이용할 수 있는 체계 필요

- 따라서, MDF 서비스를 통해 개별 연구원 및 기관은 제3자의 도움 없이 원하는 형태와 장소에 데이터를 공유할 수 있으며, 다른 사용자들은 MDF에서 제공하는 자동화된 도구 등을 사용하여 원하는 데이터를 찾아 새로운 소재 및 제품에 개발에 활용 가능

※ 자동화, 분석 및 피드백을 촉진하기 위해 REST(Representational State Transfer) API(응용 프로그램 인터페이스)를 통해 게시된 데이터 및 메타데이터와 상호 작용



< 그림 13 > Material Data Facility



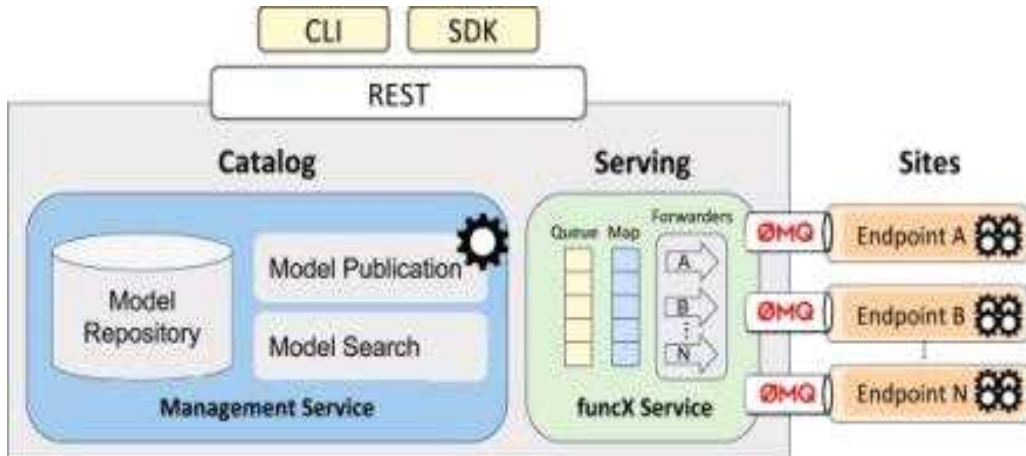
< 그림 14 > Material Data Facility 서비스 개요

※ 출처 : <https://materialsdatafacility.org/>

- 국립 아르곤 연구소 지원 하에 머신 러닝 모델 검색, 공유, 게시, 실행 및 학습 데이터 발견을 위한 플랫폼 Data Learning Hub(DLHub) 구축
- 모델 개발 및 데이터 추론 중심의 다른 시스템과 달리 사용가능한 다양한 컴퓨팅 리소스에서 데이터 모델을 게시하고 공유하고 활용할 수 있는 플랫폼을 제공에 초점

※ 데이터 제공자(MDF)와 AI 모델 제공자(DLHub) 간의 인터페이스를 원활하게 하기 위한 시스템 마련

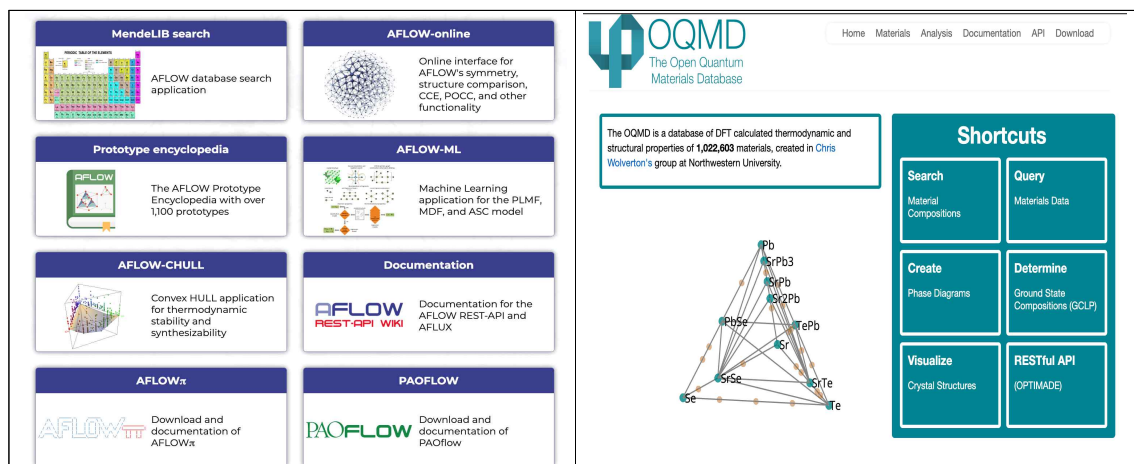
- DLHub는 클라우드, 클러스터, 슈퍼컴퓨터를 포함한 다양한 분산 컴퓨팅 리소스에서 다양한 유형의 모델을 제공할 수 있는 고유한 모델 제공 인프라를 제공



< 그림 15 > DL Hub 개요

- Automatic-FLOW for Materials Discovery(AFLOW)는 다양한 온라인 계산 프레임워크의 개발, 서비스 및 유지를 목표로 여러 대학 연구 컨소시엄*으로 추진
 - * 미국 듀크 대학교의 Stefano Curtarolo 연구팀을 중심으로 뉴욕 주립대, 매릴랜드 대학, UC 샌디에고 등과 협력
- 무기 화합물의 양자, 열, 구조 및 탄성 특성에 대한 데이터, 특성 분석에 사용되는 고처리량 오픈 소스 코드, 데이터 분석 도구 제공*
 - * '23년 현재 353만개 화합물에 대한 7.3억 건 이상의 계산물성 데이터 제공
- REST-API WIKI를 통해 전 세계 연구자들 간에 데이터, 아이디어 및 연구 이니셔티브를 공유할 수 있는 “collaboratory”를 주최
- The Open Quantum Materials Database(OQMD)는 노스웨스턴 대학의 Chris Wolverton 연구팀이 주도하는 데이터베이스로 재료의 열역학적 및 구조적 특성을 밀도범함수이론(Density Function Theory)으로 계산
 - 지금까지 알려지지 않은 열전 재료를 검색하기 위해 높은 처리량 연구를 수행할 수 있는 수단을 제공

- 무기 결정 구조 데이터베이스(ICSD)의 화합물 및 일반적으로 발생하는 결정 구조에 대한 약 30만 개의 계산 데이터 제공

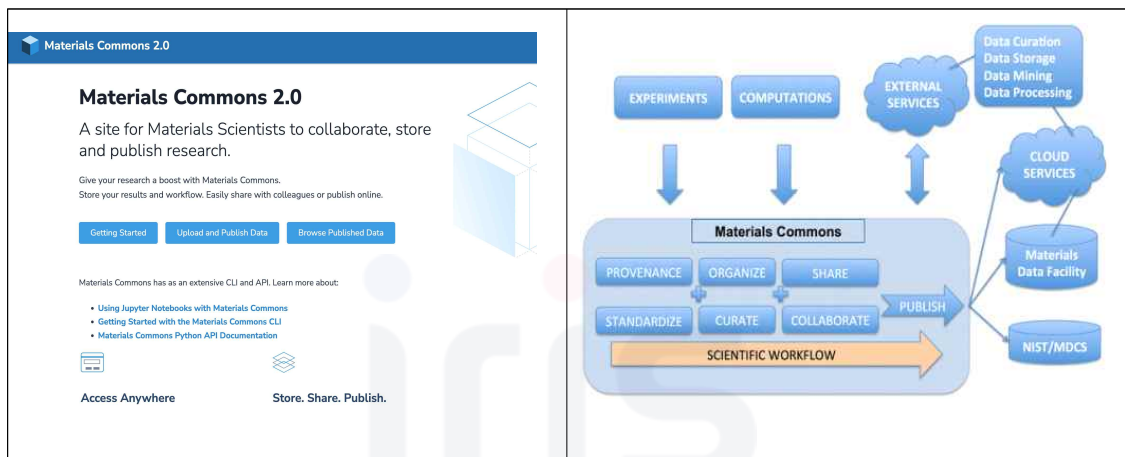


< 그림 16 > 특성화된 데이터베이스에서 제공되는 서비스 예시 : AFLOW와 OQMD

- Polymer Property Predictor and Database는 Center for Hierarchical Materials Design 주도로 고분자 특성을 자동으로 추출하는 정보 추출 파이프라인을 개발하여 고분자 정보학에 필요한 데이터 제공
- 자연어 처리 소프트웨어(ChemDataExtractor)를 사용하여 저널 논문에서 화학 실체의 이름과 특성을 자동으로 추출
- 산업계의 신소재 개발에 기여하는 것을 목적으로 금속 및 폴리머에 걸친 다양한 소재 설계 방법론을 시연
- '02년 NSF 지원으로 구축된 nanoHUB는 나노기술, 재료과학 및 관련 분야의 전산 교육, 계산과학 연구 및 협업을 위한 개방형 무료 온라인 플랫폼으로 운영 중
- 수행된 나노허브 프로젝트의 플랫폼 기술을 사용하여 바이오, 의료 등의 과학 분야뿐 아니라 커뮤니티 웹사이트, 데이터 공유센터 등 다양한 분야의 플랫폼을 제공하는 허브 개념의 프로젝트 운영
- ※ '23년 9월 기준으로 연간 160만 이용자, 172개 국가에서 3,500명 이상의 연구성과 제공, 약 600개 시뮬레이션 코드 리소스 등록, 100개 이상의 교육코스 제공

- Materials Commons는 실험 및 계산에서 얻은 데이터를 큐레이팅, 저장 및 배포하기 위한 새로운 정보 저장소 및 가상 협업 공간으로 에너지부 산하 Center for PRedictive Integrated Structural Materials Science(PRISMS Center)가 구축 운영 중
- 재료 연구자들이 실험 및 계산 재료 데이터를 공동으로 저장, 공유, 큐레이팅, 분석, 게시 및 재사용할 수 있는 협업 공간이자 정보 저장소*로 제공

* 정보 저장소의 기본 데이터 모델이 재료 데이터, 워크플로 및 분석에 맞게 조정



< 그림 17 > 소재 정보 시스템에서의 Materials Commons

※ 출처 : Puchala, B., Tarcea, G., Marquis, E.A. et al. (2016). The Materials Commons: A Collaboration Platform and Information Repository for the Global Materials Community.

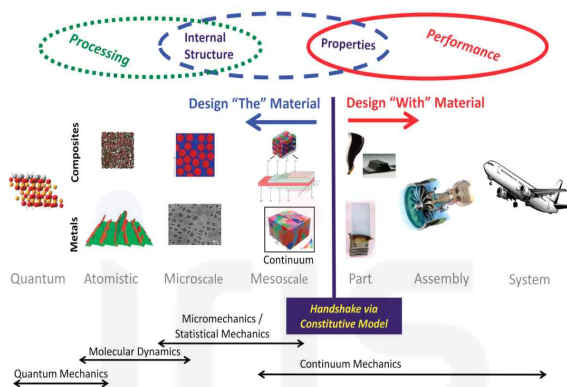
- 이외에도 Matterverse.ai는 머신러닝 알고리즘이 예측한 특성을 가진 3천만 개 이상의 아직 합성되지 않은 재료 데이터베이스 제공*
 - * 단백질 구조 예측 AI 알고리즘 AlphaFold(Google DeepMind)를 벤치마킹하여 UC San Diego 연구팀 개발
- NASA에서는 미래 항공우주 및 항공 시스템의 혁신 속도를 가속화하고 비용을 절감하기 위해 재료 및 시스템의 통합 멀티스케일 모델링에 필요한 예측 연구 수행
- 재료 및 시스템의 통합된 모델링에 필요한 기술과 인프라를 확보하기 위한 미래 전략 연구를 수행

< 표 6 > NASA의 소재 관련 2040 비전 로드맵

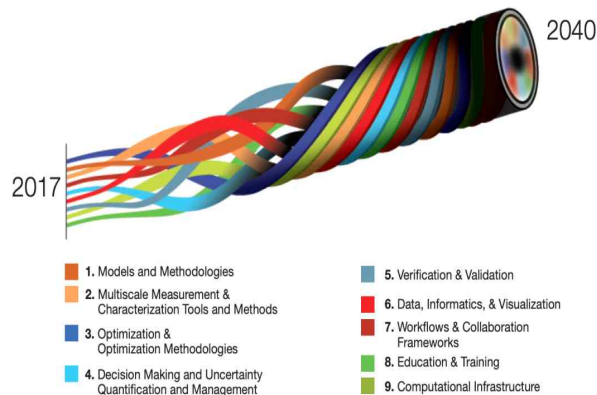
Vision 2040: A Roadmap for Integrated, Multiscale Modeling and Simulation of Materials and Systems('18 발표)⁶⁾

- 비전 2040 이니셔티브는 Integrated Computational Material Engineering (ICME)*에 뿌리를 둔 디자인 미래로의 광범위한 전환의 일환으로 재료 커뮤니티를 재료로 설계하는 과거의 패러다임에서 재료 자체를 설계하는 미래 모델로의 전환을 강조

* 통합 전산 재료 공학(ICME)은 다양한 길이 스케일에서 실험적으로 검증된 재료 모델을 연결하여 제품 및 제품을 구성하는 재료를 설계하는 접근 방식



- 비전 2040을 통해 궁극적으로 통합되어야 하는 9가지 핵심 요소 도메인을 식별하여 모델 및 방법론, 멀티스케일 측정 및 특성화 도구 및 방법, 최적화 및 최적화 방법론, 의사 결정 및 불확실성 정량화 및 관리, 확인 및 검증, 데이터 및 정보 및 시각화, 워크플로우 및 협업 프레임워크, 교육 및 훈련, 컴퓨팅 인프라 등 제시



6) <https://ntrs.nasa.gov/citations/20180002010>

□ MGI 기반의 학교 커리큘럼 개설 및 인력 양성 노력 추진

- 텍사스 A&M 대학에서 추진 중인 Data-Enabled Discovery and Design of Energy Materials(D3EM)은 현재 재료 과학, 정보학 및 디자인에 관한 학제 간 대학원 자격증으로 해당 대학의 이공계 단과대학 내 6개 학과에 걸쳐 운영 중
 - 재료 과학, 정보학, 엔지니어링 설계 이론 및 STEM 대학원 교육 전문가로 구성된 팀을 모아 학제 간 분야의 연수생을 교육하기 위한 혁신적인 프로그램을 구성
 - 학제 간 팀 내에서 효과적으로 의사소통하고 협업하고 이끌 수 있는 전문적이고 기술적인 기술을 갖춘 과학자/엔지니어를 배출하는 새로운 교육 모델을 개발
 - D3EM은 재료 과학, 정보학 및 엔지니어링 디자인 분야의 석사 및 박사 학제 간 프로그램 개발을 위한 기반을 제공하고 국립 연구소 및 산업계와의 협력을 통해 다양한 인턴십* 기회를 마련
- * 공군 연구소(AirForce Research Laboratory)와 협력하여 데이터 기반 재료 발견 프로그램 운영

Data-Enabled Discovery and Design of Energy Materials (D³EM)

SIX DEPARTMENTS • THREE DISCIPLINES • ONE VISION

Building a collaborative framework for the accelerated development of materials through materials science, informatics, and engineering design.



< 그림 18 > MGI 기반의 교육 커리큘럼 예시

※ 출처 : <https://d3em.tamu.edu/>

- NSF 지원 From Learning, Analytics, and Materials to Entrepreneurship and Leadership Doctoral Traineeship (FLAMEL) 연수 프로그램 운영('23년 3월 폐지)
 - 학생들에게 컴퓨팅, 수학, 재료 과학 분야의 학제간 교육을 제공하는 동시에 신소재를 글로벌 시장용 제품으로 개발하기 위한 기업가적 접근 방식을 교육
- NASA와 NIST, DOE의 국립 연구소는 학부생과 대학원생에게 연구 경험을 제공하는 프로그램*을 통해 데이터 기반 재료 연구 기회 제공
 - * Pathways Internship Program, the Science Undergraduate Laboratory Internship (SULI) program, the Science Graduate Student Research (SCGSR) program 등에 주요 연구분야로 데이터 기반 재료 연구가 포함



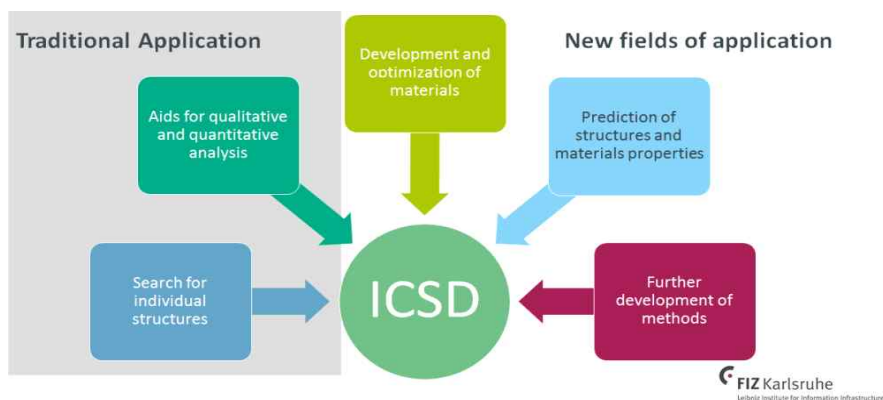
유럽

- 유럽기관들의 주도 하에 전 세계적으로 가장 규모가 큰 소재 및 소재구조정보 데이터베이스 구축
 - Inorganic Crystal Structure Database(ICSD)는 FIZ Karlsruhe의 주도 하에 수집된 세계 최대의 무기재료 결정구조 데이터베이스로 원자 좌표를 포함하여 1913년 이후 발표된 거의 모든 알려진 무기 결정 구조의 목록 제공
 - '23년 4월 기준, 281,626 개의 소재가 등록되어 있으며, 해마다 평균 12,000개 이상의 새로운 소재들과 관련 정보들이 추가되며 퀄리티 검증*을 받은 정보만이 등록
 - * 구조가 완전히 설명되어야 하고, 원자 좌표가 결정되었거나 알려진 구조 유형에서 파생될 수 있어야 하며, 구성이 완전히 명시되어야 데이터베이스에 포함 가능



< 그림 19 > ICSD 등록 정보

- 과거 ICSD는 주로 개별 구조를 검색하고 분석을 보조하는 데 사용되었으나, 신소재 개발 및 최적화, 소재 특성 예측 등에 활용
 - ※ 이를 위해 초록 및 키워드와 같은 새로운 콘텐츠가 통합



< 그림 20 > ICSD 특징

- Crystallography Open Database(CSD)는 영국 Cambridge Crystallography Data Centre의 주도 하에 1965년부터 수집된 세계 최대의 유기물 구조 데이터베이스로 작은 유기물 분자들이나 금속-유기물 화합물에 대하여 구조 정보를 축적
- 유료로 운영되며 라이선스 형식으로 제공, 데이터베이스뿐만 아니라 데이터 관리, 컨설팅 서비스 제공
- 현재 백만 개가 넘는 소재들이 등록되어 있으며, 해마다 출판 자료를 기반으로 평균 30,000개 이상의 새로운 소재들이 추가 등록

Number of Curated Entries in CSD 1,278,345	Unique Curated Structures in CSD 1,248,804	Unique Author Names 485,137	Unique Publications 584,878
CSD Communications 54,544	Number of Refcode Families 1,146,891	Number of Polymorph Families 13,426	Structures with Melting Points 177,918

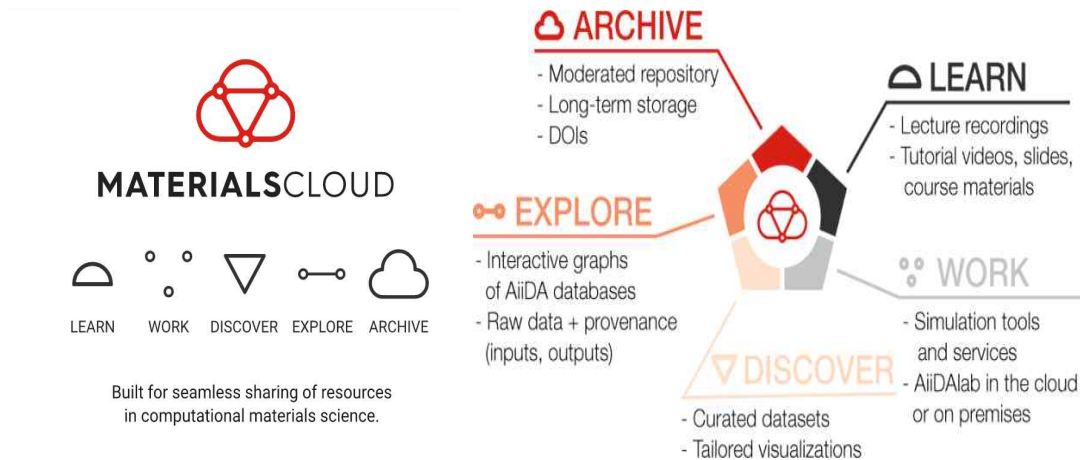
< 그림 21 > CSD의 등록 정보

- '20년 7월, 유럽 생물정보학 연구소(EBI)에 기반을 둔 유럽 단백질 데이터 은행(PDBe) 및 ChEMBL과 협업하여 여러 연구 분야에서 중요한 역할을 하는 데이터 세트를 한데 모아 쉽게 액세스할 수 있는 웹 플랫폼 구축을 위한 BioChemGRAPH 프로젝트 시작

< 표 7 > BioChemGRAPH 프로젝트의 데이터베이스

데이터베이스	관리	종류	사이즈
PDBe (유럽의 단백질 데이터 은행)	EMBL-EBI 유럽 생물 정보학 연구소	생물학적 고분자 구조, 단백질 구조	2000년 이후 PDB 네트워크에 기탁된 174,448개의 단백질 구조
ChEMBL	EMBL-EBI	저분자, 2D 구조, 계산된 특성 및 추상화된 생체 활성	1,961,462개의 고유 화합물
CSD (캠브리지 구조 데이터베이스)	CCDC 캠브리지 결정학 데이터 센터	소분자, 유기 및 금속-유기 화합물의 3D 결정 구조	1,064,756개의 구조

- Chem Spider는 Royal Society of Chemistry(RSC)를 주도 하에, 1억 개가 넘는 구조, 특성 및 관련 정보에 빠르게 액세스할 수 있는 무료 화학 구조 데이터베이스
 - 수백 개의 고품질 데이터 소스의 화합물을 통합하고 연결함으로써 연구자들은 한 번의 온라인 검색으로 무료로 제공되는 화학 데이터를 가장 포괄적으로 분석 가능
- Materials Cloud는 계산 과학을 위한 리소스를 개방적이고 원활하게 공유할 수 있도록 설계된 개방형 플랫폼 제공
 - 교육, 연구 및 아카이빙 도구, 시뮬레이션 소프트웨어 및 서비스, 큐레이션 및 원시 데이터를 제공하여 전산 재료 과학 분야의 리소스를 원활하게 공유하고 배포할 수 있도록 구축

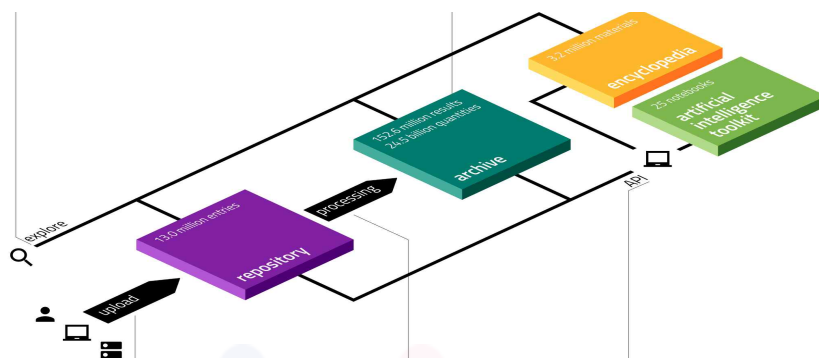


< 그림 22 > Materials Cloud 개요

– 이 프로젝트의 비전은 '10년 FET MARVEL Flagship의 지원으로 시작되었으며 '13년 스위스 국립과학재단 SNSF MARVEL NCCR, '15년 H 2020 MaX Center of Excellence(MAterials design at the eXascale*)를 통해 구체화

* 현재와 미래의 고성능 컴퓨팅(HPC), 고처리량 컴퓨팅(HTC) 및 데이터 분석 기술의 최전선에서 재료 모델링, 시뮬레이션, 발견 및 설계를 지원하는 유럽 우수 센터(European Centre of Excellence)로 재료의 양자 시뮬레이션 분야에서 가장 성공적이고 널리 사용되는 오픈 소스 커뮤니티 코드를 엑사스케일 및 극한 확장 성능으로 제공

- Novel Materials Discovery(NOMAD) Repository는 5억건 이상 데이터를 보유하고 있으며 기본적인 인공지능 모듈과 활용 환경 제공
- '14년 말, NOMAD 연구소는 계산 재료 과학 데이터를 위한 최초의 FAIR 데이터 저장 인프라인 NOMAD 리포지토리 및 아카이브를 출범
- NOMAD의 서버와 스토리지는 독일 가르칭에 있는 막스 플랑크 컴퓨팅 및 데이터 시설(MPCDF)에서 호스팅



< 그림 23 > NOMAD 데이터베이스 개요

- 최근 머신러닝, 데이터 마이닝 등 AI를 활용하여 데이터 분석 및 예측 모델링 수행을 위한 NOMAD AI ToolKit 개발 출시

	홈페이지에서는 NOMAD AI ToolKit의 세 가지 목적 제시 – NOMAD 아카이브의 콘텐츠 쿼리(및 분석) – AI 도구에 대한 튜토리얼 제공, – 게시된 작업의 AI 워크플로에 액세스
--	--

< 그림 24 > NOMAD AI ToolKit

※ AI를 활용한 소재 데이터 분석 플랫폼으로는 nanoHUB, pyIron, AiidaLab, MatBench가 있음

< 표 8 > NOMAD Lab의 연혁

NOMAD Lab의 연혁 및 유관기관	
2014년 NOMAD Repository	- NOMAD 프로젝트는 베를린 아인슈타인 재단이 자금을 지원하는 양자 프로젝트의 일환으로 Claudia Draxl과 Matthias Scheffler(베를린 자유대학교)가 설립한 NOMAD 리포지토리에서 시작되어 2014년에 공개 - 그 이후로 NOMAD 인프리를 운영하고 있는 막스 플랑크 컴퓨팅 및 데이터 시설과 협력하여 공개적으로 사용 가능
NOMAD Center of Excellence  NOMAD CoE	'15년-'18년까지 HORIZON 2020 유럽 엑셀런스 센터 "The NOMAD Laboratory CoE" 내에서 크게 확장되었으며 이후 40개 이상의 컴퓨터 코드를 지원하며, NOMAD 백과사전 및 NOMAD AI 툴킷과 같은 서비스 제공 2020년 부터는 새로운 방향으로 계속되어 엑사스케일 성능과 극대규모 데이터 처리를 위해 초기 코드와 AI 툴을 제공 시작
2017년 FAIR-DI  FAIR-DI e.V.	2017년 독일과 네덜란드의 이니셔티브로 설립된 비영리 협회 FAIR-DI(FAIR Data Infrastructure)는 빠르게 국제적인 단체로 성장하여 유럽 회원기관과 함께 재료과학, 공학 및 천문학 데이터 인프라 추진
2021년 FAIRmat  FAIRmat	2021년 10월부터 NOMAD Lab의 주요 개발은 베를린 자유대학교의 NOMAD Data Center (NOMAD HUB)에서 이루어지며 응축 물질과 고체의 화학 물리학을 위한 독일 연구데이터 인프라(NFDI) 컨소시엄인 FAIRmat*를 호스팅하기 위해 설립 * FAIRmat는 실험 및 샘플 합성 데이터를 포함하도록 NOMAD의 범위를 확장
 NOVEL - MATERIALS DISCOVERY LABORATORY Fritz Haber Institute of the Max Planck Society	- FHI의 NOMAD 연구실은 Matthias Scheffler의 연구팀을 주축으로 열 및 전기 수송의 제 1원리와 인공지능 방법의 개발 및 적용에 중점을 두고있음 - Claudia Draxl의 연구팀과 함께 베를린 자유대학교(HU Berlin)의 IRIS Adlershof에서 연구하며 개별적으로 또는 공동으로 노마드 연구소의 발전에 기여

□ European Materials Modelling Council(EMMC)를 중심으로 개방형 혁신과 지식 공유 기반 마켓 플레이스의 개념을 적용하여 유럽의 소재 모델링 활동에 대한 단일 액세스 지점(온라인 게이트웨이) 구축 노력

○ 가상 재료 마켓 플레이스(VMMP, Virtual Materials Market Place)는 모든 재료 모델링 이해관계자 간의 교류를 촉진하기 위해 구축

– 소재 모델, 소프트웨어 도구, 커뮤니티, 번역 전문 지식 및 기타 교육 자료 제공을 중심으로 산업계의 수요에 맞춘 플랫폼

※ 플랫폼의 기능은 가능한 모델, 솔루션 방법, 문제 진술 등을 문서화하는 수많은 온톨로지 및 사전에 의해 제공되며 이러한 사전을 만들려면 해당 분야의 지식과 데이터 체계화 경험을 결합한 전문가의 참여가 필요

< 표 9 > 마켓 플레이스 플랫폼이 시장 참여자에게 제공하는 기회

시장 참여자	플랫폼 사용의 이점
모델 제작자	추가 모델 및 소프트웨어의 가용성, 고객 및 협력할 팀 검색
소규모 기업	새로운 지식, 전문 지식의 가용성
기업 연구 실험실	추가 리소스, 소프트웨어 사용 및 모델링
소프트웨어 공급업체 및 개발자	신규 고객 및 직원, 제품 테스트
통역사(번역가)*	신규 고객, 지식, 전문가 및 모델링 도구에 대한 접근성
강사 및 컨설턴트	모델링 도구의 데모 사용 가능성

※ 기본적으로 이들의 역할은 엔지니어링 환경에서 통용되는 언어에서 재료 과학에서 통용되는 언어로 당면한 작업을 번역하는 것

– 다양한 고객 요구 사항을 충족하는 제품 설계 요구 사항을 해결하므로 모델 개발자, 번역가 및 소프트웨어 공급업체를 포함한 전체 모델링 커뮤니티에 영향

○ 프라운호퍼 연구소를 중심으로 수행한 MarketPlace(Materials Modelling Marketplace for Increased Industrial Innovation) 프로젝트*는 파편화된 모든 재료 모델링 구성 요소를 수집, 조정 및 통합하고자 추진⁷⁾

7) <https://www.the-marketplace-project.eu/>

※ HORIZON 2020 프로젝트의 일환으로 9백만 유로 지원

- 정보 구성 요소뿐만 아니라 고급 재료 모델링 워크플로를 생성하고 적용할 수 있는 메커니즘과 서비스도 제공
- 이 모든 서비스는 외부의 고성능 컴퓨팅(HPC) 리소스 및 데이터베이스 웨어하우스(예: Zenodo) 등과 연결된 마켓플레이스 통합 웹 플랫폼에서 사용가능

The MarketPlace project

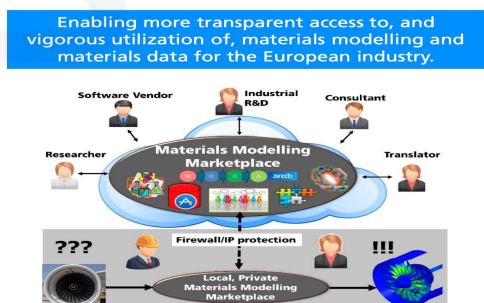
The key capabilities



The MarketPlace Platform

Fundamental concept of the MarketPlace Platform

- decentralized access to applications and disparate databases
- control and management of the extensive materials information
- data and knowledge scattered across Europe and beyond



< 그림 25 > Materials Modeling MarketPlace 프로젝트 및 플랫폼 개요

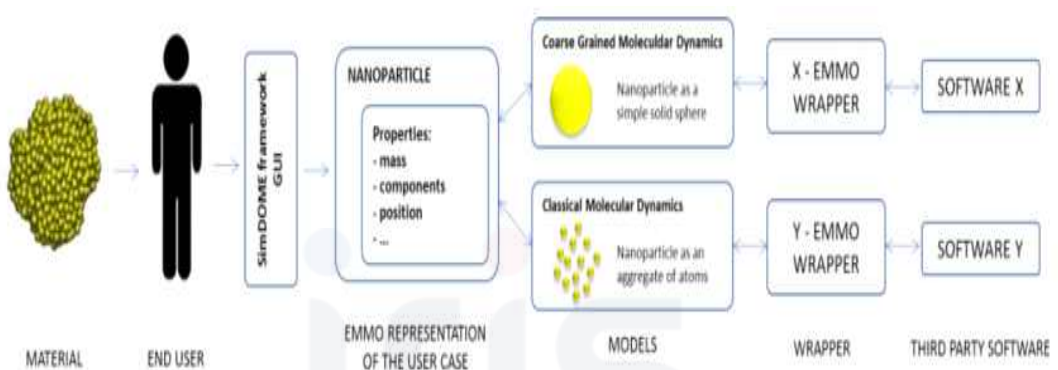
※ 이외에도 마켓플레이스의 상호 운용성 향상 및 온톨로지 개발을 위한 노력으로 SimDOME, ReaxPRO, OntoTrans, OntoCommons, Dome4.0, Optimade 등의 프로젝트와 연계

- European Materials Modelling Council과 HORIZON 2020 지원 하에 소재 모델링 상호 운용성 향상을 위한 온톨로지 개발, 사례 표준화 등 프로젝트 다수 추진

○ SimDOME 프로젝트⁸⁾는 유럽 재료 모델링 온톨로지(EMMO)*를 통해 소프트웨어 간의 데이터 통신을 가능하게하는 표준화 구현

* 소재, 소재의 특성 및 관계를 설명하고 분류하는 표준화된 접근 방식을 개발하기 위한 이니셔티브로 표준화된 온톨로지는 소재 정보학에서 데이터 공유와 상호 운용성 크게 향상

– 기존 및 향후 유럽 재료 모델링 마켓플레이스, 모델링 번역 환경 네트워크 및 오픈 이노베이션 모델링 테스트 베드를 통해 소프트웨어 및 서비스를 통합하여 제공할 계획('23 2월, 프로젝트 종료)



< 그림 26 > SimDOME 프로젝트 EMMO 개요

○ 프라운호퍼 IFAM이 주도하는 OpenModel 프로젝트⁹⁾를 통해 소재 데이터 표준화를 위한 노력 추진

– 통합 오픈 액세스 소재 모델링 플랫폼을 제공하여 EU 플랫폼*과 쉽게 통합하고 사용할 수 있도록 설계

* (예시) 개방형 번역 환경(OTE), 재료 모델링 마켓플레이스(MMMP), 혁신 테스트 베드(ITB), 비즈니스 의사 결정 지원 시스템(BDSS)

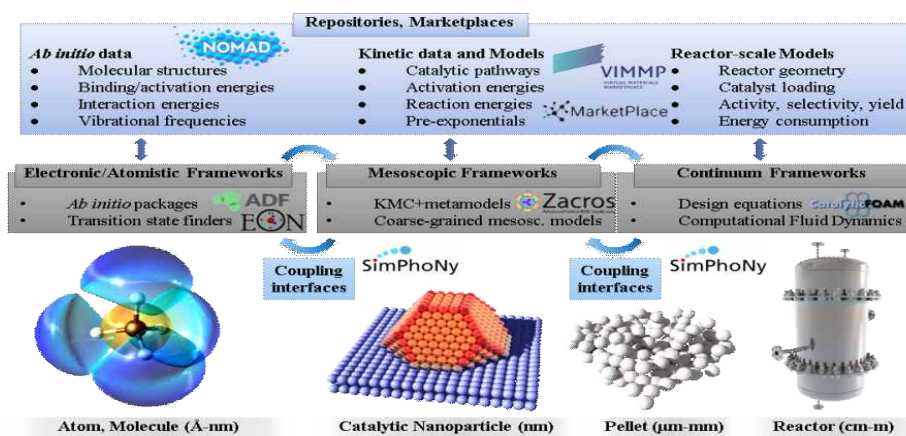
8) <https://simdome.eu/>

9) <https://open-model.eu/the-project/>



< 그림 27 > OpenModel 프로젝트 컨소시엄

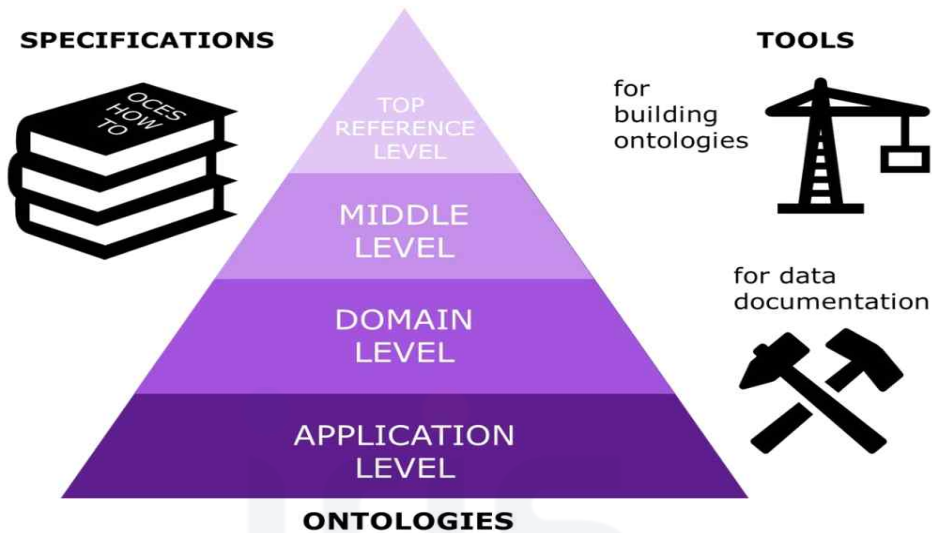
- ReaxPro 멀티 스케일 모델링 프로젝트¹⁰⁾는 일련의 학술용 소프트웨어(EON, Zacros, CatalyticFOAM)를 학습하기 쉽고 사용자 친화적이며 상호 운용가능하게 확장하여 촉매 재료 및 공정 설계를 위한 산업 지원 솔루션으로 발전
- ReaxPro 소프트웨어 플랫폼 및 관련 서비스는 EU MARKETPLACE 및 VIMMP와의 파트너십을 통해 유럽 재료 모델링 마켓플레이스를 통해 제공될 예정
- * Software for Chemistry & Materials B.V와 영국 University College London이 주도



< 그림 28 > ReaxPro 프로젝트 개요

10) <https://www.reaxpro.eu/>

- ONTOCommons¹¹⁾는 Horizon 2020 프로젝트로 재료 및 제조와 관련된 모든 영역에서 데이터 문서화를 표준화 추진
- 온톨로지 에코시스템 구축 및 로드맵 개발을 통해 상호 운용 가능하고 표준화된 데이터 공유를 촉진하여 새로운 비즈니스 모델 구현을 목표로 함



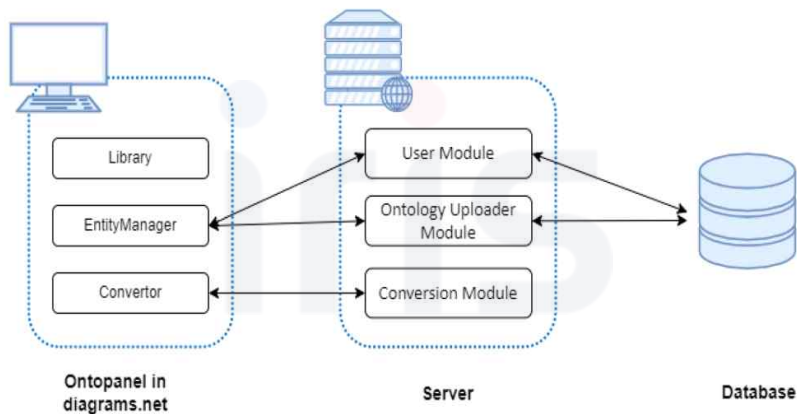
< 그림 29 > 온톨로지 에코시스템 개요

- 독일을 중심으로 경쟁력 있고 안전하며 신뢰할 수 있는 소재 데이터 인프라를 구축하려는 노력 지속
- 비영리 협회인 NFDI(National Research Data Infrastructure)는 영구적인 디지털 지식 저장소를 만드는 것을 목표로 국가 연구 데이터 인프라 구축을 위한 활동을 조율하기 위해 설립
- '21년부터 27개 분야별 컨소시엄* 구성, 85백만EUR/년의 연구개발비 투입
- * 재료과학 관련 NFDIMatWerk 컨소시엄은 소재, 공정, 측정·분석 데이터 인프라 구축을 추진
- 독일연방정부는 다양한 과학 분야의 데이터에 균일하고 체계적으로

11) <https://ontocommons.eu/>

접근할 수 있도록 자금 지원을 합의하였고, 프로젝트의 복잡성과 범위로 인해 독일연구재단(DFG)은 NFDI 컨소시엄의 설립과 네트워킹에 의존

- 소재 데이터의 분석을 체계화하고 표준화하기 위한 연구 데이터용 디지털 인프라를 개발하기 위해 MaterialDigital 프로젝트 추진
 - 산학연 이해관계자에게 일관된 방식으로 소재 데이터 표준화 및 커뮤니티 형성을 위한 The Materials Digitalization Platform ('19년 7월 출시) 구축
 - MaterialDigital은 독일 연방 교육연구부의 지원으로 프라운호퍼 재료 역학 연구소 IWM, 헬름홀츠 협회, 라이프니츠 IWT, 막스 플랑크 아이젠과학연구소가 참여

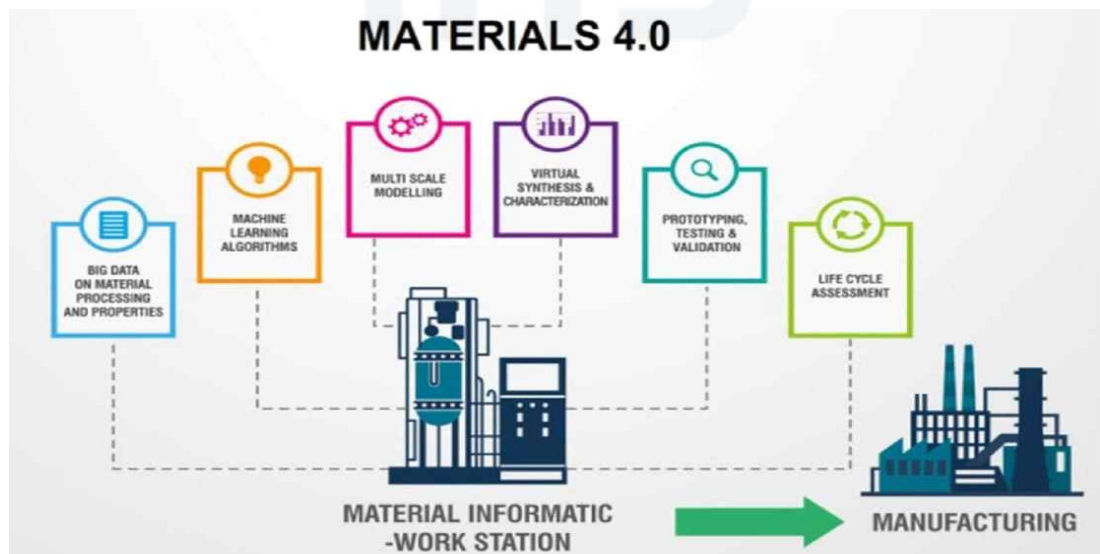


< 그림 30 > 온톨로지 도구(Ontopanel) 구조

- 온톨로지 규칙에 대한 경험이 부족한 전문가도 온톨로지를 구축할 수 있는 간단하고 사용자 친화적인 방식의 도구를 제공
- 이외에도 재료과학 온톨로지 저장소 구축을 위한 노력으로 Materials Open Laboratory MatPortal이 있음

< 표 10 > 새로운 소재 연구 패러다임 Material 4.0

- 새로운 소재의 발견, 혁신, 검증은 가속화할 디지털 재료 혁명으로 디지털 데이터와 물리적 데이터를 연결하여 새로운 소재의 예측, 분류 및 성능 제어를 극대화할 수 있을 것으로 기대
 - 빅데이터 분석에 대한 전문성을 확대하고 지능형 기계학습 알고리즘을 개발하여 정부, 학계 및 산업계 차원에서 재료 연구 관행을 새로운 패러다임으로 전환하기 위한 강력한 이니셔티브 필요¹²⁾
 - Material 4.0 구현을 위해서는 이질적이고 복잡하며, 여러 소스와 다양한 데이터 세트의 데이터를 단순화 및 검색 가능한 형태로 통합하고 비정형 데이터를 관리 및 분석 필요
 - 전 세계에 분산되어 있는 사용자들이 데이터에 접근하고 업로드가 용이하도록 개방형 웹 플랫폼 구축 필요
 - 재료 데이터 인프라의 신뢰성과 사용자의 신뢰를 높이기 위해 재료, 제품, 프로세스, 서비스 및 시스템의 설계, 성능과 같은 영역에서 관련 국제 표준 및 코드의 개발이 필요
 - 영국의 Henry Royce Institute에서는 동향 보고서를 통해 Materials 4.0 발전을 저해하는 네 가지 주요 장벽으로 디지털 보안 및 신뢰, 디지털 표준, 실험 자동화, 이미지 저장 및 공유를 제시¹³⁾

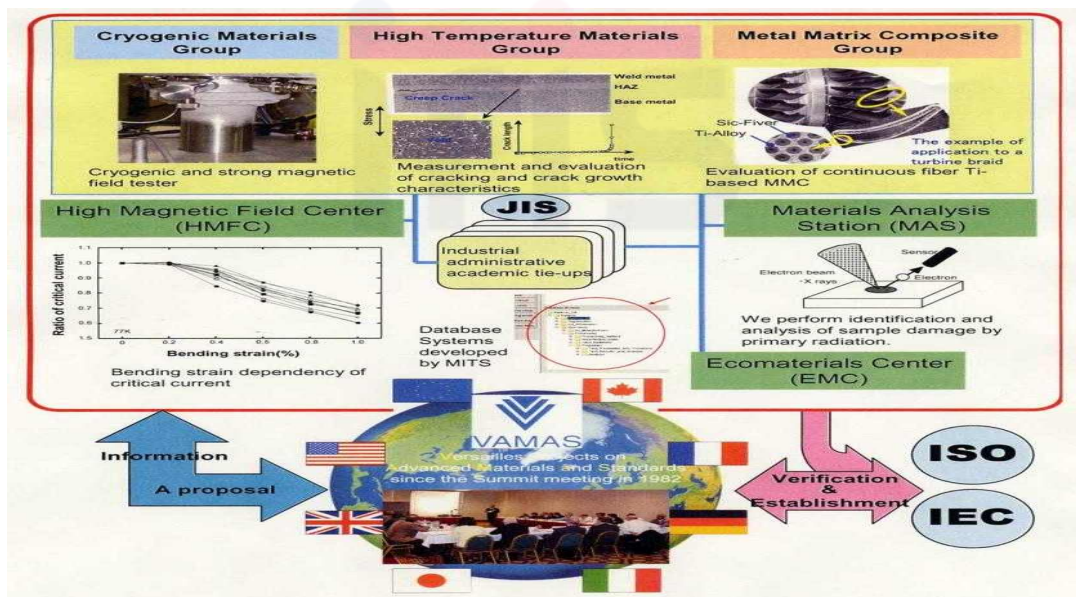


12) R.Jose, S.Ramakrishna, Materials 4.0: Materials big data enabled materials discovery, Applied Materials Today, Volume 10, (2018), 127-132

13) <https://www.royce.ac.uk/collaborate/roadmapping-landscaping/materials-4-0/>

일본

- 체계적이고 통합적인 소재 데이터 생성·수집·활용 정책 추진을 위해 국립 물질재료연구소(NIMS)에 관련 역할 부여
 - NIMS는 산업 및 학계에서 생성된 고품질 데이터를 전략적으로 수집 및 축적하고 이를 과학자들이 사용할 수 있도록 하는 데 전념
 - ※ 정부 주도로 대학 및 공공연구기관이 위험도가 높은 첨단소재 분야 주도적 수행
 - NIMS에 Materials Information Technology Station(MITS)을 구성('01)하여 데이터베이스 인프라를 구축하고 '03년부터 관련 서비스를 시작
 - 첨단 소재의 특성 평가 및 표준화 연구 등을 위한 데이터를 생성·수집하고 관련 사용자에게 적절한 데이터를 제공

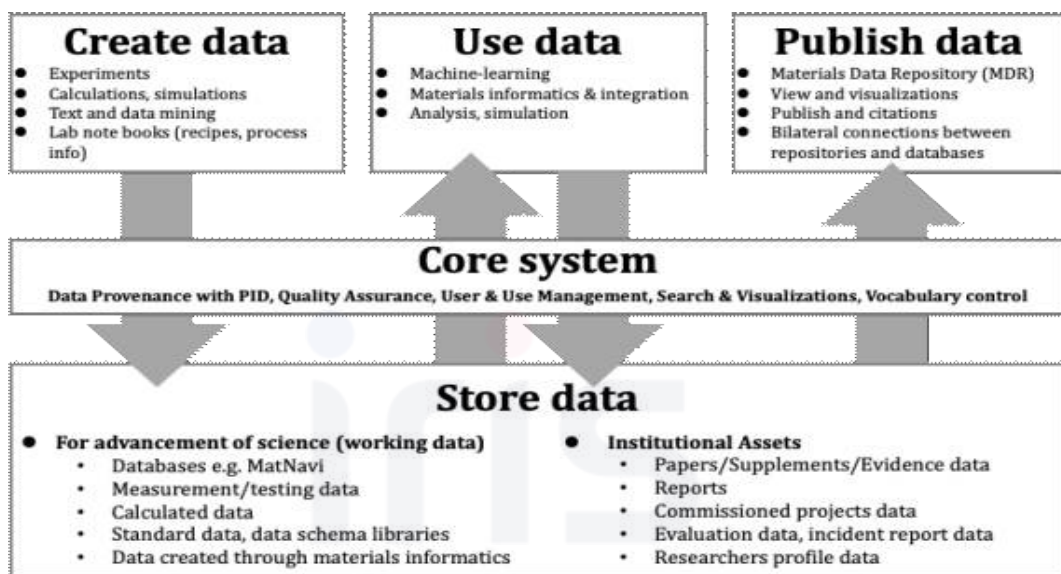


< 그림 31 > MITS의 데이터베이스를 활용하는 센터들

- NIMS는 '03년부터 일본 최대의 오픈 데이터베이스인 MatNavi를 제공
 - 고분자, 무기 화합물 등의 6개의 물성 특성화 데이터베이스를 포함하여 엔지니어링과 응용에 관련된 2개 데이터베이스, 3개의 응용 시스템, 4개의 구조 재료 데이터 시트로 구성

- 기 출판된 방대한 학술 문헌에서 추출한 수치 데이터와 NIMS내에서의 실험 데이터를 수집, 데이터베이스화하고 있기 때문에 신뢰도가 높지만, 데이터 기반의 학습을 전제로 구축되어 있지는 않기 때문에 텍스트 마이닝을 이용하여 논문의 정보를 자동으로 데이터베이스화하는 기술 개발
- 문부과학성과 과학기술진흥기구는 ‘정보통합 물질·재료 개발 이니셔티브(MI2I, 총 기간 5년)’를 수립
 - 과학기술진흥기구의 ‘혁신허브 구축지원사업’의 일환으로 NIMS 산하 정보통합 물질·재료 연구 센터(CMI2)*에 프로젝트를 위탁
 - * 배터리 재료, 자성 재료, 전열 제어 및 열전 재료 등 구체적인 주제의 소재 개발연구를 수행하면서 동시에 데이터 중심의 연구 방법론의 개발
 - 프로젝트의 목적은 재료 데이터와 데이터 과학 방법을 결합하여 재료 탐색 및 개발을 가속화
 - 소재 데이터베이스를 개발·정비하고, 재료 과학부터 정보 과학, 수학 분야에 이르는 산·학·연 협동 체제를 통한 오픈 이노베이션을 지향
 - ※ 사용자는 API(응용 프로그래밍 인터페이스)를 통해 MatNavi의 6개 주요 데이터베이스에서 거의 백만 개의 데이터 항목에 액세스하고 다운로드할 수 있으며 도구를 사용하여 플랫폼의 데이터를 분석하거나 시뮬레이션이 가능
- 재료과학 분야의 데이터 기반 신소재 연구개발 추세에 맞춰 데이터 생성·수집·사용의 서비스를 제공하는 통합 플랫폼 DICE 구축·운영
 - NIMS는 시스템 인프라를 퍼블릭 클라우드(Public cloud*)로 이전하고 데이터 저장 및 공유 서비스(RDE) 시스템을 추가하여 DICE의 데이터 수집 및 추적 기능을 크게 향상
 - * 인터넷에 접속 가능한 모든 사용자를 위한 클라우드 서비스 모델로 데이터나 기능, 서버 같은 자원은 각 서비스에서 사용자 별로 권한 관리가 되거나 격리되어, 서비스 사용자 간에는 전혀 간섭이 없다는 장점을 지님
 - DICE 소재 데이터 플랫폼은 데이터를 수집 및 편집하여 연구자가 사용할 수 있도록 하는 포괄적인 시스템으로 재료 데이터베이스(MatNavi) 및 재료 데이터 저장소(MDR)를 포함한 서비스를 공개적으로 제공
 - ※ 데이터 시각화 시스템과 다양한 분석 소프트웨어뿐만 아니라 소재 정보학 등 재료 개발 문제 해결의 실마리를 제공할 수 있는 시스템 과학 서비스도 제공

- 최근 실험 연구 데이터를 온라인으로 신속하게 등록할 수 있도록 자체 개발한 RDE* 시스템을 DICE에 통합
- * 축적된 데이터를 사용자와 연구 그룹이 쉽게 사용할 수 있도록 기계학습에 적합한 형식으로 데이터를 자동으로 변환하여 클라우드 스토리지에 저장하는 시스템
- 수집된 데이터는 개인 용도뿐만 아니라 동일한 연구 프로젝트에 참여하는 다양한 개인 연구자, 그룹 및 조직 간에 공유 용도로 사용



< 그림 32 > DICE 주요 기능

- 경제산업성은 신에너지산업기술종합개발기구(NEDO)와 산업기술 종합연구소(AIST)를 중심으로 ‘최첨단 소재 초고속 개발기반 기술 프로젝트*’를 추진(’16~’22)¹⁴⁾

* Ultra High-Throughput Design and Prototyping Technology for Ultra Advanced Materials Development Project

- 첨단 계산 과학을 기반으로 하는 재료 개발을 위한 핵심 기술을 확립하고 통합하는 방식으로 기능성 재료를 빠르게 개발하는 것을 목표
- ※ 재료 설계, 프로세스, 해석 기술에 슈퍼컴퓨터 및 인공지능 등을 사용함으로써 기능성 소재의 개발기간 및 시험 횟수를 기존의 20분 1로 단축 시도

14) https://www.nedo.go.jp/english/activities/activities_ZZJP_100119.html

- 다양한 프로토타입을 신속하게 제작할 수 있는 유연한 제조 공정 기술과 이전에는 없었던 물체와 물질의 특성을 관찰할 수 있는 첨단 측정 기술을 연계한 통합 시스템을 구축
- JST는 ‘이론·실험·계산 및 데이터 과학을 연계·융합한 첨단재료 정보학 기반 구축 사업’ 추진¹⁵⁾
 - 정보 과학 연구자와 물질·재료 과학 연구자등이 협업해 에너지, 의료, 화학 등 다양한 산업에서 활용될 수 있는 물질 및 소재 탐색·설계 연구를 추진
 - 대규모·복잡 데이터로부터 구조·물성 상관이나 물리법칙을 귀납적으로 해명하는 수법의 개발과 그것을 이용해 사회적·산업적으로 요구되는 기능을 실현하는 신물질 및 재료를 탐색 및 설계
- ※ 다양한 물질 데이터를 포괄적으로 정리·기술·가시화하는 새로운 물리적 개념이나 방법론의 구축 등이 연구 내용에 포함

□ 이노베이션 허브구축 지원 사업

- 일본 과학기술혁신종합전략 2014에 따라 추진된 「이노베이션 허브 구축 지원사업」은 국립R&D법인이 각 R&R에 따라 국내외 거점화 즉, 「이노베이션 허브」 구축을 목적으로 추진
- 총 5년간('15~'19년) 진행했으며, 각 프로젝트별 연간 4.5억엔을 투입
- 총 4개의 프로젝트 중 1개가 소재관련 프로젝트에 해당

15) https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunyah27-4.html

< 표 11 > 이노베이션 허브구축 지원사업의 프로젝트 및 주관기관

프로젝트	주관기관
정보통합형물질·재료개발이니셔티브 (Mi2i) (情報統合型物質・材料開発イニシアティブ)	물질·재료연구기구 (NIMS)
태양계 프론티어 개척에 의한 인류 생존권·활용영역 확대를 향한 오픈 이노베이션 허브 (太陽系フロンティア開拓による人類の生存圏・活動 領域拡大に向けたオープンイノベーションハブ)	우주항공 연구개발기구 (JAXA)
「공격」의 방재를 향한 기상재해의 능동적 경감을 실현하는 혁신 허브 (「攻め」の防災に向けた気象災害の能動的軽減を実現 するイノベーションハブ)	방재과학기술연구소 (NIED)
고정밀도 예측 기반 예방의료의 실현을 위한 빅데이터 주도형 혁신허브 (高精度の予測に基づく予防医療の実現に向けた疾患 ビッグデータ主導型イノベーションハブ)	이화학연구소 (RIKEN)

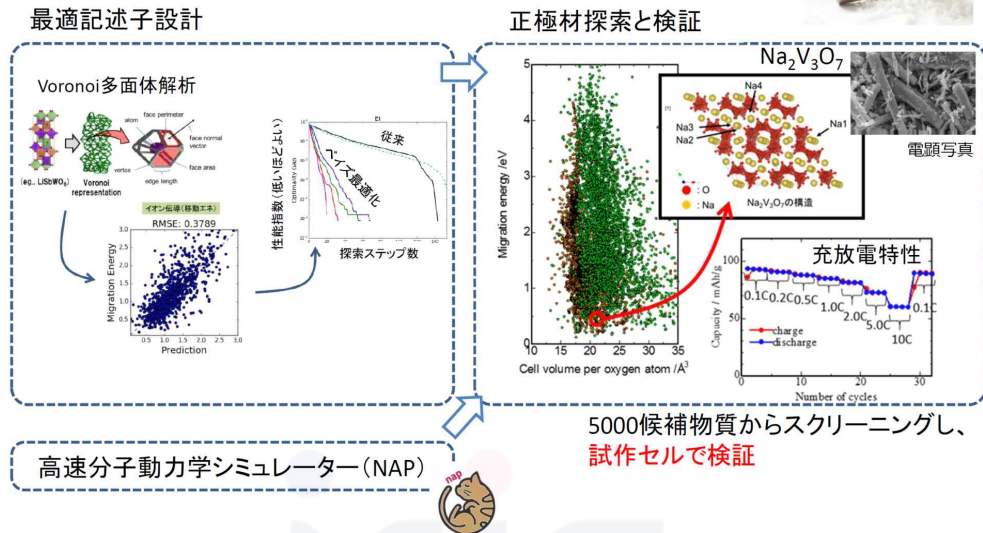
○ 정보통합형 물질·재료개발 이니셔티브(Mi2i)

- (총 예산) 21억엔 (일간 공업신문 2015년 6월 30일자 기사)
- (연구소재 테마) 자성소재, 배터리소재, 열전소재
- (체계) 기초연구 (데이터플랫폼), 횡단적연구 (데이터과학연구/인공지능), 응용연구 (물성연구, 검증) 의 체계로 구성하였으며 데이터 수집, 탐색설계 이후 실험검증까지 연계함
- (허브 성과) ①해외 연구기관과 협력(고문 초빙, 연구자 단기체류·상호 교류), ②MI2I 컨소시엄(산연협력 네트워크로 법인회원 82개사),③ 지자체 협력(효고현), ④플랫폼 구축 (MI2I 클라우드 서버 12대, 계산 클러스터 48대, 스토리지 200TB), ⑤포럼, 교육, 연구회 등 운영
- (연구성과) ❶나트륨 이온전지용 신규 양극재 설계 및 검증, ❷파장 제어 열복사 다층막 소재 설계 및 검증, ❸고분자 수준의 단열성 무기복합재료 설계 및 검증, ❹고열전도성 고분자 설계 및 검증 등의 성과 창출

① 나트륨 이온전지용 신규 양극재 설계 및 검증

※ 후보물질 5000개 중 스크리닝하여, 프로토타입 셀에서 검증 완료, 나고야공대 Masanobu Nakayama 교수

自動探索によるナトリウムイオン電池向け新規正極材設計開発

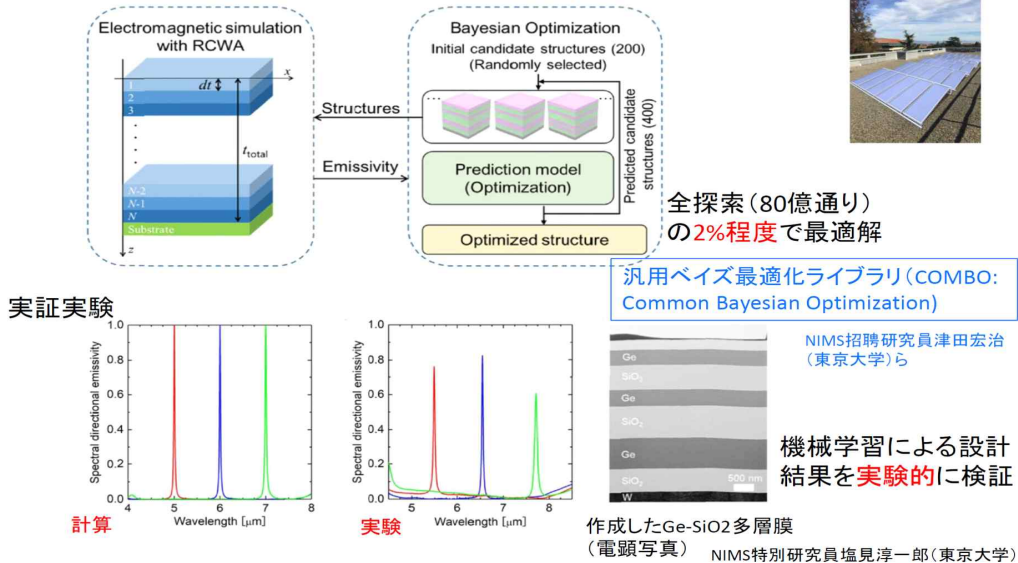


NIMS招聘研究員中山将伸 (名古屋工業大学)ら

② 과장제어 열복사 다층막 소재 설계 및 검증

※ 베이지안 최적화 활용하여 최적다층막 구현, 도쿄대 Junichiro Shiomi 교수

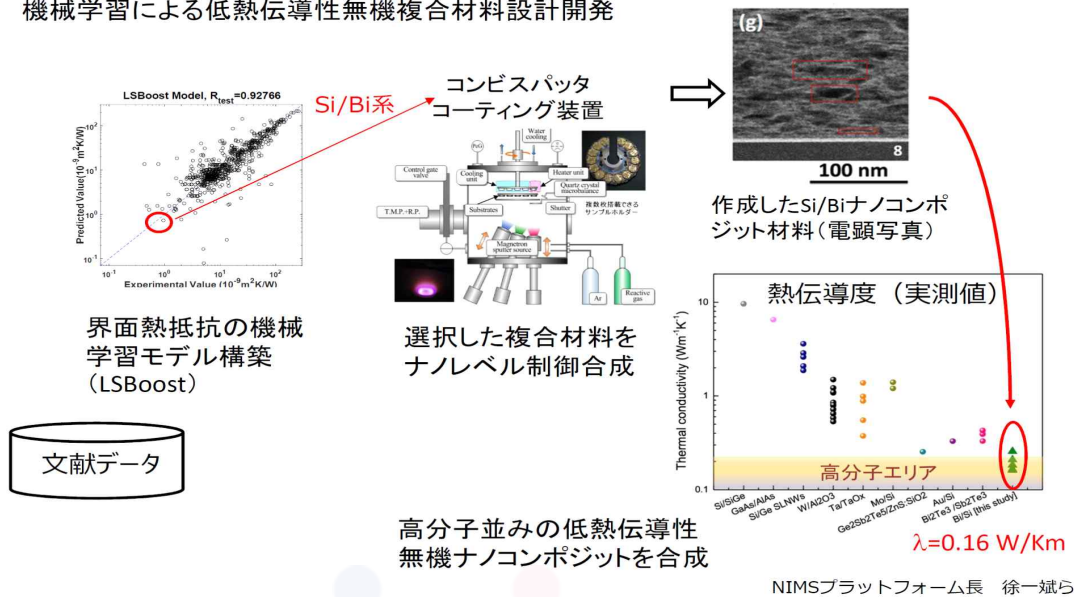
ベイズ最適化による波長制御熱輻射多層膜材料設計開発



③ 고분자 수준의 단일성 무기복합재료 설계 및 검증

※ NIMS Yibin Xu 박사

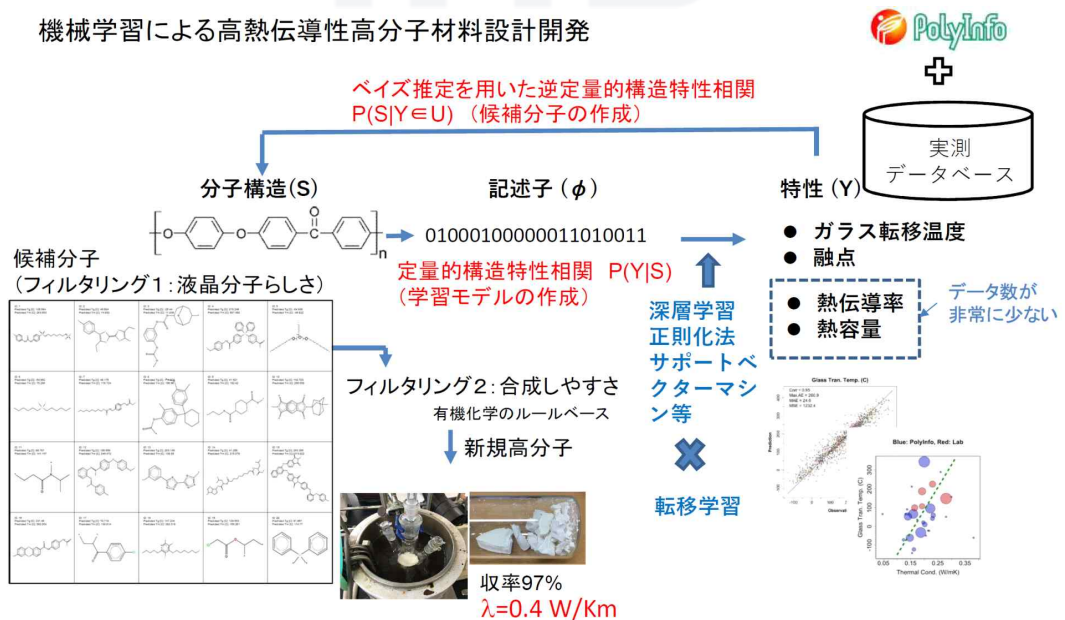
機械学習による低熱伝導性無機複合材料設計開発



④ 고열전도성 고분자 설계 및 검증

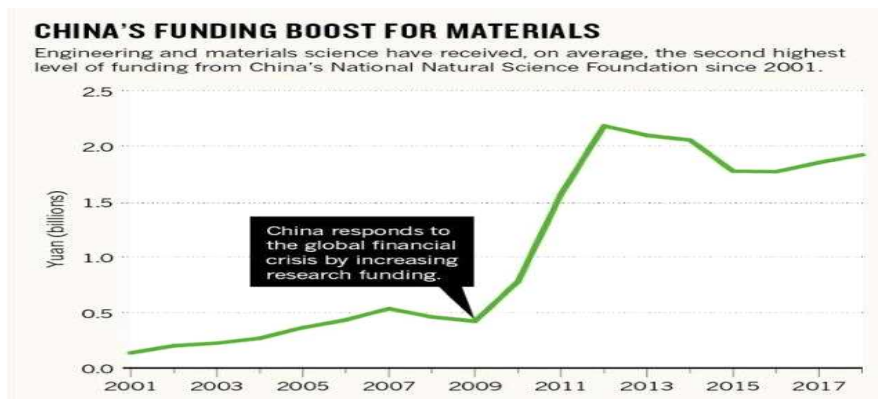
※ TIT Junko Morikawa 교수, 통계수리연구소 Ryo Yoshida 박사

機械学習による高熱伝導性高分子材料設計開発



중국

- 첨단 소재기술 R&D, 혁신 플랫폼 구축, 고급 혁신 인력 양성 등을 위해 미국의 MGI를 벤치마킹한 소재게놈공학(Material Genome Engineering, MGE) 연구 종합 계획을 마련¹⁶⁾¹⁷⁾(중앙정부 8.4억 위안, 지방정부 6.2억 위안 투자)¹⁸⁾
 - 중국 과학기술부는 소재게놈공학 핵심 기술 및 지원 플랫폼 구축을 위한 국가 R&D 프로젝트에 투자 강화*
 - 세 가지 유형의 선도 플랫폼(컴퓨팅, 실험, 데이터베이스)과 네 가지 핵심 기술(고처리량 재료 계산 및 설계, 고처리량 재료 가공 및 특성화, 고효율 재료 서비스 및 고장 평가, 재료 빅데이터 기술) 구축이 목표
 - '90년대에 중국대학 및 연구기관이 정부지원으로 23개의 소규모 자료 데이터베이스를 개발하기 시작하였으나 업데이트 미비
 - '00년대에 18개 연구기관이 참여하여 처음으로 데이터를 수집하고 표준화된 형식으로 입력하는 국가중앙집중식 자료 데이터베이스를 구축
- ※ 중국의 재료 과학에 대한 자금 지원은 '08년 이후 4배로 증가했으며, 중국 국립 과학재단(NSFC)으로부터 의학 분야에 이어 두 번째로 높은 수준의 자금을 지원



< 그림 33 > 중국의 소재 분야 투자 추이

- 16) O'Meara, S. (2019.3.20.). Materials science is helping to transform China into a high-tech economy. *Nature*. <https://www.nature.com/articles/d41586-019-00885-5>
- 17) Xie, J., Su, Y., Zhang, D. et al., (2022). A vision of Materials Genome Engineering in China. *Engineering*. 10(3). <https://www.engineering.org.cn/en/article/34342/detail>
- 18) '23년 12월 중국 MGE Forum 발표내용

- '18년부터 다양한 소재 데이터의 등록, 관리 및 공유가 가능하고 사용자 편의성을 도모한 NMDMS(National Materials Data management and Service Platform)¹⁹⁾ 구축
- '22년 기준, 87개 소재 군의 1,225만 건 데이터 등록, 1,912건의 사용자 정의 템플릿 개발

Data Publication

- ✓ Project and user information management
- ✓ Data review for quality evaluation
- ✓ Data identifier

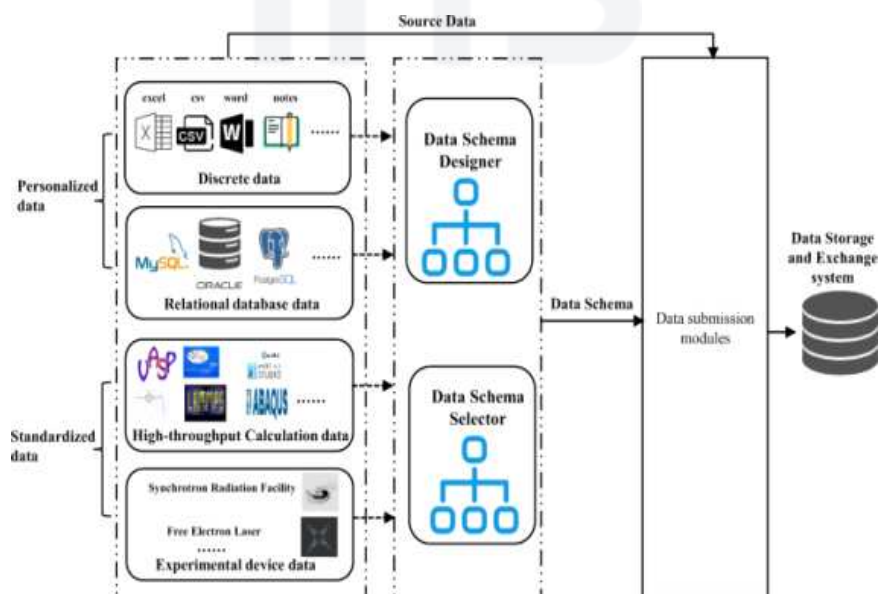
Data Sharing

- ✓ Full-text query
- ✓ SQL-like query
- ✓ Data query based on knowledge graph
- ✓ Data downloading
- ✓ Data API



Personalized and Standardized Material Data Submission

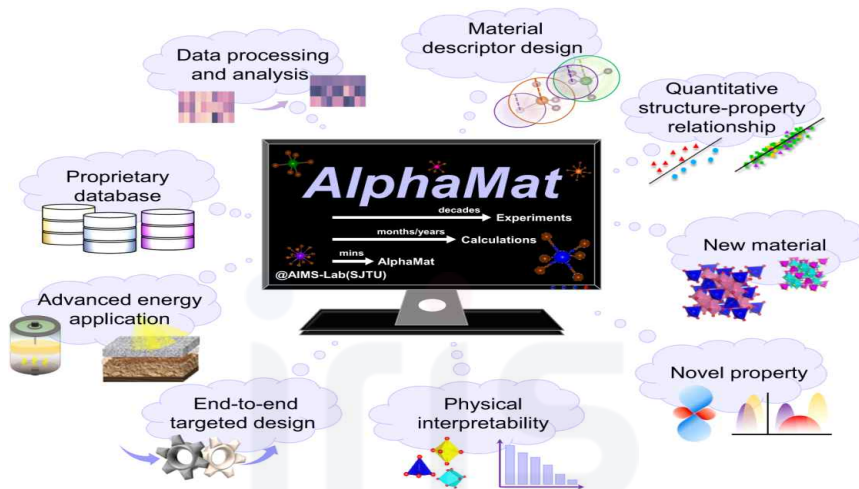
- ✓ Data stored in documents
- ✓ Data stored in database
- ✓ Data generated from high-throughput calculation software
- ✓ Data generated from experimental device



< 그림 34 > NMDMS 개요 및 프로세스

19) Gong, H., He, J., Zhang, X.*et al.* (2022). A repository for the publication and sharing of heterogeneous materials data.*Sci Data* 9, 787

- AI 기반의 소재 정보 플랫폼 AlphaMat(www.aimslab.cn)²⁰⁾ 구축
 - 상하이 교통 대학의 JinJin Li 연구팀에서 개발, Supervised Learning(SL), Transfer Learning, Unsupervised Learning(UL)을 동시에 보유한 최초의 재료 정보 플랫폼으로 데이터 규모의 제약없이 재료 모델링 작업 수행 가능
 - 90개 이상의 기능(데이터 수집 → 데이터 전처리 → 피처 엔지니어링 → 모델 수립 → 파라미터 최적화 → 모델 평가 → 결과 분석)으로 재료 모델링의 전체 라이프사이클을 지원하는 AI 플랫폼



< 그림 35 > AlphaMat 개요

- '19년 중국재료시험학회(CSTM)는 MGE 표준 위원회를 설립하고 최초의 글로벌 MGE 전문 표준을 발표
 - MGE 데이터베이스의 데이터 내용, 구조 및 필수 정보를 명시하여 재료 연구에서 데이터 기반 접근 방식을 광범위하게 적용할 수 있는 토대 마련
- MGE 연구 육성을 위한 새로운 문화와 환경 조성을 위한 노력 추진
 - 관련 기본 이론, 기술 및 핵심 장비의 개발 등을 촉진하기 위해 '17년부터 중국 공학 한림원 주최 전국규모의 MGE 연례 포럼 시작
 - 많은 대학에서 학부 및 대학원 커리큘럼을 재설계하여 MGE 연구 전문 인력 양성을 위한 필수과목 추가

20) Wang, Z., Chen, A., Tao, K. *et al.* (2023). AlphaMat: a material informatics hub connecting data, features, models and applications. *npj Comput Mater* 9, 130

2.3. 데이터 기반 소재연구 성공사례 분석

2.3.1. 국내 동향

□ '21년 전남대는 인공지능(AI)을 활용해 새로운 소재를 탐색하는 플랫폼을 구축, 새로운 고성능 양극 소재를 세계 최초로 개발에 성공

- 김재국·황장연 신소재공학부 교수팀은 기존 소재 개발의 단점을 극복하면서 고성능소재를 찾을 수 있는 빅데이터 기반의 플랫폼을 구축
 - AI를 활용해 주기율표상 소재로서의 가능성이 높은 원소들을 걸러낸 뒤 목표성능 달성이 가능한 소재를 선택해 실험적 검증을 거치는 ‘AI 기반의 소재 탐색 플랫폼’을 개발
 - 차세대 이차전지 가운데 하나인 포타슘 이온전지 양극 소재가 지닌 수분에 취약한 단점을 극복할 수 있는 새로운 고성능 양극 소재 개발에 성공
- * 실험결과 계면 및 결정구조의 안정성이 증명됐으며 상대 습도 60% 이상인 제조 환경에서 초기 성능의 90% 이상을 유지하는 결과 도출
- 재료·화학 분야의 세계적 권위지인 영국 왕립학회지 '에너지 & 환경 사이언스' 11월호 표지논문으로 게재



< 그림 36 > 전남대 연구팀의 연구성과가 게재된
영국 왕립학회지 에너지 & 환경 사이언스 11월호 표지

※ 출처 : 전자신문(2021.11.24.). 전남대, AI기반 소재탐색 플랫폼 구축...고성능 양극 소재 세계 첫 개발. <https://www.etnews.com/20211124000010>

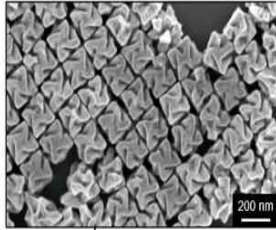
□ 新연구방법론(계산과학 등)을 활용하여 새로운 물성과 기능을 구현하는 신소재를 개발하는 미래소재디스커버리사업에서도 우수한 성과 창출 중

- 생체모방형 디(d)-오비탈 매니폴드 반응 제어소재(3기, '17.9.~'23.8.)
 - 서울대 남기태 교수, 고려대 이승우 교수·박규환 교수로 구성된 공동연구팀은 생체모방 재료공학과 전산나노광학의 창의적 융합을 통해 '초고민감도 분자 카이랄*성 측정기술 개발'에 성공, 네이처(Nature, IF 69.504)에 12월 15일 게재

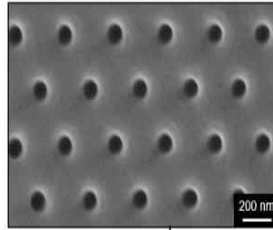
* 오른손과 왼손의 입체 구조는 동일해 보이지만 왼손용 장갑을 오른손에 착용할 수 없는 것과 같이, 서로 거울상 대칭이지만 겹쳐지지 않는 특성

- 분자의 카이랄성은 서로 반대 방향으로 회전하는 두 원편광(좌원편광, 우원편광)에 대한 상호작용의 차이를 통해 분석될 수 있으나, 분자와 빛의 크기 불일치로 인해 빛-물질 간 상호작용이 충분히 크지 않아 분석에 고농도의 시료가 필요하고 측정 시간이 오래 소요되는 등 극명한 한계
- 문제에 대한 돌파구를 카이랄 금 나노 입자의 2차원 조립 구조에서 보이는 새로운 물리현상에서 발견, 특별한 도구 없이 분자의 카이랄성을 구분할 수 있는 육안 기반 카이랄성 감지기를 제시하는 데 성공
- 다양한 생체 분자, 화학 약품, 의약품의 카이랄성 분석 등에 이용 가능하며, 다양한 산업뿐만 아니라 화학, 생물학, 물리학 등 기초 학문 분야에도 큰 파급력을 미칠 것으로 전망

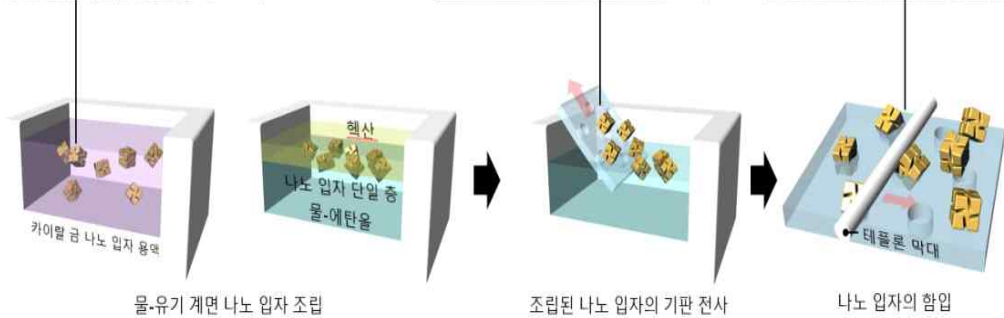
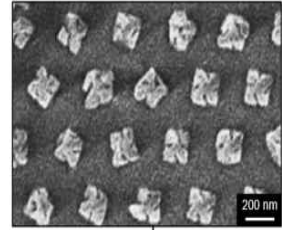
카이랄 금 나노 입자의 전자 현미경 사진



나노 우물 구조가 패터닝 된 고분자 기판



규칙적으로 조립된 카이랄 금 나노 입자의 전자 현미경 사진



< 그림 37 > 카이랄 금 나노 입자의 규칙적 조립 구조 제작에 대한 모식도



< 그림 38 > 카이랄 금 나노 입자의 규칙적 조립 구조의 암시야상 현미경 사진과 실제 소자의 사진

※ 출처 : 과기정통부 보도자료(2022.12.15.). 초고민감도 분자 카이랄성 측정기술 개발

□ 산업계에서도 사업화 성공사례 창출 중

- 타이어 컴파운드 인공지능 시스템 (韓 한국타이어)
 - 타이어 컴파운드의 조성 및 공정에 따른 물성 예측 시스템
 - AI 기술(美 AWS, 텐서플로우 등)을 통해 수 만개 타이어 컴파운드 셋에서 최적 컴파운드조합을 가상으로 탐색
 - AI와 사물인터넷(IoT) 기술을 활용한 설비 이상 탐지 예측 시스템 개발 (기존 대비 3~4배 높은 예측 정확도)
 - 기존 컴파운드개발 6 ~ 36개월 기간을 50% 단축 기대



< 그림 39 > 타이어 컴파운드 분자구조 개념도

2.3.2. 국외 동향

□ 미국의 소재계눔이니셔티브(MGI) 전략을 통해 창출된 성공사례는 다음과 같음²¹⁾

구분	내용
제목	DMREF: Accelerating the deployment of toxic gas sensors
소재	Liquid crystal gas sensors
개발 배경	- Liquid crystal (LC)는 여러 외부 물질들에 대한 높은 화학감응성을 가지며, 이를 통해 특정 화학종에 반응하는 가스 센서로서의 역할이 큰 물질임 - 기존의 LC 센서 디자인 과정은 센서와 목표 화학종의 복잡한 상호작용을 시뮬레이션하는 것으로 진행되었으며 기간이 수년에 달할 정도로 긴 과정임
난제	LC 기반의 가스 센서 디자인의 가속화
연구주체	DMREF 팀(Designing Materials to Revolutionize and Engineer our Future) (Cornell University, Kent State University, and the University of Wisconsin-Madison)
연구방법	- 계산(DFT) ↔ 물질 합성 ↔ 특성 측정으로 이루어진 사이클을 통한 상호 피드백 과정으로 센서 디자인 가속화 - H₂O(g)와 오염원 가스가 존재할 때, 금속 표면의 금속 양이온이 오염원에 의해 산화된다면, 산화된 금속에 결합되어 있던 LC의 방향성이 바뀌는 것이 기존 연구에서 알려져있음. 이를 활용하여 DFT 계산을 통해 금속 산화 반응의 반응 자유에너지를 계산하여 오염원의 반응성을 예측함 - DFT 계산을 통해 예측된 결과에 기반하여 실험적인 검증을 진행함. 여러 금속 표면과 오염원의 조합에 대해 LC의 기울기 각도를 측정함 - LC의 반응을 관측하며 오염원 혹은 증기의 optical micrograph 이미지를 얻을 수 있음. 이 이미지들을 기계학습 모델의 학습 데이터로 사용하여 오염원 분류 정확도를 높이도록 훈련함(정확도 기존 60% → 99% 상승)

21) MGI(2021)에 제시된 성공사례에 대한 분석을 수행

22) <https://liquid-crystals.engr.wisc.edu>

구분	내용																																																															
새로운 발견 (장점, 효과)	- DFT 계산과 실험의 상호협력으로 인해 특정 오염원과 금속 양이온의 반응을 더욱 빠르게 예측할 수 있고 센서 디자인을 가속화 할 수 있음 (수 년 → 수 개월 단위 가속화) - 기계학습을 도입하여 센서의 더욱 빠른 오염원 감지와 높은 감지 정확도를 얻을 수 있음. 특히 LC의 반응 초기의 이미지만으로도 오염원 감지가 가능함에 따라, 센서 착용자가 오염원에 노출될 위험성을 낮추는 데에도 크게 기여할 수 있음 - Platypus Technologies사의 H₂S 독성 가스 wearable 센서가 해당 기술이 접목되어 개발되었고 상용화되어있음 - 가속화된 LC 센서 디자인 과정에 의해 많은 수의 LC와 목표 분석물 조합의 반응이 예측, 측정되었고 해당 결과들이 모두 데이터베이스화 되어 존재함. 해당 데이터베이스를 이용한 추가적인 센서 개발 또한 매우 용이할 것으로 보임²²⁾																																																															
적용 분야	Wearable 가스 센서																																																															
사진/도표/ 데이터	  < Platypus Dosimeter™ > Chemoresponsive Liquid Crystal Research Database Cornell University Generation 3 In this Analyte Analysis Page, we summarize the calculated Generation 3 (Neutral Anion Model) displacement free energy (in eV; 1 eV = 96.5 kJ/mol) of venomous X (VX) to 4-<i>n</i>-pentyl-4-biphenylcarbonitrile (5CB), pyrimidine-containing mesogen (5-(4-pentylphenyl)-pyrimidine, PM), and pyridine-containing mesogen (4-(4-pentylphenyl)-pyridine, PD) with the corresponding experimental results. Details of the computational and experimental procedures can be found here: 10.1021/acsami.0c05777 <table><caption>Analyte Analysis Data Table</caption><tr><th>Cation</th><th>Anion</th><th>5CB</th><th>PD</th><th>PM</th><th>Computational Method</th><th>Experimental Response</th><th>Published</th><th>References</th></tr><tr><td>Al(3+)</td><td>ClO4(-)</td><td>-0.86</td><td>-0.49</td><td>-0.70</td><td>M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP</td><td>N/A</td><td>Published</td><td>10.1021/acsami.0c05777</td></tr><tr><td>Cd(2+)</td><td>ClO4(-)</td><td>-0.48</td><td>-0.20</td><td>-0.36</td><td>M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP</td><td>N/A</td><td>Published</td><td>10.1021/acsami.0c05777</td></tr><tr><td>Co(2+)</td><td>ClO4(-)</td><td>-0.55</td><td>-0.15</td><td>-0.30</td><td>M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP</td><td>N/A</td><td>Published</td><td>10.1021/acsami.0c05777</td></tr><tr><td>Cr(3+)</td><td>ClO4(-)</td><td>-0.56</td><td>-0.19</td><td>-0.36</td><td>M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP</td><td>N/A</td><td>Published</td><td>10.1021/acsami.0c05777</td></tr><tr><td>Cu(2+)</td><td>ClO4(-)</td><td>-0.45</td><td>-0.06</td><td>-0.24</td><td>M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP</td><td>N/A</td><td>Published</td><td>10.1021/acsami.0c05777</td></tr><tr><td>Fe(3+)</td><td>ClO4(-)</td><td>-0.82</td><td>-0.22</td><td>-0.39</td><td>M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP</td><td>N/A</td><td>Published</td><td>10.1021/acsami.0c05777</td></tr></table> < LC 반응성 데이터베이스의 일부 >	Cation	Anion	5CB	PD	PM	Computational Method	Experimental Response	Published	References	Al(3+)	ClO4(-)	-0.86	-0.49	-0.70	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777	Cd(2+)	ClO4(-)	-0.48	-0.20	-0.36	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777	Co(2+)	ClO4(-)	-0.55	-0.15	-0.30	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777	Cr(3+)	ClO4(-)	-0.56	-0.19	-0.36	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777	Cu(2+)	ClO4(-)	-0.45	-0.06	-0.24	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777	Fe(3+)	ClO4(-)	-0.82	-0.22	-0.39	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777
Cation	Anion	5CB	PD	PM	Computational Method	Experimental Response	Published	References																																																								
Al(3+)	ClO4(-)	-0.86	-0.49	-0.70	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777																																																								
Cd(2+)	ClO4(-)	-0.48	-0.20	-0.36	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777																																																								
Co(2+)	ClO4(-)	-0.55	-0.15	-0.30	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777																																																								
Cr(3+)	ClO4(-)	-0.56	-0.19	-0.36	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777																																																								
Cu(2+)	ClO4(-)	-0.45	-0.06	-0.24	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777																																																								
Fe(3+)	ClO4(-)	-0.82	-0.22	-0.39	M06-2X-D3/def2-TZVP//PBE-D3/def2-SVP	N/A	Published	10.1021/acsami.0c05777																																																								

구분	내용
제목	Seeking materials with high melting temperature and structural stability
소재	고엔트로피 세라믹
개발 배경	- 기존의 극한 환경용 소재를 개발하는 연구는 물질의 엔탈피를 높이는 방향으로 탐색이 진행되어 왔으나 한계에 다다른 상황임. 이에 따라 고엔트로피 물질을 탐색하는 것이 대안으로 제시됨 - 고엔트로피 물질은 원자 종류, 조성, 성분계 수에 따른 가능한 물질의 조합 수가 기하급수적으로 늘어나기 때문에 실험적으로 모든 조합을 탐색하는 것은 불가능함. 또한 극한 환경 소재라는 특성상 실험 자체의 난이도 또한 매우 높다는 어려움이 있음
난제	고엔트로피 세라믹의 합성 가능성 예측
연구주체	A Multidisciplinary University Research Initiative (MURI) award supported by the Office of Naval Research(UC San Diego)
연구방법	- Entropy-forming ability (EFA)는 고엔트로피 물질의 합성가능성을 예측하는 지표로 활용되고 있음 - 기존에 존재하는 56개의 <i>ab-initio</i> EFA 데이터를 random forest 모델을 이용하여 학습시킴. 학습 세트에는 이온 결합성, 전자친화도, 전자배치, CALPHAD 계산을 이용한 액상선 온도 등의 특성이 포함됨 - 해당 모델을 통해서 원소 C,N,B와 8종의 refractory metal(Hf, Mo, Nb, Ta, Ti, V, W, Zn)을 조합해 고온, 고강도 물질의 후보군을 탐색함. 기계학습 모델을 통해서 ERA를 예측하는 과정은, AFLOW 데이터베이스에서 지원하는 합금 구조생성 기능을 이용하여 후보 구조들을 생성하고, 합성가능과 고온에서의 구조안정성을 모델을 통해 측정하는 과정을 거침 - 학습된 모델을 통해서 필터링된 여러 후보 구조들에 대해, 실험적으로 합성되는 것을 검증함. 또한, 고온 실험 진행 중 물질의 컨테이너가 먼저 녹는 현상을 방지하기 위해 측정 물질의 국소부분만을 가열해서 초고온을 구현하는 실험 방법을 제시하였음
새로운 발견 (장점, 효과)	- 비교적 적은 학습 세트로 모델을 학습시켰음에도, 여러 조성들의 조합에 대해 준수한 EFA 예측 정확도를 보임 - 학습된 모델을 이용한 EFA 계산은 간단한 python 코드 실행만으로 쉽게 계산이 가능함. 고엔트로피 물질의 특성상 원소 종류와 각 조성의 경우의 수 조합이 매우 많은데, 물질당 EFA 계산시간이 기존 DFT 계산으로 약 100시간이 걸리는 것에 대비하여 현재 모델에서는 약 1ms로 매우 빠른 가속화가 구현됨 - 본 연구를 통해서 기존에 존재하던 물질의 Vickers 강도보다 50% 높은 강도를 갖는 물질이 제안되었고 실제 실험적 합성으로 이어지며 본 연구의 응용 가능성이 검증됨
적용 분야	극한 환경 소재 (항공, 우주, 핵융합 등의 산업 소재)

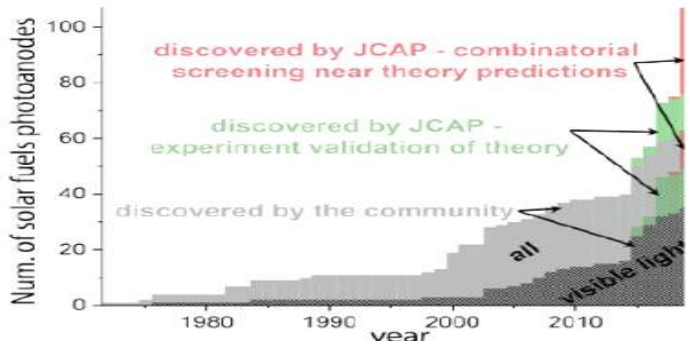
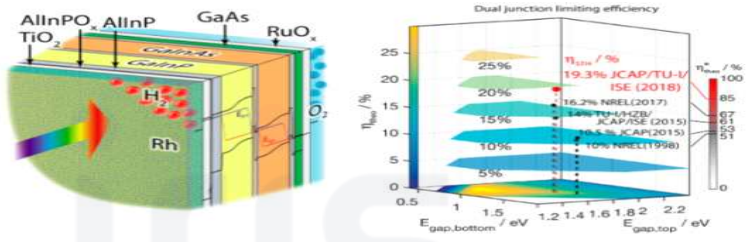
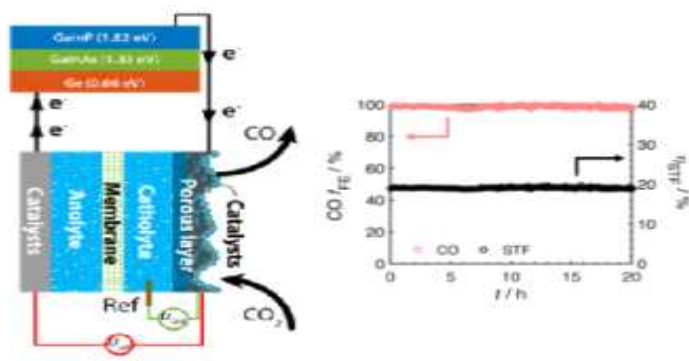
구분	내용
사진/도표/ 데이터	< 본 연구를 통해 예측, 합성된 고강도 물질 HEC-16: MoNbTaVWC > < 초고온 상태 구현을 위해 제안된 실험 장비 >

구분	내용
제목	An MGI approach to new dielectric polymers for wound film capacitors
소재	고분자 소재(새로운 유전체 폴리머)
개발 배경	- 에너지 밀도가 높고 제조가 용이하며 저렴한 축전기(capacitors)는 기후에 민감한 배전을 위한 필수 구성 요소임 - 최첨단 폴리머는 이축 배향 폴리프로필렌(BOPP)으로, 방향성 결정으로 인해 매우 높은 파괴 강도를 갖지만 알킬 사슬의 비극성 특성으로 인해 유전 상수가 낮음
난제	더 많은 에너지를 저장할 수 있는 고분자 소재 탐색
연구주체	the University of Connecticut(MURI 프로젝트)
연구방법	- 현상학, 정보학 및 실험적 검증의 상호간 피드백 과정을 통한 공동설계를 통해 물질 탐색을 가속화 - 유전 알고리즘으로 다양한 화학적 공간을 아우르는 고분자 구조들을 형성. 고분자 물질들에 대해서 고유전율 물질을 식별하기 위해 DFT 계산을 통해 밴드갭과 유전 상수를 구함 - 전자구조 데이터를 학습 데이터로 사용하여 고분자의 전자구조적 특징을 빠르고 정확하게 예측할 수 있는 기계학습 모델 훈련 진행 - 계산을 통해 파악한 후보 물질에 대해서 실험을 진행하여 고용량의 에너지 저장이 가능한 고분자 소재 검증
새로운 발견 (장점, 효과)	- 계산과 실험의 상호 협력으로 고분자 구조의 특성을 빠르게 예측할 수 있었고 소재 디자인을 가속화 할 수 있음. 기계학습 모델을 도입하여 더욱 빠른 속도로 고분자의 특성을 예측할 수 있음. 이는 다변수 공간에 대한 탐색이 가능해 다른 적용 분야에서 폭넓게 사용될 수 있는 방법임 - 계산을 통해 다양한 구조에 대한 유전상수와 밴드갭 데이터를 형성. 형성된 데이터를 바탕으로 유전 상수와 밴드갭에 영향을 주는 구조적 요인을 파악하여 고분자 물질을 설계할 디자인 방법 제시한 것과 같이 추후의 고분자 물질 탐색에 유리 - 소자로 만들었을 때 기존에 알려진 소재 대비 2배의 에너지 저장 (6.5 J/cc)이 가능한 고분자 물질 4개 제시
적용 분야	에너지 저장 분야

구분	내용
사진/도표/데이터	The figure includes four chemical structures (A-D) of polymers with different side chains and two graphs (E-F) plotting Discharged energy density (J/cm³) against Electric field (MV/m). Graph E is at 150 °C and Graph F is at 200 °C. Both graphs compare 'Our work' (red circles) with 'Reported polymers/composites' (green oval) and 'Commercial polymers' (orange box). The legend lists various materials like POFNB, XL-VK, PEEK, PI, FPE, PC, e-BCB, e-BCB/Al₂O₃, e-BCB/BN, PI/Al₂O₃, PEI/BN, PEI-SiO₂, e-BCB/BN+BN, and PAI/BN+MMT. (A-D) 새롭게 제시한 고분자 구조, (E-F) 기존에 알려진 고분자 (녹색 원)이나 상용화된 고분자(주황색 박스) 대비 에너지 저장 효율이 우수한 소재(적색 원) 제시 (E) 150 °C (F) 200 °C Two photographs showing the physical properties of the synthesized POFNB film. The left image shows a thin, transparent film being tested with a needle. The right image shows a person wearing a black glove holding a piece of the transparent film. < 실제 합성한 POFNB 필름 >

구분	내용
제목	Integrated research drives the creation of materials knowledge for clean energy
소재	광양극, 광음극 소재
개발 배경	- 화석 연료 기반의 에너지 공급이 주가 되고 있으며 미래 세대를 위해서 지속 가능하고 확장 가능한 에너지 공급원 필요 - 기존의 재생 에너지로는 현재의 화석 연료 에너지를 수용하기 힘들어 재생 가능한 대규모 탄화수소 연료 개발이 필요
난제	- 태양 에너지를 이용하여 이산화탄소를 활용하여 재생 가능한 탄화수소 연료 분야의 과학적 기반을 구축
연구주체	Joint Center for Artificial Photosynthesis (JCAP)
연구방법	- Materials Project 데이터베이스의 물질들에 대해 DFT 계산을 통해 열역학적 안정성, 밴드 특성을 확인하여 광양극/광음극 소재로 활용 가능성이 있는 물질을 빠르게 탐색하고 이를 실험적으로 검증 - 표면에서 일어나는 반응에 대한 개방형 접근 방식의 데이터베이스 및 광양극/광음극 소재의 실험 데이터 및 합성 방법의 데이터베이스 개발하여 실제 소자에 접목
새로운 발견 (장점, 효과)	- 수 천개의 표면반응에 대한 DFT 계산의 reaction energy, barrier energy의 데이터 베이스 Catalysis Hub 개발 및 광화학 특징의 물질에 대해서 합성 및 특성 실험 데이터 정보가 있는 Materials Experiment and Analysis Database (MEAD) 개발으로 광화학 소재 물질군 탐색에 도움이 됨²³⁾ - 지난 50년간 발견된 소재 수와 비슷한 수의 후보 물질군을 계산과학을 통해 빠른 속도로 제시함 (49종의 산화물 광음극 소재 및 43개의 광양극 소재) - 광화학소자에 대해서 새로운 소재 및 소자에 대한 50건의 특허 출원서를 제출함 - 19.1% 효율의 광화학 물분해 소자 및 광화학 이산화탄소 분해 소자 개발함
적용 분야	태양광을 이용한 청정 에너지 분야

23) Catalyst hub : <https://www.catalysis-hub.org/>
MEAD: <https://doi.org/10.22002/D1.1256>

구분	내용
사진/도표/데이터	
	< 지난 50년간 개발된 광음극 소재의 수 >
	* JCAP에서 지난 50년간 개발된 광음극 소재와 비슷한 양의 수의 새로운 소재를 빠른 속도로 제시
	
	< 19%의 효율로 광화학 물분해 소자 개발 >
	* (좌) 실제 소자의 모식도 (우) 기존에 보고된 소자들과 효율 비교
	
	< 19%의 효율로 광화학 이산화탄소 분해 소재 개발 >
	* (좌) 소자 모식도 (우) CO의 패러데이 효율과 에너지 전환 효율

구분	내용
제목	Engineering predictable behavior into GaN devices: An approach to accelerating design and optimization
소재	GaN device
개발 배경	- GaN 기반 트랜지스터는 디바이스의 속도, 효율, agility 측면에서 우수함을 보이는 미래 소자 중 하나임 - 디바이스 최적화를 위한 설계 과정은 반복적인 테스트를 거쳐야 하고, 테스트를 위한 데이터베이스 또한 독점되어 있는 경우가 많기 때문에 비효율적임 - 기존의 상용 시뮬레이션 패키지들은 경험적 모델인 Fourier's law를 이용하기 때문에 반도체 디바이스 상에서의 시뮬레이션 정확도가 보장되지 않고, 이에 따라 원자적 스케일의 물리 현상을 포함하는 시뮬레이션의 필요성이 대두됨
난제	디바이스의 설계상의 모든 물리적 현상을 포함하는 TCAD 계산 툴킷 제작
연구주체	Air Force Research Laboratory (AFRL)
연구방법	- Semi-classical 모델과 양자 수송 모델을 결합하여 새로운 비평형 전자 수송 모델을 제시하였고 이를 이용한 TCAD 시뮬레이션 툴을 제작함 - 새롭게 제시된 비평형 전자 수송 모델은 기존 시뮬레이션에서는 고려할 수 없었던 전자기장 상호작용, 양자 터널링 효과 등을 포함하여 더욱 정확한 시뮬레이션이 가능함
새로운 발견 (장점, 효과)	- 기존의 상용 시뮬레이션 패키지와 본 연구에서 개발된 툴의 GaN 디바이스 시뮬레이션 결과가 처음으로 비교되었으며, 개발된 툴은 공용으로 사용이 가능함에 따라 디바이스 개발 단계에서의 비용 절감이 예상됨 - 고속 디바이스에서 주로 발생하는 일시적인 급격한 시그널을 발생시켰을 때, 기존 상용 패키지는 전자의 온도를 기술하는데에 실패했으나, 본 연구의 결과에서는 시그널의 짧은 시간 스케일에서도 일정한 경향성을 갖도록 기술하는 것이 확인됨 - GaN 디바이스 시뮬레이션은 회로 설계의 최적화 프로세스의 단계 중 하나로 적용되어 사용되고 있음. 세계 유일의 GaN-on-Si HEMT 생산 기업인 MACOM에서 본 연구의 주체인 AFRL과 협력하여 제품 설계의 초기 단계에 시뮬레이션 툴을 적용하고 있음 - 이를 통해서 시간과 가격의 비용이 높은 디자인/제조/검증의 사이클을 획기적으로 줄임으로써 디바이스 설계를 가속화시킬 수 있게 되었고, GaN 뿐만 아니라 다른 물질 기반의 디바이스 시뮬레이션에도 적용이 가능함
적용 분야	반도체 디바이스 시뮬레이션

구분	내용
사진/도표/ 데이터	GaN on Silicon General Purpose Amplifier DC - 2 GHz, 48 V, 100 W  NPT2022 Rev. V3 Features • GaN on Si HEMT D-Mode Amplifier • Suitable for Linear & Saturated Applications • Tunable from DC - 2 GHz • 48 V Operation • 20 dB Gain @ 900 MHz • 60% Drain Efficiency @ 900 MHz • 100% RF Tested • TO-272 Package • RoHS* Compliant and 260°C Reflow Compatible  Functional Schematic < MACOM사의 GaN-on-Si HEMT >

구분	내용
제목	Using ARES OS™ software to build your own autonomous research robot
소재(분야)	로봇(자율 연구 로봇)
개발 배경	- 자율 연구 시스템은 수백 또는 수천 번의 시행 횟수의 반복을 인공지능을 통해 최적화 시키고 로봇 실험을 추진함으로써 연구가 수행되는 방식에 혁신을 일으킬 가능성이 있음 - 그러나 지금까지 연구 로봇을 구축하려면 소프트웨어 개발에 상당한 투자가 필요했음
난제	효율적으로 실험 계획을 짤 수 있는 인공지능 플래너를 통해 자율 연구 시스템 구축
연구주체	미 공군연구소(AFRL)
연구방법	- 실험을 계획해주는 인공지능 플래너, 실험을 자동적으로 수행할 수 있는 로봇, 그 결과를 인풋으로 읽어와 분석할 수 있는 알고리즘을 통해 자동적으로 연구를 진행할 수 있는 소프트웨어 ARES OS™ 개발 - 탄소나노튜브의 화학기상증착 공정에서 성장 속도를 센서를 통해 입력값으로 받아 ARES OS™의 인공지능 플래너를 통해 공정 조건의 최적화를 진행 - 인라인 이미지 캡처 기술을 3D 프린터에 넣어 프린팅의 결과를 입력값으로 받아 ARES OS™을 사용하여 원하는 형태의 프린팅을 할 수 있는 세팅에 대한 최적화 진행
새로운 발견 (장점, 효과)	- 공군 연구소의 오픈 소스 소프트웨어로서 자유롭게 사용할 수 있으며, 연구원들이 직접 연구 로봇을 구축하는 기반으로 활용 가능한 ARES OS™ 제공함 - MGI에서 수많은 데이터를 형성하는 것의 병목현상은 인간지능이 필요한 데이터 분석 및 추후의 실험 설계임. 실험 데이터를 바탕으로 인공지능이 결과 분석 및 추후의 실험 조건을 제시함으로써 넓은 범위의 실험 변수에 대해서 자동 반복 탐색이 가능해짐 - 탄소나노튜브의 화학기상증착 공정과 3D 프린팅의 예시에서 ARES OS™를 통해 13개의 변수에 대한 최적화를 시도하여 수백만의 시도 횟수를 수백의 시도만으로 가속화 시킴으로써 실제 사례에 성공적으로 접목시킴
적용 분야	ARES OS™은 탄소나노튜브 합성, 유동화학 및 적층제조 분야에서 성공적으로 공정 최적화 조건을 탐색함

구분	내용
사진/도표/ 데이터	< 탄소나노튜브 화학기상증착 공정에서 사용된 ARES 장비 > < 3D 프린팅 기계에서 사용된 ARES 장비 >

□ 딥러닝을 통한 신소재 탐색설계의 가속화 사례

가. 기존 연구

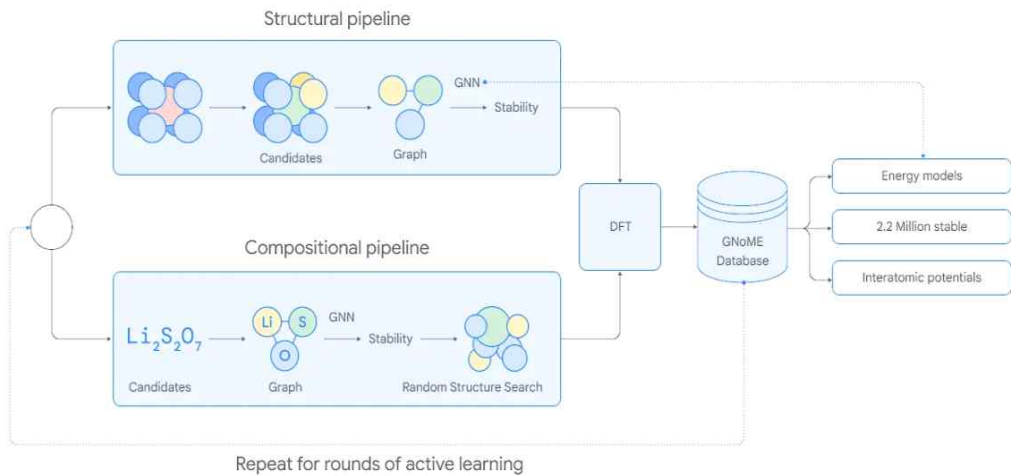
- 과거 과학자들은 알려진 결정들을 조정하거나 새로운 조합의 요소들로 실험함으로써 새로운 결정 구조들을 찾았는데, 이는 시간과 비용이 많이 들고 시행착오가 반복되는 과정이었음
- 지난 10년 동안, Materials Project와 다른 단체들에 의해 주도된 컴퓨터적 접근법들은 28,000개의 새로운 물질들을 발견하는 것을 도왔으나, 지금까지 새로운 인공지능 유도 접근법들은 실험적으로 실행 가능한 물질들을 정확하게 예측하는 능력에 있어서 근본적인 한계가 있었음

나. 새로운 시도

- GNoME(Graph Networks for Materials Exposition)라는 새로운 딥러닝 도구를 사용하여, ①800년치 지식에 해당하는 220만 개의 물질을 발견했고, ②예측에 있어 전례 없는 규모와 정확성을 보였음
 - ※ 이 중 38만 개의 물질은 안정성이 뛰어나고 미래 기술발전을 위한 유망 후보로 간주되며, 초전도체 및 리튬이온 전도체와 같은 혁신적인 소재들을 포함함
 - ※ 또한 이중 736개의 새로운 물질이 외부 실험 연구실에서 독립적으로 합성되어 모델의 예측이 현실적이라는 점이 입증됨
- Materials Project의 소재와 GNoME를 활용하여 자율 실험실(auto-nomous lab)은 결정 구조에 대한 새로운 조합을 만들고 41개 이상의 새로운 물질을 성공적으로 합성하여 AI 기반 소재 합성의 새로운 가능성을 창출

다. 의미

- GNoME는 실험 비용을 절감하면서도 새로운 물질을 예측하는 데 인공지능을 활용하여 중요한 과학적 성과를 이룸



< 그림 40 > 소재탐색을 위한 그래프 네트워크(graph networks) 활용

※ 출처 : Amil Merchant and Ekin Dogus Cubuk(2023). Millions of new materials discovered with deep learning

□ 신소재의 고속합성을 위한 자율실험실 운영 사례

가. 배경

- 신소재의 계산 스크리닝 속도와 실험적 실현 간의 격차를 줄이기 위한 목적에서, 무기 분말(inorganic powders)의 고체 합성을 위한 자율 실험실(A-Lab)을 설계

※ ❶데이터베이스와 ❷머신러닝 기반의 데이터 해석, ❸텍스트 마이닝된 문헌 데이터에서 학습된 합성 휴리스틱(heuristics), ❹능동학습(active learning)을 로봇공학과 통합한 A-Lab을 통해 분말 형태의 새로운 무기소재 합성을 최적화

나. 과정 및 결과

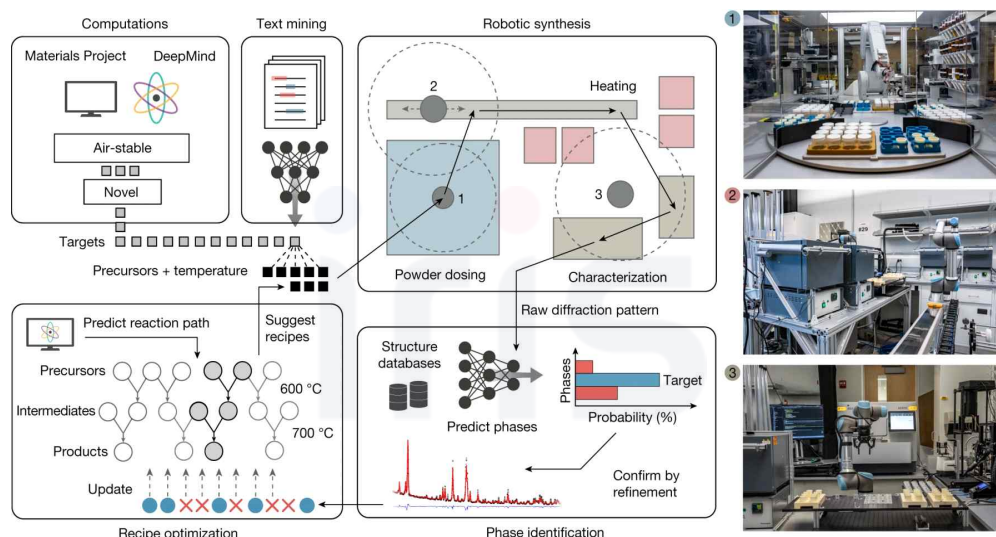
- 17일 동안 Materials Project와 Google DeepMind의 데이터를 활용하여 58개의 타겟 중 41개의 새로운 화합물을 만들어내는 데 성공함(성공률: 71%)

※ 합성 방법(recipe)은 문헌에서 훈련된 자연어 모델(natural language model)에서 제안되었고, 열역학에 기초한 능동 학습 접근법을 사용해서 최적화되었음

※ 실패한 합성에 대해서는 분석을 통해 소재 선별과 합성 설계를 개선하기 위한 직접적이고 실행 가능한 제안(suggestions)을 제공하는 방식의 능동 학습을 수행함

다. 의미

- 자율적인 소재 발견을 위한 AI 기반 플랫폼의 효과를 입증하고 계산, 역사적 지식 및 로봇공학의 통합을 촉진함



< 그림 41 > A-Lab을 사용한 자율적인 소재 발견

※ 출처 : Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., & Ceder, G. 2023. An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials. Nature, 1-6.

□ 해외기업의 AI·데이터 기반 소재개발 사례

- 제조기업을 중심으로 물성·공정 데이터와 AI를 활용하여 산업소재 개발 시간·비용 획기적 절감 및 공정 최적화 본격 추진²⁴⁾
 - BASF(독일) : 소재DB 기반 AI 개발 착수, 환경촉매용 신소재 개발 적용
 - JSR(일본) : 연구소 데이터 DB화 70% 달성, 디스플레이 소재개발 적용
 - Bridgestone(일본) : 소재 특성 예측 시뮬레이션 SW 플랫폼을 활용, 친환경-고에너지효율 타이어 제조 성공(연구기간 3년 단축, 개발비 3억달러 절감)
 - Lanxess(독일) : 유리섬유 표면처리제 최적 후보 발굴 및 복합소재 물성 개선(기계적 물성 향상 21%, 새로운 배합의 성능 불확도 58% 감소)
 - ※ (플라스틱/유리섬유 복합소재 배합 최적화) 유리섬유, 고분자간 계면접착력을 높일 수 있는 조합을 데이터와 인공지능을 활용하여 도출, 수 조개의 조합 중 실험 후보조합 십수 개 발굴
 - Showa Denko(일본) : 소재 배합 탐색에 필요한 물성 예측, 설계 제안 시스템 개선(기계학습에서 시스템 운영까지 종전 5일 → 1일로 단축)
 - ※ (기계학습 효율화 시스템 구축) 최신 실험의 데이터 입력과 데이터 가공을 자동화-데이터 과학자와 SW엔지니어가 공동 개발할 수 있도록 구성



< 그림 42 > MLOps(Machine Learning & Operations) 개념

- Panasonic(일본) : 계산 및 AI 활용하여 유기 반도체 신규 물질 발견 및 특허화(기존 유기 반도체 물질 대비 25% 성능 향상)
 - ※ (유기반도체소재 발견) 분자동력학, 양자역학계산 (日 Panasonic), AI모델 개발 (美 Cintrine) 협업으로 신규 물질 탐색, 수십억 개 후보물질 중 4개 신규 물질 발굴 및 특허화

24) BASF(독일), JSR(일본), Bridgestone(일본) 사례는 데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축·활용방안(관계부처 합동, 2020) 참고하여 작성

2.4. 종합분석 및 시사점

□ 종합분석

구분	주요 내용	
	국내	국외
정책 동향	○ 연구데이터 공유·활용 전략(과기정통부, '18), 소재 연구데이터 플랫폼 구축방안(과기정통부, '20) 등 소재연구데이터 수집·공유 중요성 인식 및 기반조성 노력 확대 ○ 국가전략기술을 뒷받침하는 미래소재 확보 전략(과기정통부, '23)을 발표, 데이터·AI를 활용한 소재연구 활성화를 위한 다양한 전략 수립 및 지원정책 추진 중	○ '11년 미국의 '소재게놈 이니셔티브(MGI, Materials Genome Initiative)' 선언 이후 소재 연구개발 디지털화가 급속히 진행 중이며, 전 세계적으로 소재데이터, AI, 자율실험 및 이를 통합한 디지털 인프라(플랫폼) 구축과 인력양성이 활발히 추진 중
연구 동향	○ 소재 연구데이터를 수집하고 활용하기 위한 사업·과제로, 미래소재디스커버리 사업(과기정통부, '15~'24), 소재 연구데이터 플랫폼 구축사업(과기정통부, '20~'27), AI 기반 초임계 소재(산업부, '20~'27) 등이 진행 중 - 그러나 미래소재디스커버리 사업, 소재 연구데이터 플랫폼 사업 등의 경우 아직 신소재 탐색·설계 부분에 집중되어 데이터 기반의 전주기 연계·활용에 일정 부분 한계 존재	○ 데이터 과학 및 AI의 비약적인 발전을 바탕으로 새로운 소재의 발견과 개발을 보다 효율적이고 협력적이며 혁신적으로 만들기 위한 글로벌 노력이 활발히 진행 중 ○ 머신러닝과 AI, 자동화된 실험, 양자 컴퓨팅, 데이터 프레임워크 등의 연구 트렌드에 주목
주요 성공 사례	○ (전남대) '21년 AI를 활용해 새로운 소재를 탐색하는 플랫폼을 구축, 새로운 고성능 양극 소재 세계 최초 개발 성공 ○ (미래소재디스커버리) 생체모방형 디(d)-오비탈 매니폴드 반응 제어소재('17.9.~'23.8.) 과제에서 생체모방 재료공학과 전산나노광학의 창의적 융합을 통해 '초고민감도 분자 카이랄성 측정기술 개발'에 성공, 네이처(Nature, IF 69.504), 12월 15일 게재 ○ (한국타이어) AI와 사물인터넷(IoT) 기술을 활용한 설비 이상 탐지 예측 시스템 개발 (기존 대비 3~4배 높은 예측 정확도)	○ (MGI 전략) 극한 환경에 활용 가능한 고엔트로피 세라믹의 합성 가능성 예측에 새로운 모델 적용, 약 100시간이 걸리는 기존 방식 대비 새로운 모델에서는 약 1ms(0.001초) 소요 등 각종 성공사례 창출 중 ○ (독일 Lanxess) 플라스틱/유리섬유 복합소재 배합 최적화로 기계적 물성 21% 향상, 새로운 배합의 성능 불확도 58% 감소

□ 시사점

- 각국의 소재연구는 기존의 전통적 방식에서 데이터과학 및 AI의 발전을 활용한 새로운 연구 방식으로 변화하며 개발 소요시간 및 비용 단축 중
 - 최근 AI를 활용한 신소재 탐색설계 단계의 가속화 및 자율실험실을 통한 신소재 고속합성 사례 등 성공적인 사례들이 창출되고 있음
- 우리나라도 데이터를 기반으로 새로운 방식의 소재개발을 촉진하기 위해 다양한 정책과 지원전략을 마련 중이나, 아직 데이터는 신소재 개발의 일부 분야(탐색·설계 등)에 집중되어 있거나 분야별로 분절적으로 연구되고 있는 상황
- 따라서 동 사업의 시사점을 통해 국가 소재연구데이터 수집·축적과 함께 이를 전주기 연계 소재개발 연구에 활용하는 연구방법론을 국내 확산·활성화시킴으로써 미래 전략소재를 보다 효율적으로 개발할 수 있도록 관련 정책 수립 및 지원 필요
 - ※ 실험로봇 등 자율화 개념의 동 사업 도입과 관련해서는 소재 연구분야의 특성, 연구팀의 구성, 기 확보된 데이터의 양 등에 따라 연구팀마다 선택적으로 판단할 수 있는 영역으로 설정 가능
- 이와 더불어 신소재의 상용화를 가속화하기 위해서는 산업계의 관심과 참여를 이끌 수 있도록 기업멤버십 등의 유인책이 요구됨

3. 유사사업·과제 현황 및 중복성 검토

3.1. 유사사업·과제 현황분석

구분	데이터 기반 미래소재(HUB구축) 사업 (동 사업)	미래소재디스커버리사업 (유사사업)	AI기반 초임계 소재* (유사과제)
부처	과학기술정보통신부	과학기술정보통신부	산업통상자원부
사업기간	‘24~’29년	‘15~’24년	‘20~’27년(동 과제 기준)
예산	약 780억원	3,066억원	94억원* * ‘20~’23년 기준, ‘24~’27년 연 40억 내외 추가 지원 예정
과제당 지원기간	• 5년(2+3)	• 6년(3+3)	• 7년(1+1+5)
과제당 지원규모	• 선기획 : 5천만원 내외 • 본연구 : 30억원 내외/년	• 선기획 : 5천만원 내외 • 본연구 : 15억원 내외/년	• 개념연구 : 2억원/년 • 선행연구 : 5억원/년 • 본 연구 : 40억원 내외/년
목적	• 계산과학, AI, 실험로봇 등을 기반으로 한 소재개 발 전주기 데이터의 조속 한 확보를 통해 소재탐색 과 시스템·소자 최적화 가 속화 및 원천소재의 사업 화 가능성 극대화	• 新연구방법론을 활용하여 기존 소재에서 볼 수 없 는 새로운 물성과 기능을 구현하는 미래소재 개발 및 미래소재 원천특허 확보	• 데이터 기반의 물성 및 공정예측 통합 AI 플랫 폼을 구축 및 활용한 미래 모빌리티용 초임 계 소재개발
주요 내용	• 국가전략기술 초격차 달 성, 미래 공급망 이슈 대 응 등에 필요한 신소재를 신속히 개발하기 위해 AI 를 활용한 데이터 기반의 신연구방법론을 적용, 핵 심 전략소재 원천기술 확 보 및 소재개발의 소요시 간 및 비용 단축 • 국가 소재 데이터 플랫폼 과의 연계성을 통한 국가 소재연구데이터 및 연구 노하우 축적	• 계산과학 등 新연구방법 론을 활용하여 4대 중점 추진분야에 대한 신소재 개발 및 원천특허 확보 * ①극한물성 구조·환경 소재 ②양자 알케미 조성제어 소재 ③스케일링 한계극복 ICT 소재 ④인간오감 증강소재	• 통합 AI 플랫폼 구축: 물성예측에 최적화된 머신러닝 알고리즘 도 출, 역방향 최적화 플 랫폼 구축, 실험데이터 기반의 생산플랫폼 (DOE)을 구축 등 • 초임계 소재 후보물질 개발: 구조용 초고장력 강, 전고체 전지용 초 이온전도체 • 멤버십 기업 구성 및 활용
차별성	• 기존 시스템과 연계한 AI 활용 데이터 기반의 전주 기(탐색·설계-측정·분석 -공정설계) 소재개발 • 국가 소재연구데이터 및 노하우 축적을 통한 후속 연구 수행	• 新연구방법론 활용을 통 한 신소재 탐색·설계에 초점	• 자체적으로 개발한 통합 AI 플랫폼 기반의 신소재 기술개발 중인 과제로, 소 재 연구데이터 플랫폼 등 기존 국가 데이터 시스템 과의 연계성 확보에 한계

* 내역사업명 : 산업기술알키미스트프로젝트사업(R&D)(‘22~’31)

구분	가상공학 플랫폼 구축사업* (유사과제)	소재 연구데이터 플랫폼 구축사업** (유사과제)
부처	산업통상자원부	과학기술정보통신부
사업기간	'22~'26년	'20~'27년
예산	약 1,138억원	약 640억원
과제당 지원기간	• 약 5년	• 약 7년
과제당 지원규모	—	• 신소재 탐색 및 설계 : 1.25~2.5 억원 내외/년 • AI 개발 : 2억원 내외/년
목적	• 소재·부품의 개발에 필요한 다양한 시뮬레이션 기반 작업과 이를 바탕으로 인력양성과 기업지원을 할 수 있는 원스톱 플랫폼 개발 • 국내 중소·중견기업들의 소재·부품의 상용화 기간 및 비용을 단축하고 디지털 전환 역량의 내재화	• 소재 개발기간 단축 및 효율성 제고를 위한 소재 연구데이터 수집·관리·활용 플랫폼 구축 및 기술 개발
주요 내용	• 소재를 선정하는 단계에서부터 최종 제품 평가에 이르기까지 일괄 기술 개발 지원을 위한 인프라 구축 • 데이터 축적 및 관리 • 조성·공정조건에 따른 소재 물성, 공정 결과 등을 예측하기 위한 AI 개발, 혹은 그 역방향 AI 개발 • 인력양성, 성과확산 등	• 소재 연구데이터 플랫폼 구축·운영 • 3대 응용분야별 소재 연구데이터와 인공지능기술 연계에 의한 데이터 기반 신소재 탐색·설계 기술 개발 • 소재 연구에 필요한 분석, 예측 및 인공지능 기술개발
차별성	• 산업체 지원 강조	• AI 연계 데이터 기반 신소재 탐색설계에 초점을 두고 있어, 측정 분석-공정설계까지의 연계 부족

* 내역사업명 : 소재부품기술기반혁신사업

금속소재제조 디지털혁신 플랫폼 구축(재료연), 세라믹소재 분야 디지털 전환을 위한 시뮬레이션 AI 기반 가상공학 플랫폼 구축(세기원), 기능성 플라스틱(전기자동차용, 차세대 디스플레이, 전자부품) 가상공학 플랫폼 구축(화학연), 디지털 전환 대응 데이터, AI, CAE 기반 섬유 신소재 및 복합구조체 개발지원 가상검증 플랫폼 구축(다이텍연) 등의 과제가 진행 중

** 내역사업명 : 나노·소재기술개발(R&D)

구분	디지털융합R&D플랫폼 연구개발 및 서비스* (유사과제)	소재공정조합설계기술 개발** (유사과제)
부처	과학기술정보통신부	과학기술정보통신부
사업기간	'22~'32년	'21~'26년
예산	450억원	총 480.75억원
과제당 지원기간	- 중양센터: 10년 - 전문센터, 정책센터: 5년	'21~'26년
과제당 지원규모	- 중양센터 : 45억 원/년 - 전문센터 : 3개/년, 10억 원/년, 센터별 - 정책센터 : 26.5억 원/년	- 구조·안전 : 총 167.15억원 - 스마트·IT : 총 156.8억원 - 에너지·환경 : 총 156.8억원
목적	계산과학·데이터·인공지능 중심 R&D 환경 맞춤형 제공을 통한 융합연구 활성화	실험실 수준의 소재 구현(합성) 원천기술의 조기 상용화를 견인할 新연구방법론 기반 공정조합설계 기술개발 및 실험 실증
주요 내용	- 계산과학·데이터·인공지능 기반의 첨단 융합연구·교육환경 제공을 위한 디지털융합R&D플랫폼 구축 및 서비스 － (중양센터) 다분야 활용·융합연구 가능한 공통플랫폼 (SW·HW) 구축·운영 － (전문센터) 공통플랫폼 기반 분야별 맞춤형 특화플랫폼 개발 및 연구 수행	계산집적공학·인공지능·조합실험 등을 활용하여 최적의 공정설계를 위한 조건 탐색범위 최소화 및 검증 솔루션 개발
차별성	신소재 개발보다는 플랫폼 개발에 초점	공정조합설계 분야에 대한 연구로서, 전주기 연계협력에 한계

* 내역사업명 : 첨단 사이언스 교육 허브 개발 사업(EDISON)

** 2021년 개편된 '나노 및 소재기술개발사업'의 '연구기반혁신' 유형에 속하는 과제임

3.2. 유사사업·과제와의 차별성 및 연계방안

□ 주요 유사사업·과제와의 차별성

- 계산과학 등 新연구방법론을 활용한 소재개발 관련 과제들*은 신소재 탐색·설계 분야에 집중된 경향

* 미래소재디스커버리사업(과기정통부, '15~'24), 소재연구데이터 플랫폼 구축 사업(과기정통부, '20~'27) 등

- AI 기반 초임계 소재 과제는 자체적으로 통합 AI 플랫폼 구축을 통해 탐색·설계부터 공정설계까지 데이터를 활용하여 신소재 개발 연구 중 이나, 데이터 표준화 템플릿 등에 있어 기존 시스템과의 연계성이 부족
- 즉 그동안 대다수의 연구들의 경우 소재 탐색 연구와 이를 스케일업 해서 공정을 최적화하는 연구가 별개로 진행되어 왔으며, 이로 인해 실제 상업화까지 이른 소재가 많지 않은 실정임
- 이 간극을 해소하기 위한 방안으로 TRL 1부터 4~6까지* 특정 소재에 대한 전주기 데이터를 단계별로 모아서 연구한다는 것이 동 사업의 핵심이자 가장 큰 차별성임

※ 연구기간 내 TRL 1부터 4~6까지 도달하기 위해서는 선기획 단계에서 연구단들이 동 목표를 사전에 숙지하고 연구계획을 구체화할 수 있도록 유도할 필요

- 이를 통해 신소재의 상용화가 가속화될 것으로 기대됨

□ 연계방안

- 소재연구데이터 플랫폼 구축 사업 등 기존 사업과의 연계하여 데이터 표준화 템플릿을 활용하고, 연구과정에서 생성된 소재연구데이터(계산데이터, 실험데이터 등)를 공유·수집함

4. 사업 추진계획(안)

동 추진계획안은 동향조사·분석 및 전문가 자문 등을 통해 연구진이 제안하는 안으로, 세부사항은 정책방향, 환경분석 등에 따라 변경될 수 있음

4.1. 사업 추진 방향 및 추진 전략(안)

4.1.1. 사업 추진방식에 대한 검토

- 사업 취지 및 목표달성에 더욱 적합한 방식을 도입하기 위해 경쟁형 R&D 방식^(1안)과 비경쟁형R&D 방식^(2안)에 대한 검토를 수행
- (경쟁형 R&D^(1안)) 선기획^(A안)/예비연구^(B안) 단계에서 동일 연구대상 소재 주제에 대하여 복수의 연구기관이 경쟁적으로 연구를 수행하고, 평가결과에 따라 본연구 지원대상 연구팀을 선정
 - 연구진들이 자체적으로 사전연구를 수행할 수 있도록 허브를 연구주제(소재) 분야 수준으로 구성하는 것이 적절할 것으로 예상
 - (비경쟁형 R&D^(2안)) 별도의 선기획/예비연구 없이 연구대상 소재 주제별 본연구 수행 연구팀(주제별 1개 이내) 선정 및 지원
 - 사전연구를 수행하지 않으므로 구체적인 수준의 연구주제 도출하는 것이 적합할 수 있음

< 표 12 > 연구주제(비경쟁형R&D) 도출 방안

구분	내용
주제도출 방향	• (1안) 국가 아젠다*로부터의 소재허브 도출 * 건강, 안전, 고령화, 에너지/자원, 생활환경개선 등 제3차 과학기술 기반 사회문제해결 종합계획('23~'27)(안)의 사회문제 활용 • (2안) 국가전략기술로부터 소재허브 도출 • (3안) 미래 핵심기술로부터 소재허브 도출
연구주제 선정방안	• 중점기술*별로 금속, 화학, 세라믹 등 원소별 소재개발 주제를 작성한 후, 우선순위 평가를 통해 원소별로 균형 있게 연구주제를 선정하는 방향 고려 * 이차전지, 반도체 등
연구주제 우선순위 평가 기준(안)	• 이슈 또는 전략성, 데이터 기반 구축 및 활용 능력 수준, 산업 성숙도, 연구자 풀과 융합팀의 효용성 등
고려사항	• 연구주제 도출시 기존의 타 사업 연구주제와는 다른 HUB 사업만의 차별성이 드러나면서 소재분류체계와의 연계성이 확보되어야 함

※ '23. 11. 14. 자문회의 논의내용을 바탕으로 작성

< 표 13 > 경쟁형 R&D와 비경쟁형 R&D 방식의 동 사업 적용(안) 비교

구분	경쟁형 R&D 적용(1안)		비경쟁형 R&D 적용(2안)
지원방식	• 동일한 연구주제에 대하여 3배수의 연구팀이 경쟁적으로 선기획/예비연구를 수행하고 결과에 따라 본연구 지원대상 연구팀 선정		• 특정 연구과제에 대해서 한 연구자 또는 하나의 연구기관만을 선정하여 연구비를 지원
주요 평가단계	• 선기획/예비연구 지원대상 연구팀 선정평가(3배수)		• 본연구 지원대상 연구팀 선정평가
	• 선기획/예비연구 결과평가 ※ 본연구 지원대상 연구팀 선정		
	• 본연구 단계평가 ※ 결과에 따라 연구기간 및 연구비 변동 가능		• 본연구 단계평가 ※ 결과에 따라 연구기간 및 연구비 변동 가능
	• 최종평가		• 최종평가
연구기간	총 5년		총 5년
	▶ (A안) 선기획(4개월)+ 본연구(2년+3년)	▶ (B안) 예비연구(8개월) + 본연구(2년+3년)	▶ 본연구(2년+3년)
기대효과	• 경쟁을 통한 R&D 투자의 효율성 제고 및 성과수준 향상 • 다수의 연구자에게 연구기회를 부여함으로써 연구역량 제고		• 연구수행자에게 보다 더 안정적인 연구환경 조성 가능
한계	• 장기적이고 안정적인 연구환경 조성의 어려움		• 연구성과를 향상시키고자 하는 동기 약화 가능

□ 경쟁형 R&D^(1안)에서는 사전연구로서 선기획^(A안)과 예비연구^(B안)의 적용 가능성을 검토

- (취지) 선기획^(A안)과 예비연구^(B안)는 공통적으로 본연구 수행에 앞서 전주기 데이터 기반 소재개발 연구계획 및 데이터 수집 계획 등을 구체화하고 체계화함으로써 사업 목표 달성 가능성을 제고하고자 함

※ 동 사업의 목적 및 내용 등을 고려할 때 「과학기술기본법」 제15조의2 상의 ‘도전적 R&D’ 성격이 강함

과학기술기본법[시행 2022. 12. 11.]

제15조의2(도전적 연구개발의 촉진) ③ 정부는 도전적 연구개발을 촉진하기 위하여 동일한 연구주제에 대해 복수의 연구기관 또는 연구자가 경쟁하는 방식으로 국가연구개발사업을 추진할 수 있다.

※ 경쟁형 연구방식의 유형 : ❶기획단계에서 경쟁하는 방식, ❷연구개발단계에서 경쟁하는 방식 ❸경진대회 또는 발표회 등 대회를 통하여 경쟁하는 방식 ❹그 밖에 공정하고 효율적인 연구수행을 위하여 중앙행정기관의 장이 정하는 경쟁 방식(과학기술기본법 시행령 제24조의3①항)

- (주요 목적) 선기획은 데이터 기반 전주기 소재개발 연구방식의 적용 및 원천기술 확보 가능성을 제고하기 위해 충분한 기간 동안 연구단에서 자체적으로 개발 대상 소재 특성 등을 반영하여 상세 기획을 수행한다는 데 목적이 있음
 - 그러나 예비연구는 연구계획의 고도화뿐만 아니라 후보물질 탐색 및 기술적 구현 가능성 등 사전검증 수행을 주요 목적으로 함
- (연구범위) 선기획은 분야별 난제 도출, 이를 해결하기 위한 전주기 데이터 기반 연구내용 및 방법 구체화, 데이터 구조 구축 등을 수행하고, 실험을 통한 개념검증까지는 진행하지 않음
 - 그러나 예비연구는 연구내용 및 방법 구체화뿐만 아니라 후보물질 탐색 및 기술적 구현 가능성 등 사전연구 수행을 연구범위에 포함함

< 표 14 > 선기획과 예비연구의 주요 내용 비교

구분	선기획(A안)	예비연구(B안)
개념 및 목적	데이터 기반 전주기 연계 소재개발 방식의 적용 및 원천 기술 확보 가능성을 제고하기 위해 분야별 특성이 고려된 연구내용, 방법 등 연구계획을 구체화·체계화·고도화하는 연구	연구계획의 고도화, 후보물질 탐색 및 기술적 구현 가능성 등을 사전에 검증하기 위한 연구
지원기간/ 규모(안)	협약일로부터 4개월/과제별 약 5천만원 이내	협약일로부터 8개월/과제별 약 1억원 이내
주요 수행내용	- 분야별 난제 도출 및 이를 해결하기 위한 전주기 데이터 기반 연구내용 및 방법 구체화 - 데이터 구조 구축 및 수집계획 구체화 - 기업멤버십 설계 등	작동
		연구대상소재 개발을 위한 후보물질 탐색 및 기술적 구현 가능성 등 사전검증
장점	- 특정분야에서 연구주제간 경쟁을 유도함으로써 특정 연구 주제 사전 도출 및 RFP 작성 한계 극복 가능 - 내용의 충실성, 계획의 타당성 및 체계성 등 연구계획의 고도화 - 분야별로 적합한 실험데이터 구조 등을 마련함으로써 후속 연구자들의 데이터 활용도를 제고할 수 있는 양질의 DB 구축 계획 수립	작동
		실험연구를 통해 연구단별 전주기 데이터 연계·활용 연구 체계 고도화
단점	특정분야의 연구주제간 상이한 난제와 해결책 및 적절한 목표 도출 여부를 평가할 수 있는 전문 평가위원이 필요	짧은 기간 동안 실험을 통한 성과창출의 어려움 등

□ 소결

- 여러 가지 방식의 장단점과 전문가 자문회의 논의결과 등을 종합적으로 고려할 때 사업의 본래 취지에 가장 부합하고 소기의 목표 달성에 보다 효율적인 방법으로 경쟁형-선기획 방식을 제언함
- ‘전주기 데이터 연계 신소재 개발’이라는 동 사업의 혁신·도전적인 성격과 소재 분야별 상이성을 반영하기 위해서는 경쟁형 방식의 사전 연구를 통해 사업 취지와 목적에 대한 명확한 이해를 바탕으로 연구를 수행할 수 있도록 유도할 필요가 있음
 - 소재연구의 특성상 연구분야에 따라 신소재 개발에 필요한 후보 물질 데이터 탐색의 범위나 적합한 데이터 구조, 시스템화의 개념 등에 있어 상이함이 큰 상황이며, ‘소재시스템 순환체계 속에서 단계별 피드백 및 전주기 데이터 확보’는 아직 국내에서 익숙하지 않은 연구방식임
 - 따라서 연구진들이 사업 목표 달성 및 양질의 성과를 도출할 수 있도록 자체적으로 자신의 분야에 가장 적합한 단계별 연구계획을 수립할 수 있는 충분한 기간을 보장해 줄 필요가 있음
- 사전연구의 두 가지 방식 중에서는 예비연구보다 선기획방식이 사업 취지에 보다 적합할 것으로 판단됨
 - 예비연구를 시행할 경우 충분한 기간 동안 연구단에서 자체적으로 개발 대상 소재 특성 등을 반영하여 상세 기획을 수행하는 것보다 제한된 기한 동안 우수한 성과물을 창출해내기 위한 경쟁 위주로 연구가 진행될 우려가 있음
 - 즉 소재연구분야별 난제에 대한 고찰, 다양한 방법론에 대한 탐색, 효과적인 방식의 연구계획의 구체화, 데이터 구조 구축 등 동 사업의 목적을 달성하기 위해 필요한 요소들에 대해 시간적으로도 충분히 탐색할 기회가 줄어들 수 있음
 - 따라서 선기획 단계에서 데이터 구조 구축, 표준화, 주요 수행방법 등 최소한의 가이드라인을 제공하여 연구단이 우수한 성과를 도출할 수 있도록 할 필요가 있음

- 결론적으로 동 사업은 12대 국가전략기술분야와 연계하여 미래에 활용될 소재의 신속한 탐색과 선점을 지향하는 임무중심 R&D 성격이 강하므로 추진 목적에 맞고 효과적인 연구방법론을 구체화하기 위해서는 사전에 필요 요건들을 갖출 수 있도록 선기획 단계에서 유도하는 것이 바람직할 것으로 제안함



4.1.2. 전주기 데이터 연계·활용 기반 소재연구 방향

□ 연구 방향

- ‘소재-시스템 간 간극 해소’를 위해 TRL 1부터 5까지 하나의 소재에 대한 전주기 데이터를 단계별로 수집·생성·활용하며, 각 단계 간 상호 연계·피드백을 통해 신소재의 상용화를 가속화



< 그림 43 > 데이터 기반 소재 허브 연구단 추진체계(소재-시스템 선순환 체계)

※ 전문가 자문회의('23. 12. 8., 12. 22., 12. 26.)를 통해 작성

□ 데이터 구축·활용성·시스템과의 연계 방안

- (DB 구축) 목적 달성의 임무가 명확한 R&D 사업에서 방대한 양의 모든 특성을 다 측정하며 소재를 개발하는 것은 현실적으로 많은 한계가 있으므로 분야별로 용도에 맞춘 데이터 구축이 필요함

※ 금속, 세라믹, 화학 등 소재별 DB 구조가 다르기 때문에 이를 수집·통합·관리할 때 어려움이 있을 수 있음

※ 또한 동일한 소재에 대해서도 목적에 따라 중요하게 측정되는 데이터가 다르기 때문에 DB를 통합할 때 공백영역 발생 가능

※ 단, 연관산업/근접분야 간 연구데이터의 공유·활용이 가능할 여지가 있을 수 있음

- 즉 이미 존재하는 보편적인 기본 데이터를 추가로 축적하는 것보다는 특정 용도에 맞는 고품질의 데이터를 생산하는 것이 필요함
- 또한 실험데이터 수집 측면에서 볼 때, AI 활용 모델 개발, 데이터 수집 자동화 체계 구축 등 그간의 연구발전에 따라 데이터 수집과 정에서 발생가능한 애로사항은 과거보다 적을 것으로 예상됨
- 특히 실험로봇 등에 대한 예산지원이 뒷받침될 수 있다면 데이터 기반 전주기 소재연구 체계로의 전환을 더욱 가속화시킬 수 있을 것으로 기대
- (데이터 활용성) 주제마다 데이터 구조가 상이하거나 특수한 용도의 고품질 데이터 중심으로 구축이 예상됨
- 이러한 경우에도 데이터 그 자체가 의미가 있을 뿐만 아니라 후속연구 시 데이터 수집 기술, AI 모델 구축 및 확장 등의 기술적인 측면에서 데이터 기반 소재연구에 적극 활용 가능
- (시스템 연계) 기존의 시스템(국가 소재 데이터 스테이션)은 데이터 수집 관점에서 분류한 것이므로 동 사업이 지속적이고 팽창적으로 나아가기 위해서는 기존 시스템과 연계될 필요가 있음

< 데이터 수집 체계 검토 사항 >

- 일반적으로 산업데이터는 TRL 6 이상의 연구를 통해 얻어지는 데이터로서, 해당 데이터는 기업의 노하우 등이 다수 포함되어 있어 보안상 데이터 공유에 많은 제약이 따름
 - 이러한 이유로 기업체에서 산업데이터의 수집 및 공유 목적으로 국가 프로젝트에 참여하는 데에는 많은 한계가 존재
- 산업데이터 수집·공유·활용 체계를 활성화하기 위해서는 데이터 유료화 등의 인센티브 제도를 통해 기업체에서도 데이터 수집에 대한 관심과 데이터 관련 신산업 창출 기회를 부여하는 방안을 고려 가능
 - ※ 연구자가 무료로 공유할 수 있는 데이터와 유료화 데이터를 구분하여 지정
 - ※ 모든(무료/유료) 데이터는 국가 소재 데이터 스테이션 등 동일 플랫폼에서 관리하고, 해당 플랫폼에서 유료데이터의 거래가 가능하도록 하는 기능을 구현(이에 대한 구체적 계획 수립은 추가 기획 필요)
- 개발 신소재의 사업화를 가속화하기 위해서는 소재-시스템(소자) 사이의 간극을 해소하는 것이 무엇보다 중요하므로 소재에서 시스템까지의 전주기 데이터(TRL 1~6)를 체계적으로 수집하고 활용하는 전략이 효과적일 것으로 예상
 - 기업체의 경우 연구 단계에서 개발된 신소재를 바로 사업화하기에는 많은 위험성이 있어 그 소재의 시스템상에서 성능을 확인한 후 사업화 연구를 진행하려는 경향이 있기 때문에 소재 전주기 데이터 확보 시 산업체에서 많은 관심을 갖는 등 활용도가 높을 것으로 기대
 - * 부처간 연계 강화를 통해 소재 관련 유관사업들 연계 시(예시, 소재 R&D 이어달리기 사업 등) 관련 소재 전주기 데이터 수집을 성과 목표로 설정하는 등 관련 데이터 확보 노력 필요

4.1.3. 사업추진의 기본방향 및 전략

□ 사업 추진의 기본방향

○ 대내외 환경분석 결과와 여러 가지 지원방식에 대한 검토를 바탕으로 다음과 같은 사업 추진방향을 도출

－ ‘소재연구의 패러다임 전환’을 촉진하기 위해 기존의 탐색·설계 중심에서 측정분석, 공정설계까지 긴밀히 연결·확장된 소재개발의 전주기 공정 간 ‘연계·통합’을 기본 방향으로 함

❶ (인프라 통합) 新연구방법론을 적용한 소재연구의 확장성, 지속성 제고를 위해 기존 시스템(소재 연구데이터 플랫폼 등)과 연계한 통합 플랫폼 활용 방안 고려

❷ (통합 AI 활용) 소재개발의 전주기 공정 단계를 통합한 AI 활용 확대를 통해 신물질 소재 설계, 맞춤형 역설계 등 가속화

※ (예시) 1) 이론 계산 베이스의 계산데이터뿐만 아니라 실험데이터까지 포함, 2) DB가 많을 때, 적을 때 모두 가능, 3) 합금설계의 1단계인 재료설계뿐만 아니라 실제 공정조건까지 설계, 4) 2개 이상의 물성을 목표로 조합설계 가능 (AI 기반 초임계 소재연구 참고)

❸ (데이터 연계) 국가적 차원의 데이터 기반 소재연구 체계 구축을 위해 계산과학 데이터 및 실험데이터 등 연구과정에서 발생한 데이터를 기존 시스템과 연계하여 전주기 데이터 수집 및 표준화 등 추진

❹ (인재양성) 데이터 기반 소재 연구의 저변 확대를 위해 계산과학 및 데이터과학 소재연구 전문인력 양성 연계 전략 수립

❺ (성과 확산) 신소재 원천기술 개발의 성과가 향후 사업화로도 연계 될 수 있도록 연구과정에 산업체 참여 공간 마련



□ 추진전략

전략 1

선기획+2+3(2단계) 기술개발을 통한 체계적 지원 및 우수 연구단 대상 집중 지원을 통한 양질의 성과 창출 견인

- AI 활용 데이터 기반의 新연구방법론을 접목한 전주기 소재개발연구라는 도전적·혁신적 특성을 반영하여 선기획과 본연구 방식으로 단계별 체계적 지원
- 선기획 연구를 통해 소재 분야별 특성을 반영한 연구계획 구체화 및 양질의 연구성과 창출 도모

전략 2

연구단의 자체적인 소재-시스템(소자) 전주기 데이터 체계 및 수집·활용 계획 수립을 통해 고품질 데이터베이스 구축

- 개발하고자 하는 기술을 완성하기 위하여, 소재 및 시스템(소자) 수준에서 각각 구축하고자 하는 데이터 체계를 연구단이 제안하고, 소재-시스템(소자) 데이터 순환체계를 구축하도록 유도
- 또한 전주기 데이터를 체계적이고 일관되게 수집하기 위한 전략과 수집된 데이터를 어떻게 활용하여 연구개발을 완성할지에 대한 전략을 제시하도록 함으로써 고품질 데이터베이스 구축에 기여

전략 3

기존 시스템과의 연계성을 통한 데이터 기반 소재연구의 노하우 축적 및 후속연구로의 연구 확장에 기여

- 국가 소재 데이터 플랫폼을 통해 소재연구데이터와 연구의 노하우가 과제 단위로 종료·단절되는 것이 아닌, 데이터 기반 소재연구의 HUB로서 연구의 지속성·연속성을 확보할 수 있도록 추진
- ‘국가 플랫폼’으로 연계된 다양한 과제들의 연구에서 창출된 노하우와 소재연구데이터들이 다른 소재분야 혹은 후속연구로 확장 가능

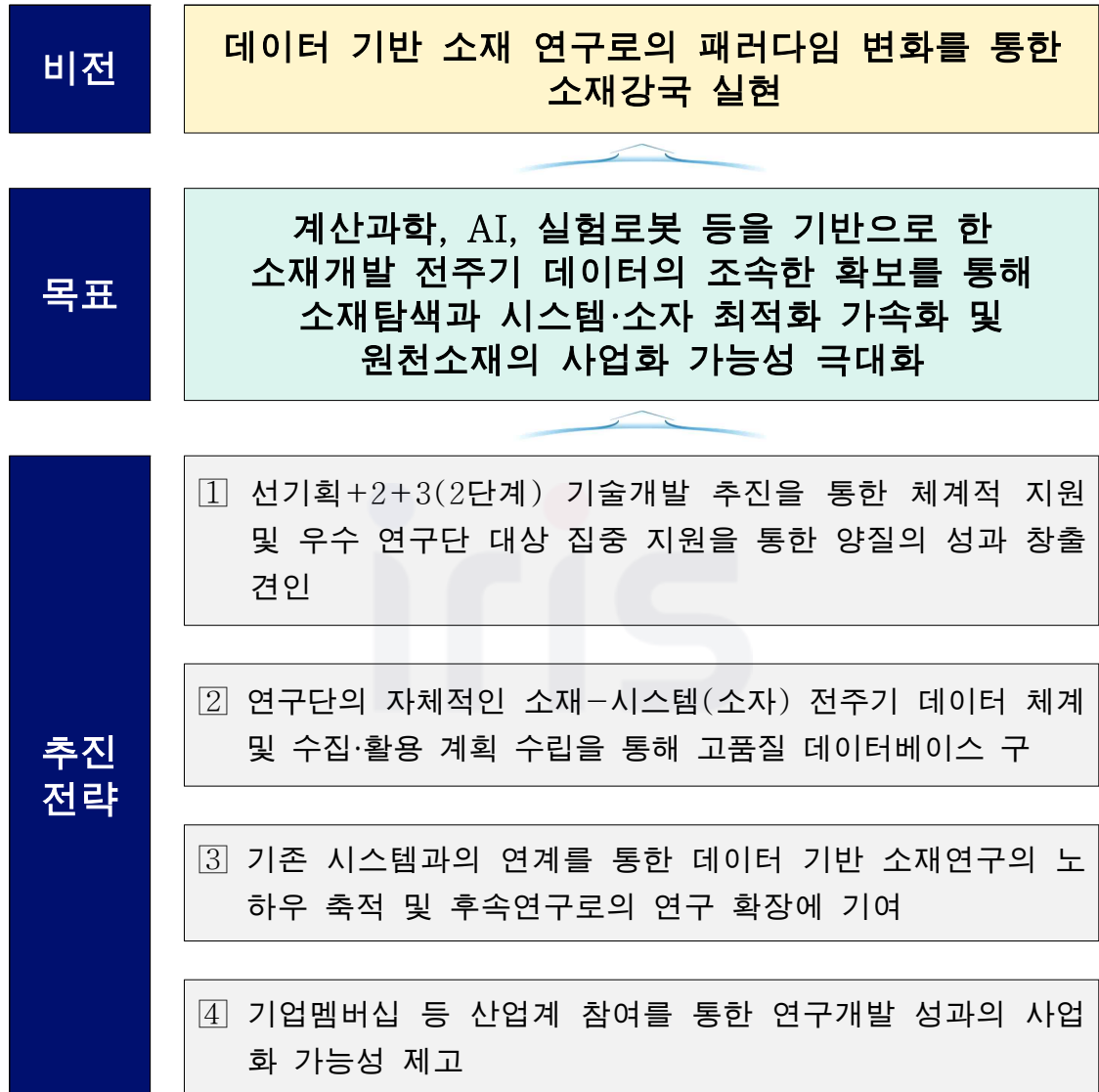
전략 4

기업멤버십 등 산업계 참여를 통한 연구개발 성과의 사업화 가능성 제고

- 기업멤버십을 통해 산업계 수요 반영, 개발방향 자문, 피드백, 검증 등 산업계 참여 활성화 추진
- 이를 통해 기계학습을 통한 인공지능 기반 연구를 가능하게 함으로써 소재개발의 소요 시간 단축 및 연구성과의 사업화 가능성 제고

4.2. 사업의 비전 및 목표(안)

□ 비전 체계도



4.3. 상세 사업설계(안)

4.3.1. 사업개요

□ 사업 개념

- 미래 국가안보, 과학기술주권에 필수적인 핵심 소재의 공백 우려 분야에 대해, 대체소재의 신속한 확보를 위해 新연구방법론을 적용한 데이터 시스템 기반 전주기 통합 소재HUB 원천기술개발 연구 사업
- ①소재 설계·합성-②분석·물성평가-③신소재 공정성 검증-④시스템·소자 설계·제조(공정)-⑤시스템·소자 성능평가 전주기의 데이터*를 확보하고 AI 기술과 접목하여 소재개발 각 단계별 상관관계 유추와 환류를 통해 최적의 시스템·소자 성능을 갖도록 하는 원천소재 확보 가능

* 범용 데이터보다는 특정 용도에 맞는 고품질 데이터 확보를 중심으로 함

□ 추진배경 및 필요성

- 최근 데이터 및 인공지능(AI)을 기반으로 한 소재개발 전략이 세계적인 추세이고, 이에 따라 소재데이터의 중요성이 갈수록 커지고 있음
- 이러한 데이터 기반 연구는 ‘소재-시스템’ 사이의 death valley를 극복하여 개발 신소재의 상용화를 가속시킬 수 있음(MGI개념)
- 현재 국내 소재 R&D는 대부분 ‘소재탐색’ 연구와 ‘시스템검증’ 연구를 별개로 진행하고 있어 소재개발 전주기 데이터 확보에 어려움 존재
- 소재의 발명에서 상용화 가능성 검증단계에 이르는 일련의 연구개발 과정을 담당하는 융합연구조직인 소재허브 연구단 구축 필요(TRL 목표 4~6단계)

□ 사업 목표

- 계산과학, AI, 실험로봇 등을 기반으로 한 소재개발 전주기 데이터의 조속한 확보를 통해 소재탐색과 시스템·소자 최적화 가속화 및 원천소재의 사업화 가능성 극대화

□ 사업기간 및 규모(안)

○ (사업기간) '24년~'29년 (총 6년)

※ (선기획 4개월) + 본연구 5년(2년+3년)

○ (사업규모) 년 30억 내외(과제별)

－ '24년 신규과제(약 150억원, 연구대상 소재HUB 5개 내외 공고)

구분		수행기간	지원규모(과제별)
소재HUB ('24년 선정)	선기획연구	4개월 내외	5천만원 내외
	본연구	5년(2+3) 이내	30억원/년 내외

□ 사업 추진일정(안)

○ 선기획 수행

구분	공고	先기획		본연구	
		선정평가	수행	선정평가	수행
소재HUB ('24년 선정)	<u>'24.2월</u>	'23.4월 or 5월	'24.6월~'24.9월 (4개월)	'24.10월	'24.11월~'29.10월 (60개월)

○ 선기획 미수행

구분	공고	본연구	
		선정평가	수행
소재HUB ('24년 선정)	<u>'24.2월</u>	'23.4월 or 5월	'24.6월~'29.5월 (60개월)

□ 사업 주요내용

○ (주관부처) 과학기술정보통신부

○ (주요 내용) 국가전략기술 초격차 달성, 미래 공급망 이슈 대응 등에 필요한 소재를 신속히 개발하기 위해 AI를 활용한 데이터 기반의 신연구방법론*을 적용한 신소재 개발, 핵심 전략소재 원천기술 확보 및 소재개발의 소요시간 및 비용 단축

* AI를 활용한 데이터 기반의 소재개발 전주기('탐색·설계'-'측정·분석'-'공정 설계') 연계 신소재 개발 연구

- (예상 성과물) TRL 4-6 수준의 성과물과 데이터 체계, 신소재 및 공정 데이터, 개발 프로그램, 원천소재 및 특허 작성

□ 지원 내용

- (지원분야) 전문가 대상 수요조사 등을 바탕으로, 미래 국가안보와 과학기술주권 확보 등에 핵심적인 연구대상 소재 분야별 R&D 지원

< 연구주제 우선순위 평가기준(안) >

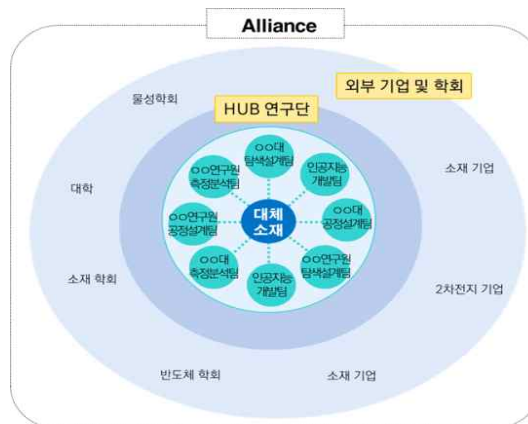
- 이슈 또는 전략성, 데이터 기반 구축 및 활용 능력 수준, 산업 성숙도, 연구자 풀과 융합팀의 효용성 등

- (지원대상) 출연(연) 및 대학*

- * 단, AI를 활용한 ‘탐색·설계’-‘측정·분석’-‘공정설계’ 등 AI, 데이터 기반 신소재 개발 및 활용까지 고려한 연구팀들로 구성된 컨소시움 형태로 신청 필수
- * 경쟁형 R&D 방식 중 선기획(A안)을 수행할 경우 얼라이언스(관련 학회 및 멤버십 참여기업) 구성 계획 제시 필요

< 소재HUB 구성 및 체계 >

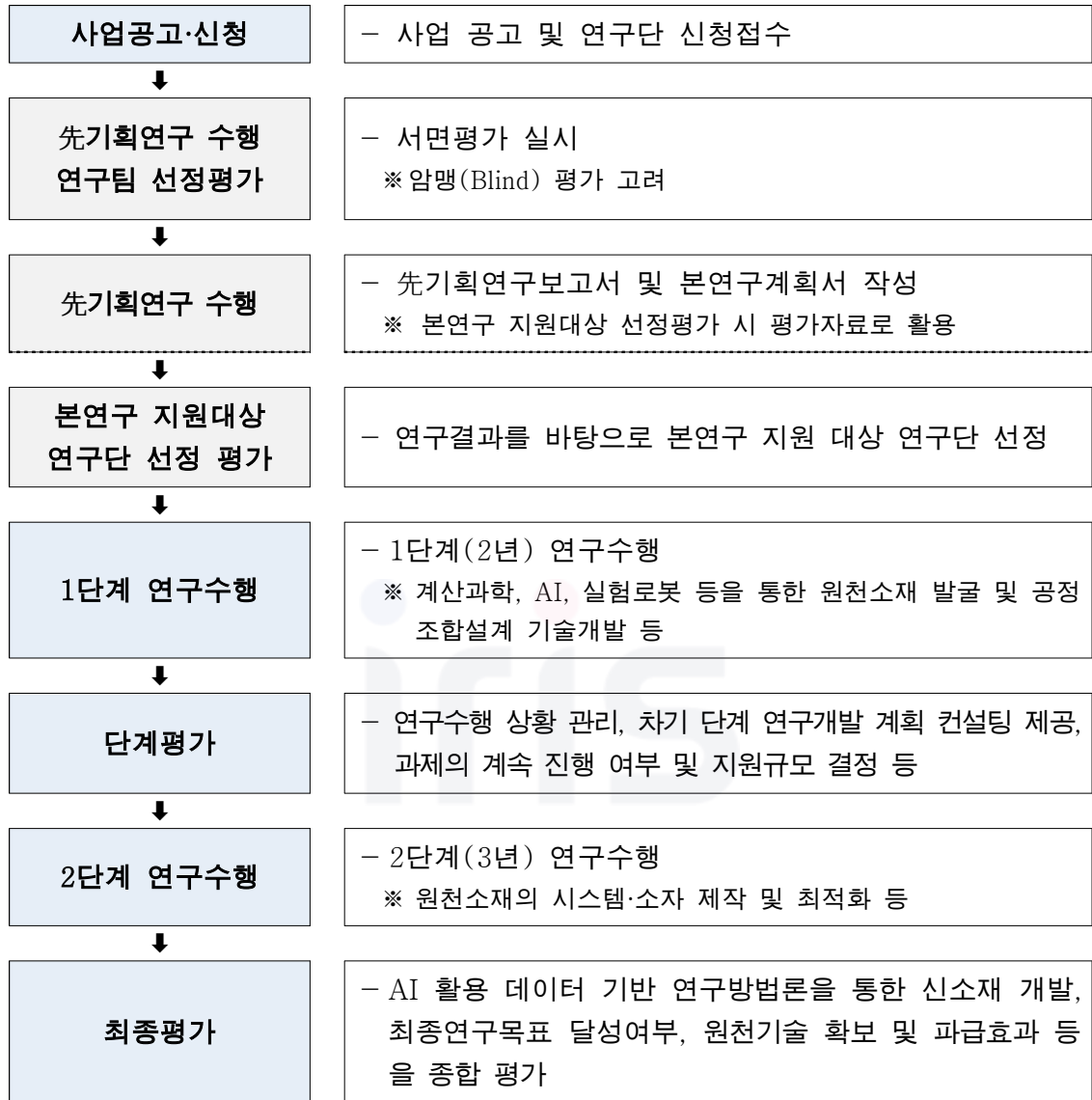
- (연구팀 구성) AI 활용, ‘탐색·설계’, ‘측정·분석’, ‘공정설계’ 등 분야별 연구팀들을 컨소시움 형태로 구성하여 각 팀 간 유기적인 협력체계 구축
- (연구단 체계도) 연구대상소재 개발에 직접 참여하는 HUB 연구팀과 외부 얼라이언스*로 구성
- * 기업 및 학회로 구성된 USER-HUB GROUP으로 구성. 단, 기업은 기업멤버십 제도를 통해 연구에 옹저버로 참여(산업계 수요반영, 개발방향 자문, 피드백 등)





< 그림 44 > 소재 HUB 예시

□ 사업 추진체계



※ 사업 추진 상황에 따라 변동 가능

4.3.2. 주요 내용 및 추진절차



① 사업공고 및 신청접수

- (연구 수행기관 모집) AI 활용, 탐색설계-측정분석-공정설계 등 AI·데이터 기반 신소재 개발을 위한 컨소시엄으로 구성된 연구대상 소재 허브별 연구단 모집

※ (연구개발계획서) 「국가연구개발혁신법 시행규칙」 별지 1호 서식을 사용

< 표 15 > 연구개발계획서 주요 항목

1. 연구개발과제의 필요성
2. 연구개발과제의 목표
3. 연구개발과제의 추진 전략·방법 및 체계
4. 연구개발성과의 활용방안 및 기대효과
5. 연구개발비 사용에 대한 개괄적인 계획
6. 연구책임자의 주요 연구실적
7. 연구책임자가 신청 또는 수행 중이거나 수행한 국가연구개발과제 등

☞ 신청자격

주관연구
개발기관

- 「국가연구개발혁신법」 제2조 제3호의 가호부터 바호의 기관 및 단체
－ 대학, 출연(연)
- ※ 주관연구기관이 허브를 구성하는 분야별 공동연구기관과 함께 연구계획 수립 후 컨소시움 형태로 신청 필수
- ※ 경쟁형 R&D 방식 중 (A안)선기획을 수행할 경우 얼라이언스(관련 학회 및 멤버십 참여기업) 구성 계획을 제시해야 함

혁신법 제2조(정의) 3. "연구개발기관"이란 다음 각 목의 기관·단체 중 국가연구개발사업을 수행하는 기관·단체를 말한다.

- 가. 국가 또는 지방자치단체가 직접 설치하여 운영하는 연구기관
- 나. 「고등교육법」 제2조에 따른 학교(이하 "대학"이라 한다)
- 다. 「정부출연연구기관 등의 설립·운영 및 육성에 관한 법률」 제2조에 따른 정부출연연구기관
- 라. 「과학기술분야 정부출연연구기관 등의 설립·운영 및 육성에 관한 법률」 제2조에 따른 과학기술분야 정부출연연구기관
- 마. 「지방자치단체출연 연구원의 설립 및 운영에 관한 법률」 제2조에 따른 지방자치단체출연 연구원
- 바. 「특정연구기관 육성법」 제2조에 따른 특정연구기관
- 사. 「상법」 제169조에 따른 회사
- 아. 그 밖에 대통령령으로 정하는 기관·단체

- 「기초연구진흥 및 기술개발지원에 관한 법률」 제14조 제1항에서 정하는 기관 및 단체

제14조(특정연구개발사업의 추진) ① 과학기술정보통신부장관은 기초연구의 성과 등을 바탕으로 하여 국가 미래 유망기술과 융합기술을 중점적으로 개발하기 위한 연구개발사업(이하 "특정연구개발사업"이라 한다)에 대하여 계획을 수립하고, 연도별로 연구과제를 선정하여 이를 다음 각 호의 기관 또는 단체와 협약을 맺어 연구하게 할 수 있다. 이 경우 제2호의 기관 중 대표권이 없는 기관에 대하여는 그 기관이 속한 법인의 대표자와 협약할 수 있다. <개정 2013. 3. 23., 2015. 3. 11., 2016. 3. 22., 2017. 7. 26.>

1. 제6조제1항 각 호에 해당하는 기관
2. 제14조의2제1항에 따라 인정받은 기업부설연구소 또는 연구개발전담부서
3. 「산업기술연구조합 육성법」에 따른 산업기술연구조합
- 3의2. 「협동연구개발촉진법」 제2조제3호에 따른 과학기술인 협동조합
4. 「나노기술개발 촉진법」 제7조에 따른 나노기술연구협의회
5. 「민법」 또는 다른 법률에 따라 설립된 과학기술분야 비영리법인 중 연구 인력·시설 등 대통령령으로 정하는 기준에 해당하는 비영리법인
6. 「의료법」에 따라 설립된 의료법인 중 연구 인력·시설 등 대통령령으로 정하는 기준에 해당하는 의료법인
- 6의2. 「1인 창조기업 육성에 관한 법률」 제2조에 따른 1인 창조기업으로서 연구 인력 및 시설 등 대통령령으로 정하는 기준을 충족하는 기업
7. 그 밖에 연구 인력·시설 등 대통령령으로 정하는 기준에 해당하는 국내외 연구 기관 또는 단체 및 영리를 목적으로 하는 법인

연구책임자	「과학기술정보통신부 소관 과학기술분야 연구개발사업 처리규정」 제12조(주관연구기관 등) 제2항 및 제18조(연구개발과제의 수행전념) 제2항에 의거 요건을 갖춘 자 - 과제계획서의 작성, 과제의 내용, 수행방법 결정 및 연구윤리의 확보, 참여연구원의 구성, 연구개발비 중 직접비의 관리 및 사용 등
-------	--

👉 신청제한

본 사업의 수행 제한사항	1인 1책으로 수행을 제한함(단, 공동참여에는 제한 없음) ※ 주관연구책임자는 1인 1개 허브만 신청 가능하며, 2개 이상의 허브를 중복 신청시 요건 불충족으로 전과제 탈락 처리함
참여제한	- 국가연구개발사업 참여제한 중인 자는 신청할 수 없음 - 단, 신청 마감일 전일에 참여제한이 종료된 자는 과제 신청 및 수행 가능
3책5공	- 모든 연구자의 국가연구개발사업에 동시에 참여할 수 있는 연구개발 과제 수는 5개 이내로 하며, 이 중 주관연구개발기관의 연구책임자로 수행할 수 있는 과제 수는 최대 3개임 (관련 : 「국가연구개발혁신법 시행령」 제64조) ※ 총괄주관연구과제의 경우 과제를 구성하는 각 과제가 주관연구개발기관에 해당함(공동연구과제, 위탁연구과제를 수행하는 기관은 주관연구개발기관에 해당하지 않음) 시행령 제64조(연구개발과제 수의 제한) ① 중앙행정기관의 장은 법 제35조제1항에 따라 연구자가 동시에 수행할 수 있는 연구개발과제 수를 최대 5개로, 그 중 연구책임자로서 동시에 수행할 수 있는 연구개발과제 수를 최대 3개로 제한할 수 있다. ② 중앙행정기관의 장은 제1항에 따른 연구개발과제 수를 산정할 경우 다음 각 호의 어느 하나에 해당하는 연구개발과제는 그 수에 포함하지 않고 산정할 수 있다. - 제9조제2항 또는 제10조제2항에 따른 연구개발계획서의 제출 마감일부터 6개월 이내에 수행이 종료되는 연구개발과제 - 사전 조사, 기획·평가연구 또는 시험·검사·분석에 관한 연구개발과제 - 연구개발과제의 조정 및 관리를 목적으로 하는 연구개발과제 - 연구개발을 주목적으로 하지 않는 기반 구축 사업, 고등교육재정 지원사업, 인력 양성 사업 및 학술활동사업 관련 연구개발과제 - 법 제4조제1호에 해당하는 사업 관련 연구개발과제 - 다음 각 목의 어느 하나에 해당하는 연구개발기관이 중소기업과 공동으로 수행하는 연구개발과제로서 과학기술정보통신부장관이 관계 중앙행정기관의 장과 협의하여 그 연구개발비를 별도로 정하는 연구개발과제 가. 법 제2조제3호나목부터 바목까지의 규정에 해당하는 연구개발기관

	나. 「산업기술혁신 촉진법」 제42조에 따른 전문생산기술연구소 7. 그 밖에 연구개발 촉진 등을 위하여 연구개발과제 수에 포함하지 않고 산정할 필요가 있어 국가과학기술자문회의의 심의를 거친 연구 개발과제 국가연구개발사업 동시수행 연구개발과제 수 제한 기준(고시) 제4조(참여연구원 기준) ① 영 제2조제2항가목에 따른 주관연구개 발기관의 책임자는 영 제59조에 따른 연구책임자로 보고, 주관연구 개발기관의 책임자 외 연구개발과제에 참여하는 연구자(이하 “참여 연구원”이라 한다)는 영 제59조에 따른 연구책임자가 아닌 연구자로 본다. ② 영 제2조제2항나목에 따른 공동연구개발기관의 책임자와 책임자 외 참여연구원은 영 제59조에 따른 연구책임자가 아닌 연구자로 본 다. ③ 영 제2조제2항다목에 따른 위탁연구개발기관의 책임자와 책임자 외 참여연구원은 영 제59조에 따른 연구자로 보지 아니한다.
--	---

② 사전검토 및 선기획연구 지원 대상 과제 선정평가

- (사전검토) 연구개발과제 수행을 신청한 기관·단체·연구자에 대하여
참여 제한 대상 여부, 신청 자격의 적합 여부 등을 선정평가 이전
단계에 검토
- (선정평가) 기획된 기술의 도전성·창의성·혁신성 및 원천기술(특허)
확보 가능성이 높고, AI 활용 데이터 기반 연구방법론 적용 방안, 연구
팀 구성 등을 포함한 연구계획의 적절성이 높은 과제를 선정
 - (평가절차) 과제별 제출서류에 대한 관련 전문가 서면평가
 - ※ 암맹(Blind) 평가 방식 적용 고려
 - (평가기준) 기획된 기술개발 내용의 도전성·창의성·혁신성, 연구 수
행계획의 적절성(신연구방법론 활용 연구계획 등), 연구자 또는 소속
기관·단체의 연구개발 역량, 과급효과 등 4개 항목으로 선정지표 구성

< 표 16 > 지원 대상 과제 선정 평가항목(안)

평가항목	평가내용
기술개발 내용의 도전성·창의성·혁신성 (40)	• 기술개발 내용 및 목표의 도전성 • 기술개발 내용 및 연구방법의 창의성 • 기술개발 내용 및 연구방법의 혁신성
연구 수행계획의 적절성 (35)	• 기술개발 계획의 구체성, 적절성, 타당성 – 목표의 명확성, 추진전략의 적절성, 추진계획의 구체성, 추진체계의 적절성 (수행주체별 역할분담 등) 등 • 신연구방법론을 활용한 연구수행계획의 구체성 및 타당성 – 연구팀 간의 소재개발 단계별 연계·협력 계획의 구체성·타당성 – 소재연구데이터 수집 및 표준화 목표 및 달성 계획 • 유저그룹 등 얼라이언스 구성의 적절성* * 기업멤버십 구성 및 운영 방안의 적절성 포함
연구자 또는 소속기관· 단체의 연구개발 역 량 (15)	• 연구책임자의 전문성 • 참여연구원들의 구성 및 전문성 – AI 활용 탐색·설계-측정·분석-공정설계 등 연구팀 구성의 적절성 등
파급효과 (10)	• 학술적, 과학기술적, 산업적, 사회적 파급효과 ※ 데이터 기반 소재HUB 지속적인 기여 방안 포함

○ (평가단 구성) 분야별 패널을 별도로 구성하여 평가의 전문성을 제고할 수 있도록 구성

※ 만약 전문성이 우려될 시 평가위원의 수를 늘리는 것도 고려 가능

– (평가단 사전 교육) 필요시 사업 취지 및 목적, 연구내용 등에 대한 평가단 사전 교육을 진행

< 표 17 > 연구개발과제평가단 평가위원 제척기준

구분	제척기준
필수 제척대상	평가대상 연구개발과제의 연구자
선택적 제척대상	① 평가대상 연구자와 「민법」에 따른 친족관계가 있거나 있었던 사람 ② 서로 다른 두 건의 연구개발과제의 평가가 동시에 진행될 때 각 연구개발과제의 연구자가 그 서로 다른 연구개발과제를 평가하는 관계가 되는 경우의 연구개발과제의 연구자 ③ 평가 대상 연구개발과제의 연구책임자와 같은 기관에 소속된 사람. 이 경우 다음 각 목의 어느 하나에 해당하는 경우에는 학과, 학부(해당 학부에 학과가 없는 경우로 한정한다), 부서 등 최하위단위 부서에 같이 소속된 사람으로 한정하여 제외할 수 있다. 가. 「고등교육법」 제2조 각 호의 학교 나. 「정부출연연구기관 등의 설립·운영 및 육성에 관한 법률」 제2조에 따른 정부출연연구기관 다. 「과학기술분야 정부출연연구기관 등의 설립·운영 및 육성에 관한 법률」 제2조에 따른 과학기술분야 정부출연연구기관 라. 「특정연구기관 육성법 시행령」 제3조제1호부터 제3호까지 및 제3호의2에 따른 연구기관 ④ 해당 중앙행정기관 소속 공무원 및 전문기관의 임직원(연구개발과제 기획·분석·평가업무에 종사하는 직원으로서 중앙행정기관의 장이 인정한 연구관리전문가는 제외한다)

※ 국가연구개발혁신법 시행령 제27조제3항, 제4항 참고

- (지원대상) 신청과제의 종합평점이 70점 이상일 때는 “지원대상”, 70점 미만일 때는 “지원제외” 과제로 분류하고, “지원대상” 과제 중 고득점 순으로 연구대상소재별 선기획연구 수행팀 선정(3배수)

③ 선기획연구

- (목적) AI를 활용한 데이터 기반 전주기 소재개발이라는 新연구방법론 구현을 위해 연구팀이 신청한 개발대상 소재에 대한 자체적인 기획 수행
- (지원기간/규모) 협약일로부터 4개월 / 과제별 5천만원
- (주요 기획내용) 연구개발 목표 및 평가주안점, 연구개발 내용 및 방법 (데이터 구조 구축 및 DB화 계획, 전주기 데이터 수집 및 연계 활용 계획 포함), 추진체계 및 추진일정, 연구개발 결과의 활용방안 및 기대효과 등을 구체화

< 표 18 > 선기획연구 추진 목적 및 주요 내용

구분	주요 내용
추진 목적	• ‘AI를 활용한 데이터 기반의 소재개발 연구’라는 새로운 연구개발 방식의 적용 및 원천기술 확보 가능성을 제고하기 위해 연구단에서 자체적으로 개발 대상 소재 특성 등을 반영하여 구체적으로 기획 수행
수행 내용	• 연구개발의 목표 및 평가주안점 기획 – 연구개발 목적, 목표(성과목표 및 지표 포함), 평가의 주안점 등을 기획 및 구체화 • 허브 내 주요 분야별 본연구 수행계획 구체화 – AI 활용, 탐색·설계, 측정·분석, 공정설계 등 AI를 활용한 데이터 기반 소재개발을 위해 필요한 주요 분야별 연구팀 간의 본연구 수행계획 마련(개발 내용, 연구팀별 핵심 역할, 연구팀 간 연계 연구 수행 체계·협력 방안 마련 및 연구결과 공유, 연구개발 로드맵 작성 등) • 데이터 표준화 및 생성·수집·활용 계획 구체화 – 연구 소재별 데이터 구조 구축, 구체적인 DB화 계획, 전주기 데이터 연계·활용 연구 계획 등 작성 – 연구 과정 중 수집·생성된 데이터(논문 등 기존 데이터 수집, 계산데이터, 실험데이터 등)의 소재 연구데이터 플랫폼 공유 및 활용 방안 – 데이터 표준화를 위해 연구대상 소재에 적합한 템플릿 검토 및 개발(필요시)* * 소재 연구데이터 플랫폼 표준템플릿 등을 바탕으로 소재별 특성에 적합하도록 보완 • 기업멤버십 구성 및 설계 – 최종적으로 개발된 기술에 대한 수요기업 등을 대상으로 MOU 체결 등 멤버십 구성, 산업계 수요 반영을 위한 멤버십 운영 방안 구축 등

④ 본연구 지원대상 연구팀 선정평가

□ 선기획연구 결과 평가

- (목적) 선기획연구 수행결과에 대한 심층평가를 통해 본연구 지원 대상 과제 선정
 - － (평가방법) 발표평가
 - * (주요 제출서류) 선기획연구 결과보고서, 본연구 수행계획서 등
 - － (평가점수 산출방법) 위원별 점수 중 최고점수와 최저점수를 제외한 점수의 산술평균점수를 산출(100점 만점으로 함)
 - － (평가결과에 따른 조치사항) 평가결과 최고득점자 대상 본연구 지원대상 연구팀 선정(연구대상소재별 1개 이내)
 - － (평가기준) 본연구 수행계획의 적절성, 원천기술 확보방안의 체계성, 기업멤버십 설계(안)의 적절성, 연구결과의 파급성 및 기대효과 등을 종합적으로 평가
- ※ (평가단 구성시 고려사항) 평가의 연속성 및 전문성 제고를 위해 전문성이 뛰어나고 성실한 선정평가위원 우선 선정(국가연구개발혁신법 시행령 제 27조제5항 참조)

제27조(연구개발과제평가단의 구성) ⑤ 중앙행정기관의 장은 단계평가, 최종평가 또는 법 제15조제1항에 따른 특별평가(이하 “특별평가”라 한다)를 실시하기 위하여 연구개발과제평가단을 구성하는 경우 선정평가에 참여한 사람을 우선 선정해야 한다.

< 표 19 > 선기획연구 수행결과 평가항목(안)

평가항목	평가내용
본연구 수행계획의 적절성 (50)	• 기술개발 계획의 구체성, 적절성, 타당성 － 추진전략의 적절성, 추진계획의 구체성, 추진체계의 적절성 등 • 신연구방법론 적용 수준 • 연구단 운영계획의 효율성 • 소재연구데이터 수집 및 표준화 계획의 타당성 • 성과 활용계획의 적정성
원천기술 확보방안의 체계성 (20)	• 소재개발 목표의 명확성 및 실현가능성 • 연구수행 방법론의 적합성 및 사업 부합성

평가항목	평가내용
기업멤버십 설계(안)의 적절성 (15)	• 멤버십 구성 계획의 적정성 • 산업체 수요를 반영할 수 있는 멤버십 운영방안의 적절성
연구결과의 파급성 및 기대효과 등 (15)	• 학술적, 과학기술적, 산업적, 사회적 파급효과 ※ 데이터 기반 소재HUB 지속적인 기여 방안 포함

⑤ 본연구 1단계

○ (목표) 계산과학, AI, 실험로봇 등을 통한 원천소재 발굴 및 공정조합설계 기술개발

－ (주요 연구내용) AI 활용 데이터 기반 소재개발 방법론의 실효성 입증, 공정간 피드백, 후보물질 탐색 및 가능성 높은 물질 중심의 개발·피드백, lab-scale 검증, 기업 멤버십 운영을 통한 산업체 수요 반영*, 소재연구데이터 수집 및 표준화 성과 창출 등

* 멤버십 기업 모집, 연구 수행 시 멤버십 기업의 수요 반영, 특허 출원/등록 시 멤버십 기업 대상 우선협상 진행 등

⑥ 단계평가

○ (목적 및 내용) 연구수행 과정 및 결과, 향후 연구계획 등을 토대로 연구수행상황 관리, 차기 단계 연구개발 계획 컨설팅 제공, 과제의 계속 진행 여부 및 지원규모 결정

－ (평가방법) 서면 및 발표평가

－ (평가점수 산출방법) 위원별 점수 중 최고점수와 최저점수를 제외한 점수의 산술평균점수를 산출(100점 만점으로 함)

－ (평가기준) 연구내용 및 연구과정의 적절성, 연구성과의 탁월성, 성과 관리 및 활용계획, 향후 연구개발과제 수행계획 등을 기준으로 평가

－ (평가결과에 따른 조치사항) 연구개발과제를 보완·변경·중단하거나 연구개발비 감액·증액 가능(국가연구개발혁신법 제12조제3항 참조)

※ (평가단 구성시 고려사항) 평가의 연속성 및 전문성 제고를 위해 전문성이 뛰어나고 성실한 선정평가위원 우선 선정(국가연구개발혁신법 시행령 제27조제5항 참조)

< 표 20 > 단계평가 평가항목(안)

평가항목	평가내용
연구수행 내용 및 과정의 적절성(20)	• 연구수행 내용의 적절성 • 연구수행 과정의 적절성
연구수행 목표 달성도 및 성과의 우수성 (40)	• 단계별 목표의 달성도 – 가능성 높은 후보소재 발굴, lab-scale 검증 등 • 연구성과의 탁월성 – 후보물질 탐색 결과, 검증 결과, 주요 분야별 주요 성과, 소재 연구데이터 수집 건수 및 데이터 품질, 데이터 표준화 성과 등
성과관리 및 활용계획 (20)	• 데이터 및 소프트웨어 공유방안 • 얼라이언스의 확장성 – 기업멤버십 운영의 충실성 등 • 기존 시스템과의 연계 및 활용 계획의 구체성, 적절성 – 소재 연구데이터 플랫폼 연계방안 등 • 학술적, 과학기술적, 산업적, 사회적 파급효과 ※ 데이터 기반 소재HUB 지속적인 기여 방안 포함
향후 연구개발과제 수행계획 (20)	• 1단계 연구결과를 바탕으로 한 2단계 수행계획의 구체성, 적절성 • 최종 목표 달성을 위한 연구개발내용 및 연구방법의 타당성, 체계성, 적절성

7 본연구 2단계

○ (목표) 원천소재의 시스템·소자 제작 및 최적화

– (주요 연구내용) 원천소재를 기반으로 시스템·소자를 제작하여도 연구실 수준의 성능을 유지하기 위한 기술개발, 1단계 확보 원천소재의 시스템·소자 제작 및 성능평가를 통해 원천소재의 성능(내구성, 재현성 등) 개선, TRL 4~6 수준의 검증, 서비스 개발, 데이터 표준화, 기업멤버십 운영(기술이전* 등) 등

* 만약 기술이전을 실시할 경우 기술을 이전받은 기업이 주관연구기관에서 후속연구를 수행하지 못하게 하지 못하도록 하는 조치가 선행될 필요가 있음

* 연구를 통해 자체적으로 구축한 AI 프로그램에 대한 수요기업 맞춤형 플랫폼 기술이전도 고려 가능

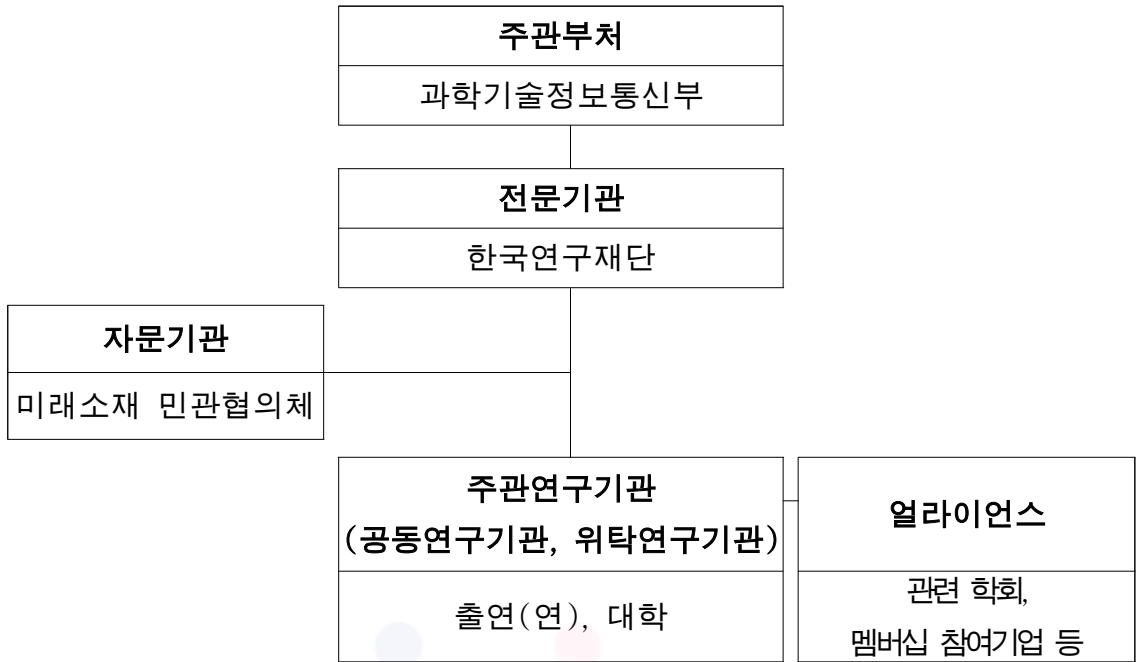
8 **최종평가**

- (평가 방향) AI 활용 데이터 기반 연구를 통한 신소재·대체소재 개발 등의 최종목표 달성여부, 원천기술 확보 및 기술가치 효과 등 종합 평가

< 표 21 > 최종평가 평가항목(안)

평가항목	평가내용
연구수행 과정 및 내용 (20)	• 연구수행 내용의 혁신성, 도전성, 적절성 • 연구수행 과정의 혁신성, 도전성, 적절성
연구수행 결과 및 목표 달성 정도 (50)	• 최종 목표 달성도 – 신소재 개발(원천특허 확보), 데이터 축적 등 • 연구성과의 탁월성 – 신연구방법론 기반 신소재 개발 결과의 우수성, 소재연구데이터 수집 건수 및 데이터 품질, 데이터 표준화 성과 등
관련 분야에 대한 기여 정도 (15)	• AI를 활용한 데이터 기반의 신소재 원천기술 개발을 통한 소재연구의 효율성 증진 기여도 – 원천특허 확보, 개발 프로그램, 소재연구데이터 수집 및 축적 정도 등
성과관리 및 활용계획 (15)	• 데이터 및 소프트웨어 공유방안 • 얼라이언스의 확장성 – 기업멤버십 운영의 충실성 등 • 기존 시스템과의 연계 및 활용 계획의 구체성, 적절성 – 소재 연구데이터 플랫폼 연계방안 등 • 학술적, 과학기술적, 산업적, 사회적 파급효과 ※ 데이터 기반 소재HUB 지속적인 기여 방안 포함

4.3.3. 추진체계



- 과기정통부가 사업을 총괄하며, 한국연구재단이 전문기관으로 과제
기획·평가·관리 수행
 - (과학기술정보통신부) 사업 총괄, 시행계획 수립 등
 - (한국연구재단) 과제 공고, 주관기관 선정, 협약체결, 진도관리, 성과
분석 등 사업 관리 및 지원
 - (미래소재 민관협의체) 각계 소통 및 교류를 통해 민간의 수요와
의견 등 반영
 - (HUB 연구단(주관연구기관 등)) 연구수행, 성과 창출 등

4.3.4. 소요예산(안) (추후 수정 필요사항)

- 과제별 사업비는 총 150억 내외(총 5년, 연간 30억 내외)
 - ※ 총 5개 연구단 중 1개 연구단만 선기획을 수행하는 경우에 대한 예산 초안
으로, 추후 수정이 필요함

사업명	구분	'24	'25	'26	'27	'28	'29	합계
(가칭) 데이터 기반 미래 소재 HUB 구축 연구 지원	선기획	(신규) 0.5억×1 건= 0.5억	—	—	—	—	—	0.5억
	본연구	(신규) 30억×4 건+29.5 억×1건 =149.5 억	(계속) 30억×5 건=150 억	(계속) 30억×5 건=150 억	(계속) 30억×5 건=150 억	(계속) 30억×5 건=150 억	(계속) 30억×1 건=30억	779.5 억
합계		150억	150억	150억	150억	150억	30억	780억

※ 산출 근거 : 동 사업과 가장 유사한 과제라고 할 수 있는 AI 기반 초임계 소재(산업부, '20~'27)의 사례를 참고할 때, 통합 AI모델 개발, 데이터 수집(계산데이터, 실험데이터 등) 및 탐색설계-측정분석-공정조합설계 등 연계 연구에 약 40억('22년, '23년)의 정부 예산이 투입됨.

해당 과제의 개발목표 소재 중 하나인 초고장력강 개발 과정에서 파일럿 제작(TRL 약 6단계)에 투입되는 비용이 타 소재분야에 비해 상대적으로 크다는 점을 감안하면 동 사업의 예산(허브당 연간 30억, 최종 목표 TRL 4~6단계)은 적절한 규모로 사료됨

4.3.5. 기대효과

- 소자와 시스템 간 간극해소를 통해 신소재 탐색설계부터 상용화까지의 단계 가속화
- 쉽게 고품질 대량의 소재 연구데이터를 활용, 효율적인 소재 개발 연구 환경으로 활용 가능
 - － 미래소재 수요 예측·개발 성과 제고, 소재 탐색 범위 확대
- 특정 소재에 대한 전주기 데이터 수집 및 연계·활용 연구를 통해 디지털 기반의 소재개발 연구 노하우 축적
- 산·학·연 및 모든 분야에서 공동 활용 가능한 데이터 제공으로 융합 연구 촉진
- K-MDS 데이터 사용 활성화 및 데이터를 활용한 연구 데이터 축적으로 선순환 구조의 데이터 활용 및 축적 가능

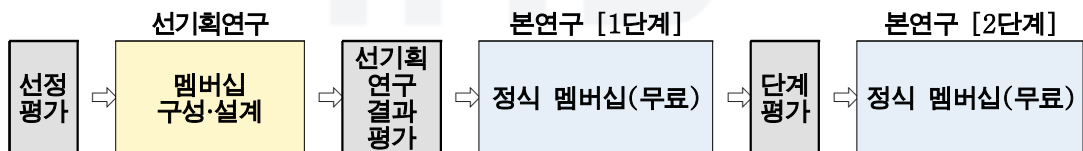
4.3.6. 기업 참여 방식

□ 연구과정에서 산업계 수요를 반영할 수 있도록 기업멤버십 제도를 도입하여 동 사업을 통한 신소재 개발의 성과가 사업화로 연계될 수 있도록 유도

- 주관연구개발기관은 선기획연구 단계부터 동 연구에서 개발될 기술에 관심을 갖는 기업들을 대상으로 멤버십을 구성·설계하고, 본연구 1단계부터 정식 멤버십을 운영하여야 함
- 기업 멤버십 비용을 유료로 설정할 경우, 주관연구기관이 출연(연)인 경우 멤버십 비용 운영 및 관리 측면의 애로 발생 가능성 존재
 - 이를 해소하기 위해 멤버십은 무료로 운영하되, 운영방식은 다음의 두 가지 방식을 고려 가능
- (1안) 기업멤버십(본연구 1·2단계)

- (주요 역할) 멤버십 기업은 참관자(observer) 수준에서 개발방향 자문, 피드백, 수요반영 등의 역할을 수행

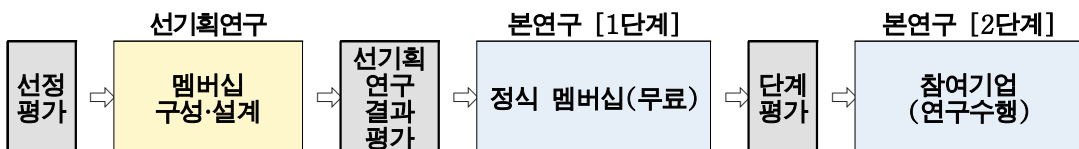
※ 선기획연구 결과평가지 기업멤버십 구성·설계를, 본연구 단계평가지 기업멤버십 운영을 평가요소(멤버십 기업 구성 및 협력방안 등)에 포함하여 검토



- (2안) 기업멤버십(본연구 1단계), 참여기업(본연구 2단계)

- (본연구 1단계) 참관자 수준에서 개발방향 자문, 피드백, 수요반영 등의 역할을 수행

- (본연구 2단계) 참여기업으로 연구수행시 프로토타입 개발 등 일부 연구수행 과정에 참여



- (보안 관리) 연구 아이디어 및 내용에 대한 외부 유출을 방지하기 위해 주관연구기관과의 회의 참여시 멤버십 기업들은 반드시 보안 서약서 작성을 하도록 함
- (신청 자격) 연구인력 8인 이상, R&D 집약도 2% 이상, 5년 이상 R&D 활동실적 등 3가지 요건을 동시에 만족 시 신청 가능

< 표 22 > 기업멤버십 신청요건(안)

신청요건	세부내용
① 연구인력 8인 이상 (연구전담요원)	기업부설연구소 등록 연구전담요원만 인정 (부속서류, KOITA 발급 기업부설 연구기관 연구개발 인력 현황 확인(접수마감일 현재 기준))
② R&D 집약도 2% 이상 (직전 1개년도 또는 직전 2개년도 평균) 또는 직전 2개년도 평균 R&D 투자액 100억 이상 ※ 단계평가일 기준	- R&D 집약도(당해연도 매출액 대비 당해연도 경상연구개발비 비중으로 산출) 또는 R&D 투자액 ※ 재무제표 상 기재된 경상연구개발비를 인정함. 단 경상연구개발비에 포함되지 않은 기업부설연구소 등록 연구전담요원의 인건비는 R&D 투자 비용으로 인정함(인건비 지급조서(급여증비) 등 추가 서류 제출 필요)
③ 5년 이상 R&D 활동실적 (기업부설연구소 업력)	기업부설연구소 인정일* 기준 만 5년이 초과한 기업부설연구소

※ 기업부설연구소 인정일은 기초연구진흥 및 기술개발지원에 관한 법률 제 14조, 같은 법 시행령 제16조 제1항 및 제27조 제1항에 따라 한국산업기술평가협회(KOITA)가 발급하는 ‘기업부설연구소 인정서’에 날인된 날(신고일 아님)이며, 단계평가일까지 만 5년을 초과하여야 함

※ 출처 : 2022년도 산업기술 알키미스트 프로젝트 신규지원 대상 연구개발과제 공고(산업통상자원부 공고 제2022-42호)

- 이 외에도 연구과정 중 의미 있는 결과가 도출될 때 멤버십 기업을 대상으로 기술이전 설명회 등 홍보/마케팅을 동시에 도모하고자 함
- ※ 특정 기업에 신소재 원천특허 등 사업의 수혜가 독점될 우려가 있을 시 느슨한 형태의 멤버십이 바람직할 것으로 사료됨

4.3.7. 소재연구데이터 품질 관리계획

- 데이터 활용도 측면과 데이터의 품질과 영역에 의존하는 AI의 특성을 고려하여, 연구 시기별로 다음과 같은 데이터 관리를 통해 양질의 데이터 구축을 도모함
 - (연구시작 전) 연구개발 과정에서 산출되는 데이터의 생산·보존·공유 계획을 수립하여 체계적인 관리기반을 마련하기 위하여, 연구데이터 관리계획서(DMP, Data Management Plan) 작성
 - ※ 연구책임자가 DMP에 명시한 시점, 장소, 기간, 포맷대로 데이터를 공개 및 공유해야 함
 - ※ 소재 분야별 데이터 특성을 반영하여 연구소재 분야에 적합한 데이터 구조 구축 계획을 연구계획서 상에 제시
 - (연구 수행 중) 실험데이터 등을 자동으로 수집하고 국가 소재 데이터 스테이션에 자동 연계할 수 있는 소프트웨어 구축 등 원활한 데이터 수집 및 축적을 위한 프로그램 개발
 - (평가단계) 선정평가-최종평가 등 평가단계별로 DMP를 점검하고 평가위원회에서 수정·보완을 요청한 경우 이를 반영해야 함
 - ※ 평가시 데이터 입력실적을 지표화하여 관리할 수 있도록 제도화하는 방안 고려
 - ※ 데이터 관리계획을 충실히 이행한 연구자에게 데이터 연구수당, 과제평가 가점 등 의미 있는 인센티브를 제공하는 방안도 고려 가능
 - (연구종료 후) 한국연구재단 혹은 국가 소재 데이터 스테이션 주관으로 ‘연구데이터 품질 및 성과 공개에 관한 심의위원회’를 구성·운영
 - ※ 개발대상 소재가 주요국과 경쟁 중일 경우, 완전히 대중에 공개하지 않고 필요시 일부 기업 등을 대상으로 하는 제한적인 데이터 공개 방안 등을 추가적으로 마련할 필요가 있음
 - ※ 연구데이터 심의위원회 주요 역할(안) : 데이터 공개에 따른 국부의 손실이나 지재산 침해 가능성 심의, 데이터 공개 수준/적정 범위 설정, 연구결과와 파급을 위한 데이터 활용 촉진 등
- 이 외에도 데이터 품질관리를 위한 전문인력 양성 고려

4.3.8. 과제 종료 후 유지관리 계획

- 과제에 참여한 연구단들은 과제 기간에 수집·생산된 데이터를 국가소재데이터 스테이션에 이관하여 유지관리할 필요
- 추가로 최종평가 결과를 기준으로 우수한 성과를 창출한 HUB 및 향후 국가 전략소재분야 HUB에 대해서는 2단계 사업연계를 통해 후속연구 지원
 - (필요성) 과제종료 후에도 각 분야 소재데이터의 확장 및 업데이트가 체계적으로 진행되어야 하고, 모든 데이터를 국가소재데이터 스테이션에서 관리할 경우의 위험성(한 기관에서 통합관리)에 대한 리스크 관리가 필요할 수 있음
 - (목적) 2단계 후속연구에서는 서버구축을 포함하여 관련 분야 소재데이터를 확장하고, 국가소재데이터 스테이션과 별도로 관련 데이터를 유지관리하기 위함

4.3.9. 분산된 소재 관련 연구데이터 등의 효과적 연계 방안

- 소재 연구데이터는 소재종합솔루션센터, 소재정보은행, 국가참조표준센터, 국내 대기업 자체 DB 등 다양한 기관을 중심으로 분산되어 있는 상황
 - ※ (소재종합솔루션센터) 화학소재, 금속소재, 세라믹소재, 섬유소재 분야별 소재정보은행에서는 분야별 특화된 소재물성을 제공
 - ※ (소재정보은행) 소재물성 DB, 기술 및 시장동향, 특허, 각종 보고서 등의 생성·수집을 통한 핵심 소재 정보 보급
 - ※ (국가참조표준센터) 해당분야 데이터 수집·생산, 평가 및 참조표준(안) 제정을 통한 신뢰성 있는 물성 데이터 제공, 10개 분야(금속, 재료, 바이오 등) 65개 DB구축(2016년 기준 3만8천여개 데이터)
 - ※ (국내 대기업 자체 DB) LG 화학, 삼성 SDI, 삼성중기원 등 산업체에서 리튬 이차전지 전극 소재 및 전해질 첨가제 등에 소규모의 'Computational Materials Screening' 방법으로 자체 데이터베이스를 만들어 활용하고 있으나 기업 기술 보호를 위해 공개되지 않고 있음
- 분산된 소재 연구데이터의 통합 관리를 위해서는 데이터 표준화를 통한 소재 데이터 구조 및 어휘를 일원화할 필요가 있음
 - 산재되어 있는 소재 연구데이터를 표준화된 체계 없이 통합할 경우

데이터를 활용하기 쉽지 않은 측면이 존재

※ 예) 소재 탐색 등을 위한 인공지능 기술 개발에 활용하기 어려움

- 미국 Materials Project DB의 경우 계산데이터로만 구성되어 있고 정확하지 않은 데이터가 다수 보유되어 있음에도 불구하고 사용자가 많은 이유 중 하나는 통일된 포맷으로 정리된 데이터의 양이 많다는 점임*

* 인공지능 모델 개발에 쉽게 활용 가능

- 데이터 표준화 시 다양한 소재군, 응용분야 및 소재 전주기 데이터를 통합적으로 수집·관리할 수 있도록 하는 체계를 마련하는 것이 중요하고, 국제협력 등을 통해 수립된 데이터 표준화 체계를 국제화하는 것이 필요함
- 소재 연구데이터 플랫폼의 활성화를 위해서는 산재되어 있는 다양한 응용분야의 데이터를 통합 관리하여 데이터의 양(量)을 충분히 확보하는 것이 무엇보다 중요할 수 있음
- 플랫폼은 ‘승자독식’의 특징*을 지니고 있기 때문에 많은 연구자가 소재 연구데이터 플랫폼을 활용하기 위해서는 무엇보다 해당 플랫폼에 연구자가 원하는 데이터가 많이 확보되어 있어야 함

* 비슷한 용도의 플랫폼은 결국 하나의 플랫폼으로 통합되거나 사라지게 됨

- 이를 위해 분산된 데이터를 통합 관리할 때 데이터마다 고유번호* 등을 부여해서 데이터 제공자 정보를 추적 가능하는 방식으로 데이터 소유권이 데이터 제공자에게 있다는 점을 명확히 한다면, 연구자가 데이터 공유에 대한 거부감을 해소할 수 있을 것으로 기대

* 예컨대 DOI 등이 있음

- 국내에서 분산된 소재 연구데이터를 통합하더라도 데이터의 양적인 측면에서는 분명한 한계가 존재하므로, 이를 극복하기 위해 국제협력을 통한 해외 유사 DB와의 연계가 필요할 것으로 예상
- 현재 미국의 Materials Project, 유럽의 NOMAD 등의 세계적 소재(계산데이터) DB도 타 DB와 연계를 통해 데이터의 양을 확장 중
- 국내의 경우에도 세계적 DB와 국제협력을 활성화하여 상호 데이터

공유 체계를 구축함으로써 소재 연구데이터를 확장할 필요가 있음

※ 국제협력 시 데이터 표준화 체계도 연계하면서 진행하는 것을 고려

- 이 외에도 범부처 소재연구데이터 통합위원회 등을 구성하여 주체별, 사업별로 분산되어 있는 데이터를 통합하는 방향으로 정책적 노력을 기울일 필요가 있음

4.4. 결론 및 정책 제언

- ‘소재연구의 패러다임 전환’을 촉진하기 위해 기존의 탐색·설계 중심에서 측정분석, 공정설계까지 긴밀히 연결·확장된 데이터 기반 소재 개발의 전주기 공정 간 ‘연계·통합’이 요구됨
- 다양한 사업 추진방식의 장단점에 대한 비교 검토를 수행함과 동시에 동 사업의 취지, 목적 및 성격 등을 종합적으로 고려할 때 경쟁형 선기획 방식이 보다 바람직할 것이라고 사료됨
- 기업멤버십 등을 통해 산업계의 니즈 반영 및 기술이전 등에 대한 신속한 체계를 구축할 시 신소재의 상용화를 가속화하는 데 기여 가능할 것으로 판단됨
- 데이터 활용도 측면과 데이터의 품질과 영역에 의존하는 AI의 특성을 고려하여, 연구 시기별로 적합한 방식의 데이터 관리를 통해 양질의 데이터 구축을 도모하고자 함
- 이와 더불어 분산된 소재연구데이터의 통합·활용을 위해서는 데이터 표준화, 거버넌스 구축 및 관련 예산 확보를 통해 국가 연구데이터를 국가자산으로 만들어낼 수 있는 체계를 마련할 수 있도록 정책적 노력을 기울일 필요가 있음

참고문헌

[국내 자료]

- 과기정통부 보도자료. (2022.05.19.). 소재 연구데이터 수집·활용을 위한 국가 소재 데이터 스테이션(K-MDS) 오픈
- 과기정통부 보도자료. (2022.12.15.). 초고민감도 분자 카이랄성 측정기술 개발
- 과기정통부 보도자료. (2023.03.22.). 대한민국을 먹여 살릴 100대 미래소재 발굴
- 과기정통부. (2019). 2019년도 국가연구개발사업 자체평가 보고서
- 관계부처 합동. (2020). 데이터 기반 소재연구 혁신허브 구축·활용방안
- 융합연구정책센터. (2021). 융합연구리뷰
- 전자신문. (2021.11.24.). 전남대, AI기반 소재탐색 플랫폼 구축...고성능 양극 소재 세계 첫 개발. <https://www.etnews.com/20211124000010>
- 전자신문. (2023.10.4.). [ET단상] AI와 소재과학: 새로운 과학적 발견의 기대. (검색일: 2023.11.2.). <https://www.etnews.com/20231003000033>
- 한국에너지기술연구원. (2022). Horizon Europe(2021~2027) EU 연구혁신 프로그램 - “기후변화대응기술” 중심으로
- AI타임스. (2021.11.01.). [삼성 AI 포럼 2021] 새로운 소재 개발에 드는 막대한 시간, 이젠 인공지능으로 극복한다. <https://www.aitimes.com/news/articleView.html?idxno=141300>
- Forbes. (2022.5.23.). [알키미스트 프로젝트] AI 기반 초임계 소재 | 연세대 이영국 교수. <https://jmagazine.joins.com/forbes/view/336123>
- KIAT. (2015). 미국의 소재개념 이니셔티브 실행계획
- KISTEP. (2022). 소재 신(新)연구방법론
- KISTI. (2011). 국가아젠다 연구과제의 기술영향력 분석사업(제2차)
- _____. (2020). 과학기술혁신 정책 아젠다 2030
- LG AI 연구원. (2021.12.14.). 『LG AI Talk Concert - The Best of 2021』 으로 살펴본

LG AI연구원의 현재와 미래. (검색일: 2023.11.2.)
<https://www.lgresearch.ai/news/view/?seq=163>

S&T GPS. (2014). 미국, 소재계놈이니셔티브(MGI) 전략계획 발표. (검색일: 2020.06.04.)
<https://now.k2base.re.kr/portal/trend/mainTrend/view.do?poliTrndId=TRND00000000000026881&menuNo=200004>

_____. (2019). [이슈분석] 128호 일본의 미래소재 개발 전략과 시사점. (검색일: 2020.02.01.)
https://now.k2base.re.kr/portal/issue/ovseaIssued/view.do?poliIssueId=ISUE_00000000000926&menuNo=200046&pageIndex=

[국외 자료]

- A. Agrawal et al. (2016). Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science. *APL Material*. 4. 053208
- Amil Merchant and Ekin Dogus Cubuk. (2023). Millions of new materials discovered with deep learning
- Barker, M., Chue Hong, N.P., Katz, D.S. *et al.* (2022). Introducing the FAIR Principles for research software. *Sci Data* 9, 622
- Gong, H., He, J., Zhang, X. *et al.* (2022). A repository for the publication and sharing of heterogeneous materials data. *Sci Data* 9, 787
- M. L. Green, C. L. Choi, J. R. Hatrick-Simpers, A. M. Joshi, *et al* (2017). Fulfilling the promise of the materials genome initiative with high-throughput experimental methodologies. *Appl. Phys. Rev.* 1 March ; 4 (1): 011105
- National Science and Technology Council. (2021). Materials Genome Initiative Strategic Plan
- Puchala, B., Tarcea, G., Marquis, E.A. et al. (2016). The Materials Commons: A Collaboration Platform and Information Repository for

- the Global Materials Community. JOM 68, 2035-2044
- R. Jose, S. Ramakrishna. (2018). Materials 4.0: Materials big data enabled materials discovery, Applied Materials Today, Volume 10, 127-132
- Scheffler, M., *et al.* (2022). FAIR data enabling new horizons for materials research. *Nature* 604, 635-642
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., & Ceder, G. (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials. *Nature*, 1-6.
- Wang, Z., Chen, A., Tao, K. *et al.* (2023). AlphaMat: a material informatics hub connecting data, features, models and applications. *npj Comput Mater* 9, 130
- Wilkinson, M. D. *et al.* (2016). The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship. *Sci. Data* 3:160018
- Xie. J., Su, Y., Zhang, D. *et al.* (2022). A vision of Materials Genome Engineering in China. *Engineering*. 10(3).
<https://www.engineering.org.cn/en/article/34342/detail>

[폰트]

문화체육관광부, 세종대왕기념사업회

[1안]

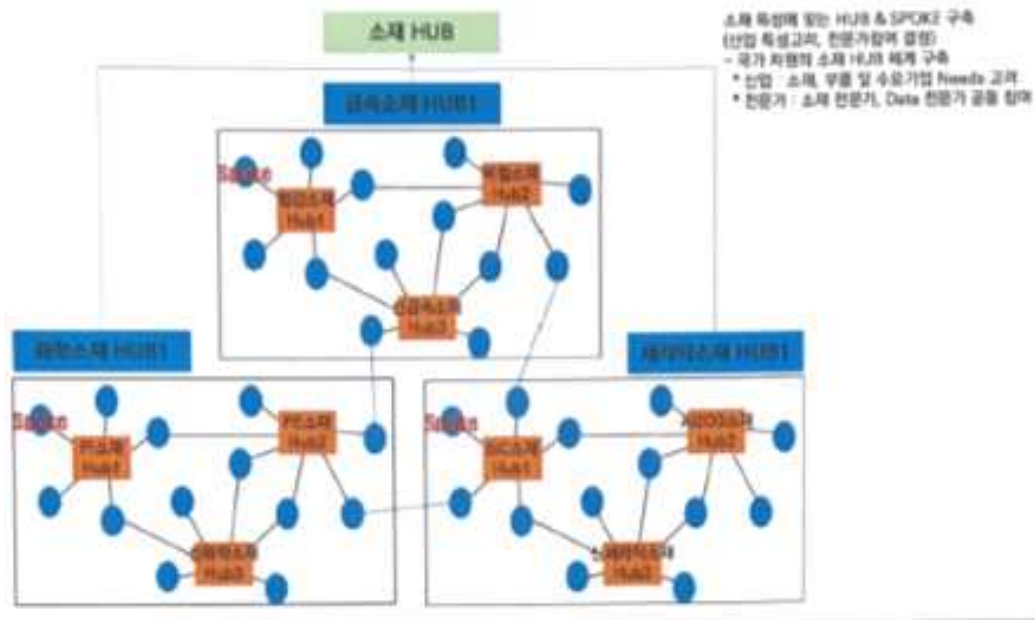
소재분류체계 활용

- HUB(& SPOKE) 체계 중에서 대표 분야를 선정하여 소재HUB 구축
 - (HUB 구조(안)) HUB - Sub HUB - SPOKE*
 - * SPOKE 개념은 전문가 자문 등을 통해 필요하다고 판단될 시 정립
- 기획 추진방향(안)
 - (추진 방안(안)) 기존의 기술분류체계 등을 기초로 국가 차원의 HUB의 분류체계(안)을 도출한 후 전문가 자문, 민관협의회 등을 통해 확정
 - (추진 절차(안)) 소재 특성에 맞춰 대분류 수준에서 HUB를 구분한 후, 수요기업 등 니즈 발굴 및 소재·데이터 전문가 자문을 통해 목적 또는 특성 중심의 Sub HUB 체계 도출 및 대표분야 우선순위 평가*
 - * 우선순위 평가시 민관협의회 등 전문가들을 대상으로 Sub HUB 혹은 SPOKE별 시급성, 중요성, 파급효과 등을 국가전략기술, 국가 안보, 친환경 공정 등을 기준으로 평가 고려

< 고려사항 >

- 관련 연구자들의 데이터 기반 소재연구를 위한 기본 체계 및 구조 확립, 중장기적으로 K-MDS 활용을 활성화하기 위한 발판 마련
- 반면 국가과학기술표준분류체계 등 소분류 체계를 허브 기본 단위로 설정할 경우 소재허브가 커버해야 하는 범위가 지나치게 방대해질 수 있음
 - ※ K-MDS 특화센터에 버금가는 규모가 될 수 있음
- 파급력 있는 소재개발을 위한 전략성 측면에서 취약할 수 있음

< 소재 HUB(예시) >



철강소재 Hub system and function



※ 출처 : 데이터 기반 미래소재(HUB구축) 신규사업 기획 착수보고 회의자료('23. 8.3.)

< 소재분류체계(안) >

중분류	소분류	비고
금속	철계금속	순철
		강(탄소강, 합금강, 스테인리스강)
		주철(회주철, 백주철, 구상흑연주철)
	비철계 금속	비철금속(구리, 알루미늄, 납 등)
		황동(구리+아연), 청동(구리+주석), 땀납(납+주석)
		전이금속 합금(구리합금, 알루미늄합금, 티타늄합금, 마그네슘합금, 니켈합금, 아연합금 등)
		귀금속합금(Ag, Au, Pt 등)
		기타 합금 : 초합금(Superalloy), 형상기억합금, 수소저장합금 등
세라믹	산화물 세라믹	
	질화물 세라믹	
	탄화물 세라믹	
	규화물 세라믹	
	기타 세라믹	
폴리머 (고분자)	천연 고분자	
	합성 고분자	합성수지(열가소성수지, 열경화성수지, 이온교환수지)
		합성섬유
		합성고무
	무기 고분자	
	감광성 고분자	
	전도성 고분자	
	액정	
	절연박막재료	
복합재료	금속복합재료 (metal matrix composite)	
	세라믹복합재료 (ceramic matrix composite)	
	고분자복합재료 (polymer matrix composite)	

※ 소재기술백서, 산업기술분류표, 국가과학기술표준분류체계 등을 참고하여 재구성

< 관계 전문가 자문회의('23.8.17) 결과 >

① 2안으로 잠정 결정

다만, 향후 구축될 각 소재 hub가 위치할 소재분류체계의 Tree를 짜서 위치 지을 필요(1안 참고 필요)

② 미래소재 HUB의 크기(범주 또는 레벨) : 100대 소재보다는 좀 더 크게 구축

○ 100대 미래소재를 참고하여 구체적인 품목 수준의 소재별 HUB 구축

※ HUB 구성(예시) : 고전압 구동 전력모듈용 방향제어 방열 접합소재 HUB

⇒ 100대 소재보다 좀 더 큰 범위로 구축

○ 기획 추진방향(안)

－ (분석 대상) 12대 국가전략기술 분야별 도출된 100대 미래소재*

* 대한민국을 먹여 살릴 100대 미래소재 발굴(과기부, 2023)

< (참고) 미래소재 확보전략('23.3) 안건 중 소재HUB concept >

□ (소재HUB 구축) 신소재 또는 대체소재 확보를 위해 계산과학·측정분석·공정·실험 데이터를 수집·생성·활용하는 소재별 HUB 구축 추진

○ (신소재) 100대 미래소재 중 특정 물성 구현을 위해 신소재 확보가 필요하고 AI 활용 필요성, 경제적·기술적 우선순위가 높은 소재 지원

○ (대체소재) 글로벌 수요 공급 예측, 국내 기업 점유율, 소재 확보 여건 등 종합분석·평가를 통해 대상 소재 선정

※ 출처 : 과기정통부(2023). 대한민국을 먹여 살릴 100대 미래소재 발굴; 데이터 기반 미래소재(HUB구축) 신규사업 기획 착수보고 회의자료('23. 8. 3.)

－ (추진 방안(안)) 전문가 자문, 민관협의체 운영 등을 바탕으로 100대 미래소재 중 우선순위 평가를 통해 구체적인 개발 대상 소재 후보군 제시

※ 중점 기술 분야 및 분야별 소재 품목에 대한 우선순위 평가를 통해 개발 대상 소재 후보군 도출

－ (우선순위 선정 절차(안))

- ① 12대 국가전략기술 분야 중 소재가 초격차 확보에 획기적인 역할을 할 수 있는 상위 분야 도출

※ 예) 이차전지, 반도체, 수소, 양자 등

- ② 1단계를 통해 좁혀진 기술 분야별 미래소재 중 데이터 기반 신소재 개발의 적합성, 시급성, 중요성, 파급효과* 등을 고려하여 분야별 소재 선정

* 평가시 국가 안보, 친환경 공정 등을 함께 고려



부록2

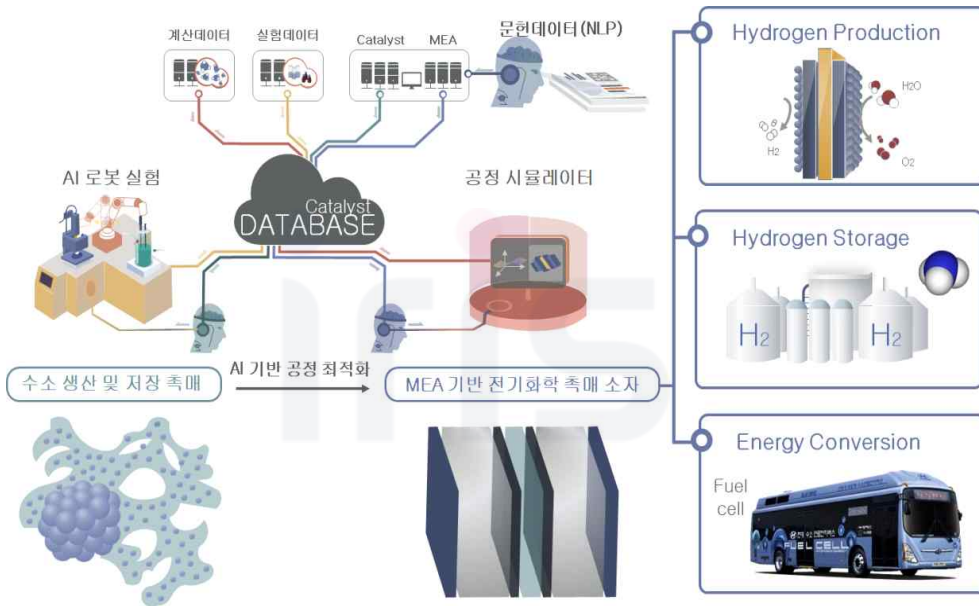
소재 HUB 예시

소재HUB 예시1

수소 생산·저장 전기화학 소자용 금속-세라믹 하이브리드 슈퍼 촉매 연구단

□ 소재허브 개요

- (정의) AI와 로봇 기술을 기반으로 수전해(수소 생산) 및 그린 암모니아 생산(수소 저장)용 고효율·고안정성 합금-세라믹 하이브리드 촉매와 전기화학소자를 개발하고, 관련 전기화학 촉매 데이터·AI 기술 축적 및 공개



<수소 촉매 허브 개요>

- (글로벌이슈) 최근 국제 유가 급등과 러시아의 우크라이나 침공 등으로 글로벌 에너지 안보 이슈가 부상하며 세계적으로 수소로의 에너지 전환이 빨라질 것으로 전망하고 있는 상황에서, 수소에너지 분야 핵심인 수소 생산·저장 촉매 개발을 통해 세계적 리더쉽 확보
- (데이터이슈) 세계적으로도 공개된 소재 DB는 대부분 계산데이터 중심이고, 소재-분석-공정-시스템 등의 소재개발 전주기 정보를 포함하는 DB는 전무. 본 연구에서는 전기화학 촉매 분야의 소재개발 전주기 (계산+실험) 데이터를 생산·활용하여 소재-시스템간의 간극 해소

□ 소재 허브 필요성

- 세계적으로 수소에너지로의 전환이 가속화되고 있는 상황에서 수소에너지 분야의 핵심소재인 촉매를 빠르게 개발하고 관련 데이터를 국가적으로 축적·관리하여 세계적 리더쉽 확보 필요
- 현재 에너지·환경 산업에 사용되는 소재의 핵심원소는 백금계 귀금속 위주여서, 이는 높은 가격 및 원소의 편재성 이슈로 관련 산업 성장에 큰 걸림돌이 되고 향후 국가간의 정치적인 문제를 야기할 수도 있으므로 백금계 원소를 대체할 소재 개발에 대한 집단연구가 필요
- 전기화학 촉매는 에너지 변환·저장 분야의 핵심 소재로서 본 연구에서 구축된 DB는 수소에너지 분야뿐만 아니라 타분야(CO₂ 전환, 대기정화, 수처리 등)에도 활용 가능하여 국가 소재허브로서 역할 수행 가능

□ 기대효과 및 활용방안

- **(기대효과 1)** 수소에너지 분야의 핵심소재인 수소 생산저장용 신촉매를 개발하고 관련 소재 DB를 체계적으로 구축하여 수소에너지 세계적 리더쉽 확보 및 국가 경쟁력 확보
- **(기대효과 2)** 재료과학, 화학공학, 계산과학, 데이터과학 및 로봇과학 등의 다학제간 대형융합연구를 통해 기존의 촉매기술 개발 방법과는 다른 새로운 연구방법론을 제시함으로써 소재 분야의 미래 선도형 글로벌 기술경쟁력 확보
- **(활용방안 1)** 촉매는 에너지 및 화학산업의 근간이 되는 소재로서 본 연구를 통해 개발된 촉매는 현 백금계 촉매의 고비용 문제를 해결할 수 있어, 수소에너지뿐만 아니라 환경, 석유화학 등의 산업 분야로도 확장 가능
- **(활용방안 2)** 촉매 소재 개발 전주기(합성-분석-평가-공정-시스템 제작 등) 데이터를 생산하고, AI 기술을 접목하여 소재 탐색 및 공정최적화 기술 개발 및 공개할 예정이며, 이는 타연구자가 쉽게 활용이 가능하고 산업체에 기술이전 등을 통해 소재개발 비용을 획기적으로 절감 가능

부록3

소재분류체계(안)

[1안]

응용분야 기준 소재분류체계(안)

- 소재의 응용분야를 기준으로 ①에너지·환경소재, ②스마트·IT소재, ③구조·안전소재, ④바이오·의료소재를 대분류로 한 소재분류체계(안) 도출

< 소재분류체계(안) >

대분류	중분류	예시
①에너지·환경소재	수소에너지	생산, 저장, 활용, 연료전지 등
	환경	재활용, 수처리, 담수화, CO ₂ 전환, 공기정화, 생분해성 등
	에너지저장	이차전지, ELS, 축전지 등
	신재생에너지	태양전지, 풍력, 해양, 열전, 압전 등
②스마트·IT소재	IC·디바이스	메모리, 로직, 배선·패키징, 전력반도체 등
	디스플레이	TFT, 발광소자 등
	로봇	센서, 액추에이터, 소프트 로봇소재 등
	IoT	통신, 광섬유, 센서, 웨어러블 소재 등
	광학	레이저, 메타소재, 스텔스, 포토디텍터 등
	양자·AI	초전도체, 위상절연체, 뉴로모픽 등
③구조·안전소재	우주·항공	극한소재, 복합재료, 발사체 등
	모빌리티	경량, 복합소재, 모터, 자성재료 등
	사회인프라	철강, 콘크리트, 인프라, 방식·내식소재 등
	기계·제조	공구, 금형, 절삭, 마찰재, 윤활제 등
	원자력	노심소재, 노벽소재, 차폐재 등
④바이오·의료소재	바이오	진단, 탐지, 치료 등
	의료	복원, 약물전달, 의료기기 등

※ '23. 9. 20./ 9. 25. 전문가 자문회의(7인)를 통해 도출

[2안]

원소재 기준 소재분류체계(안)

2-1. 연구재단 분류(안)

구분 (연구재단 분류)		금속						화학					세라믹					복합소재									
		철계		비철계				고분자소재	탄성소재	바이오소재	비고분자유기소재	무기소재	유무기하이브리드	산화물계	비산화물계				금속복합소재	고분자복합소재	세라믹복합소재	탄소복합소재					
		철	강	알루미늄	마그네슘	타이타늄	구리	니켈	아연						산화물계	질화물계	탄화물계	붕화물계	불화물계	황화물계							
반도체	메모리																										
	로직																										
	배선·패키징																										
	전력반도체																										
디스플레이	TFT																										
	발광소자																										
에너지저장	이차전지																										
	커패시터																										
신재생에너지	ESS																										
	태양전지																										
	열전																										
	압전																										
	풍력																										
수소에너지	해양																										
	생산																										
	저장																										
환경	연료전지(활용)																										
	재활용																										
	수처리																										
	담수화																										
	CO ₂ 전환																										
	공기정화																										
양자·AI	생분해성																										
	초전도체																										
	위상절연체																										
차세대통신	뉴로모픽																										
	통신																										
광학	광섬유																										
	레이저																										

구분 (연구재단 분류)		금속							화학					세라믹					복합소재						
		철계		비철계					고분자소재	탄성소재	바이오소재	비고분자유기소재	무기소재	유무기하이브리드	산화물계	비산화물계				금속복합소재	고분자복합소재	세라믹복합소재	탄소복합소재		
		철	강	알루미늄	마그네슘	타이타늄	구리	니켈	아연							산화물계	질화물계	탄화물계	붕화물계	불화물계	황화물계				
	메타소재																								
	스텔스																								
	포토디텍터																								
로봇	센서																								
	액추에이터																								
	소프트 로봇소재																								
바이오	진단																								
	탐지																								
	치료																								
의료	복원																								
	약물전달																								
	의료기기																								
우주·항공	극한소재																								
	복합재료																								
	발사체																								
모빌리티	경량																								
	복합소재																								
	폴리머																								
	모터/자성재료																								
사회인프라	철강																								
	건축																								
	콘크리트																								
	인프라																								
	방식·내식소재																								
기계·제조	공구																								
	금형																								
	절삭																								
	마찰재																								
원자력	노심소재																								
	노벽소재																								
	차폐재																								

2-2. 소재핵본 분류(안)

구분 (소재핵본 분류)		금속				화학			세라믹				복합소재			
		철계		비철계		유기	무기	하이브리드	산화물계	비산화물계	금속	고분자	세라믹	탄소		
반도체	전공정															
	후공정															
	공정/장비															
디스플레이	발광모드															
	구성요소															
	응용															
우주항공	발사체															
	위성															
	우주탐사															
	고정익															
	회전익															
모빌리티	자율주행차															
	전기/수소차															
	UAM															
수소	수소생산															
	수소저장이 송															
	수소활용															
이차전지	전극소재															
	전해질소재															
	기타 전지소재															
로봇	산업로봇															
	소프트로봇															
	국방로봇															

구분 (소재핵본 분류)		금속						화학			세라믹						복합소재			
		철계			비철계			유기	무기	하이브리드	산화물계			비산화물계			금속	고분자	세라믹	탄소
바이오	바이오 합성/소재 생산																			
	바이오 기능 증강																			
	바이오 활용소재																			
차세대 통신	통신시스템																			
	네트워크/전송																			
원자력	차세대 원자력 시스템																			
	후행핵주기 관리시스템																			
	핵융합로																			
양자	센서																			
	컴퓨터																			
	통신																			

[1안]

연구주제 도출을 위한 수요조사서

1. 국가전략기술 분야

☐ 반도체 ☐ 디스플레이 ☐ 이차전지 ☐ 우주항공 ☐ 차세대원자력 ☐ 차세대통신
☐ 양자 ☐ 인공지능 ☐ 모빌리티 ☐ 로봇•제조 ☐ 수소 ☐ 바이오

2. 국가전략기술 분야중 국가아젠다 핵심이슈

2.1 국가 아젠다 분야

☐ 건강 ☐ 안전 ☐ 고령화 ☐ 기후변화 ☐ 에너지/자원 ☐ 환경 ☐ 우주 ☐ 초연결/초지능
☐ () 해당사항 없거나 수정이 필요한 경우 자유롭게 추가가능, 별첨자료* 참고

－ 출처 :

(아젠다 체크 후에 출처를 작성하여 주세요)

* 별첨자료 : 과학기술혁신 정책 아젠다 2030, KISTI(2020), 국가아젠다 연구과제의 기술영향력 분석사업(제2차), KISTI(2011) 에서 제시한 아젠다를 활용

2.2 국가아젠다 핵심이슈

☐ 해당분야 국가아젠다 보다 구체적으로 2~3줄로 자유롭게 작성 (문제제기)

－ 예시 : (국가아젠다 안전) : 이차전지 전기자동차 화재문제 해결

☐ 국가 아젠다 문제해결 관련 기술이슈 제시

3. 소재허브 국가 기여도

3.1 소재연관도 (소재가 국가아젠다에 미치는 영향력)

☐ (영향력 근거 및 배경 상세설명)

3.2 산업영향력

☐ (산업 영향력 근거 및 배경 상세설명)

4. 소재허브의 주제 제안

작성요령 : 용도 + 특성(선택 옵션) + 소재명

- 용도(시스템과 모듈이 가급적 표현) 및 특성을 포함한 소재명 작성 (연간 30억원규모, 5년)
- 예시 : 우주발사체 외장방호용 비산화물계 세라믹소재, 차세대 통신 부품용 고내열 고분자소재, UAM 차체용 경량금속소재 등

제안 소재명	~용 xxxxx 소재 (용도 + 특성(선택 옵션) +소재명)
-----------	-------------------------------------

☐ 소재허브 개요

☐ (정의) 2~3줄로 작성

* 개요 그림으로 간단하게 표현 요망

☐ (글로벌이슈) 2~3줄로 작성

☐ (데이터이슈) 2~3줄로 작성

☐ 소재 허브 필요성

☐ 2~3줄로 작성

☐ 2~3줄로 작성

☐ 2~3줄로 작성

☐ 세부소재명

세부소재명	개요	용도

☐ 기대효과 및 활용방안

☐ (기대효과) 2~3줄로 작성

☐ (활용방안) 2~3줄로 작성

5. 기타

제언할 내용이 있으면 자유롭게 작성

붙임

(예시) 국가아젠다 분야 :

없는 분야 자율적으로 추가 가능 (대분류, 중분류, 세분류 모두 가능)

대분류	중분류	세분류
건강	현대사회형 질병의 극복	암, AIDS 등 난치성 질환의 예방, 진단, 치료
		AI, SARS, 광우병 등 동물매개 감염성 질환의 예방, 진단, 치료
		과잉행동장애 등 환경유해물질 (중금속, 농약, 유기화합물, 공기오염) 유발질병의 진단, 치료결
		성인병 예방, 노화지연 등 기능성 식의약품 개발
		소아 및 성인 비만 해결
		스트레스 퇴치 수단의 확보
	식의약품안전	식품 위생 및 안전성 확보
		유전자 변형작물의 신뢰성 확보
안전	자연재해	지진, 해일, 태풍, 호우, 가뭄, 산사태, 폭설, 산불, 화산 등의 관측, 분석, 통보
	인위재해	폭발, 누출, 화재, 붕괴, 해양오염, 테러 등 예방·대비·대응·복구
		아동 안전사고 저감
		범죄 감시 및 보안
		사이버 테러/해킹 탐지 및 차단
		개인정보 보호
풍요	고령화	고령사회대비 생활지원기술
	교육	공교육 정상화를 위한 e-learning 기반 고도 및 활성화
		다민족/다문화 사회 도래 대비 교육기반 구축
에너지/ 자원	에너지의 효율적 활용	건축, 산업, 교통, 가정 등에서의 에너지 저감 환경 조성
		에너지 재활용 및 재생에너지 개발
		온실가스 감축부담의 본격화
	에너지 개발	태양, 수소, 풍력, 파력, 조수, 바이오 매스 등 대체에너지 개발
		차세대 원자력, 핵융합 기술 확보
	자원확보	석유, 가스 에너지 자원 확보
		광물자원개발
	저탄소/녹색	탄소고정, 기타
환경	물환경개선	음용수, 농산업 용수 등 물 부족 문제 해소
		지하수 보전/복원
		해수를 활용한 용수 확보
		하천 오염방지 및 정화
	생활환경 개선	대기 유해오염물질 및 악취물질 감지/제거
		황사, 산성비, 스모그 등 미세오염 감시, 예측, 저감
	국토보전 및 재생	생물다양성 보존
		적조피해, 해양오염, 생태계 교란 등 해양환경의 보존
		오염토양의 복원
		사막화 방지
	식량 및 생물자원의 안정적 확보	종자원 확보 및 보존
		안정적 농산물 공급 및 식물자원 활용의 극대화

* 출처 : KISTI(2020). 과학기술혁신 정책 아젠다 2030; KISTI(2011). 국가
아젠다 연구과제의 기술영향력 분석사업(제2차)

□ 주요 고려사항

○ 각 산업분야에 활용될 12대 국가전략기술분야의 신소재영역

※ 12대 국가전략기술분야 : ① 반도체, ② 디스플레이, ③ 이차전지, ④ 차세대원자력, ⑤ 수소, ⑥ 차세대통신, ⑦ 첨단바이오, ⑧ 우주항공, ⑨ AI, ⑩ 양자, ⑪ 첨단로봇·제조, ⑫ 첨단모빌리티

○ 구축되는 데이터의 체계*에 따른 응용분야의 신소재영역

※ 데이터의 체계에 따른 4대 응용분야 신소재 : ① 구조안전소재, ② 스마트IT소재, ③ 환경·에너지소재, ④ 바이오소재

* ①원소재의 물성 및 공정 최적화 데이터 체계, ② 미세 패터닝과 박막 증착 등을 통한 소자화 데이터 체계, ③ 핵심 원소재의 혼합 및 계면 제어 등을 통한 중간재 및 단위 시스템의 데이터 체계, ④ 바이오분야 연계 데이터 체계

○ 사업의 특성을 고려한 사항

(1) 소재-시스템(소자) 전주기 데이터 체계 및 수집·활용 전략

- 전주기 데이터 체계 : 개발하고자 하는 기술을 완성하기 위하여, 소재 및 시스템(소자) 수준에서 각각 구축하고자 하는 데이터 체계를 제안하고, 소재-시스템(소자) 데이터 순환체계를 기술 (데이터 체계를 가급적 그림자료로 표현하여 설명)
- 전주기 데이터 수집·활용 전략 : 전주기 데이터를 체계적이고 일관되게 수집하기 위한 전략을 기술하고, 수집된 데이터를 어떻게 활용하여 연구개발을 완성할지에 대한 전략을 기술

(2) 과제 종료 후 예상 성과물 제시

- TRL 4-6 수준의 성과물과 데이터 체계, 신소재 및 공정 데이터, 개발 프로그램, 원천소재 및 특허 작성

□ 수요조사서 양식

1. 기술 개요

제안 소재HUB 주제				
12대 국가전략기술 (택1)	☐ 반도체·디스플레이	☐ 이차전지	☐ 첨단모빌리티	☐ 차세대원자력
	☐ 첨단바이오	☐ 우주항공·해양	☐ 수소	☐ 사이버보안
	☐ 인공지능	☐ 차세대통신	☐ 첨단로봇·제조	☐ 양자
K-MDS 분류 (택1)	☐ 구조안전소재	☐ 스마트IT소재	☐ 에너지·환경소재	☐ 바이오소재

2. 연구개발의 필요성

3. 연구개발의 목표 및 내용

연구개발의 목표	
연구개발의 내용	

주) 연구개발의 목표는 200자 내외로 기술하고 이미지나 표 사용 금지

4. 소재-시스템(소자) 전주기 데이터 체계 및 수집·활용 전략

가. 전주기 데이터 체계 제안

나. 전주기 데이터 수집·활용 전략

5. 연구개발 동향 및 파급효과

연구개발동향	국내	
	국외	
파급효과		

6. 제안하는 기술의 국내·외 시장동향 및 영향

가. 국내·외 시장동향 및 규모

나. 사회·경제적 영향

7. 연구개발사업의 추진체계

8. 과제종료 후 예상성과물

iris

< 작성 방법 >

※ 총 5쪽 이내로 작성

1. 기술 개요

- 가. 제안 소재HUB 명 : 용도(시스템 혹은 소자가 가급적 표현) 및 특성을 포함한 소재명 작성 (총연구비 150억원/5년 규모 고려)
- 나. 12대 국가전략기술 : 가장 관련성 높은 기술분야를 선택 (택1)

2. 연구개발의 필요성

제안하는 기술 및 관련 소재 데이터 확보의 경제적·산업적 중요성과 이에 따른 연구개발의 필요성을 기술하고, 12대 국가전략기술과의 연관성 및 기여에 대해 기술

3. 연구개발의 목표 및 내용

- 가. 연구개발의 목표 : 연구개발하고자 하는 기술(또는 공정)의 수준·성능 및 품질을 가능한 정량적으로 기술
- ※ 200자 내외, 그림/표 삽입 불가
- 나. 연구개발의 내용 : 연구개발의 목표를 달성하기 위하여 수행할 세부기술의 내용 및 범위를 기술하고, 연구개발 예정품에 대한 사양·성능·용도 및 기능 등에 대하여 기술 (TRL 4-6단계 목표 달성을 위한 연구내용 기술)

4. 소재-시스템(소자) 전주기 데이터 체계 및 수집·활용 전략

- 가. 전주기 데이터 체계 제안 : 개발하고자 하는 기술을 완성하기 위하여, 소재 및 시스템(소자) 수준에서 각각 구축하고자 하는 데이터 체계를 제안하고, 소재-시스템(소자) 데이터 순환체계를 기술 (데이터 체계를 가급적 그림자료로 표현하여 설명)
- 나. 전주기 데이터 수집·활용 전략 : 전주기 데이터를 체계적이고 일관되게 수집하기 위한 전략을 기술하고, 수집된 데이터를 어떻게 활용하여 연구개발을 완성할지에 대한 전략을 기술

5. 연구개발 동향 및 파급효과

- 가. 연구개발 동향 : 제안하는 기술에 대한 국내·외의 연구개발 현황, 문제점 및 향후 전망 등을 기술
- 나. 파급효과 : 당해 기술의 향상 및 다른 기술에 대한 파급효과를 기술

6. 제안하는 기술의 국내·외 시장동향 및 규모

- 가. 국내·외 시장동향 및 규모 : 국내·외로 구분하여 기술하고 산출근거를 제시
- 나. 사회경제적 영향 : 해당하는 경우에만 기술하되, 연구개발 결과의 활용에 따른 예상 사회경제적 효과 등을 제시

7. 연구개발사업의 추진체계

: 개발 소재가 시스템(소자)화 하여도 우수한 성능을 확보하기 위한 ‘소재탐색·설계’-‘측정·분석’-‘공정·조합설계’ 연구팀간의 연계성을 보여주는 추진체계를 간략하게 도식화하여 작성

8. 과제종료 후 예상성과물

: 총 5년간 150억원(연 30억) 규모의 과제종료 후 예상되는 TRL 4-6 수준의 성과물과 데이터 체계, 신소재 및 공정 데이터, 개발 프로그램, 원천소재 및 특허 작성

부록5

선기획 일정(안)

□ 유사사업 추진절차

- (先기획) ①미래소재디스커버리사업(3~5개월)과 ②나노·소재기술개발사업 도전형 사업(6~7개월)이 先기획 연구결과에 따라 본 연구과제를 선정함

① 미래소재디스커버리사업('18년 선정 연구단 기준)

- 先기획 연구기간/연구비 : 과제당 3개월/35백만원(본연구단 3배수)
- 최종평가 절차를 준용하여 先기획과제를 평가한 후 본연구 선정 (先기획과제 종료시점과 본연구 개시시점 간 시차 존재)

② 나노·소재기술개발사업 도전형('21년 선정 과제 기준)

- 先기획 연구기간/연구비 : 과제당 6개월/37.5백만원(본연구과제 2배수)
- 단계평가 절차를 준용하여 先기획과제 종료 전 평가 후 본연구 선정 (先기획과제 종료 직후 본연구 개시)

구분	공고	先기획		본연구	
		선정평가	수행	선정평가	수행
미소디 (‘18년 선정)	‘17.8월	‘17.11월	‘17.12월~‘18.3월 (3개월)	‘18.5월	‘18.7월~‘24.7 월
	11개월 전	8개월 전	7개월 전	2개월 전	0개월
도전형 (‘21년 선정)	‘20.3월	‘20.5월	‘20.7월~‘20.12월 (6개월)	‘20.12월	‘21.1월~‘24.12 월
	10개월 전	8개월 전	6개월 전	1개월 전	0개월

- 先기획 연구기간 6개월을 포함할 경우, 본연구 개시 기준 적어도 10개월 전에는 사업이 공고되어야 함

□ 소재HUB사업 추진일정(안)

- 先기획 4개월 포함 및 본연구 연구개시를 '24.11.1.로 설정할 경우, 도전형 추진 일정을 참고하여 역산한 사업 추진일정(안)은 아래와 같음

구분	공고	先기획		본연구	
		선정평가	수행	선정평가	수행
소재HUB (‘18년 선정)	‘24.2월 or 3월	‘23.4월 or 5월	‘24.6월~‘24.9월 (4개월)	‘24.10월	‘24.11월~‘29.1 0월
	9개월 전	7개월 전	5개월 전	1개월 전	0개월

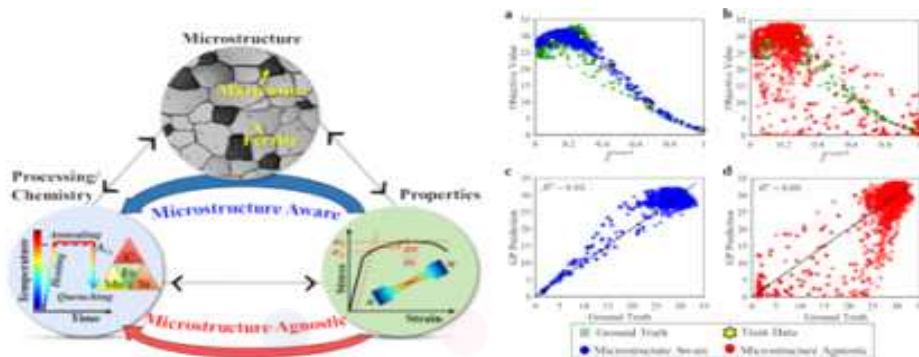
유사사업 현황 및 소재HUB 추진일정(안) 상세

구분		미소디 (‘18년 선정)	도전형 (‘21년 선정)	소재HUB 경쟁형 추진 시(선기획)
추진절차		기술수요조사 (`17.8.~9.)</div> <div>↓</div> <div>선기획과제 선정 (`17.10.~11.) ↓ 선기획 수행 (`17.12.~`18.2.) ↓ 연구단 선정 (`18.5.)</div> <div>↓</div> <div>본연구 수행 (`18.7.~`24.6.)	신규과제 공고 (`20.3.~4.)</div> <div>↓</div> <div>선기획과제 선정 (`20.4.) ↓ 선기획 수행 (`20.4.~`20.12.) ↓ 본연구과제 선정 (`20.12.~`21.1.) ↓ 본연구 수행 (`21.1.~`24.12.)	신규과제 공고 (`24.2.~24.3.)</div> <div>↓</div> <div>선기획과제 선정 (`24.4 또는 5.) ↓ 선기획 수행 (`24.6.~`24.9.) ↓ 본연구과제 선정 (`24.10.)</div> <div>↓</div> <div>본연구 수행 (`24.11.~`29.10.)
공모방식		Middle-up * 4개 분야 제시(극한물성 양자 알케미 스케일링 인간요강)	Bottom-up	미정
공고기간		2017-08-17~09-15	2020-03-02~03-31	‘24.2월~3월
선기획 선정	절차	(1차) 서면평가 (임명평가) (2차) 발표평가	(1차) 서면평가 *선기획 물량 대비 예산이상접수한 경우 (2차) 발표평가	미정
	일정	2017-11-07~11-08	(1차) 2020-04-13~04-22 (2차) 2020-05-12	‘24.4월~5월
	대상	35과제	(1차) 128과제 (2차) 12과제	-
선기획 수행		2017-12-18~2018-03-17 (3개월)	2020-07-01~2020-12-31 (6개월)	2024-06-01~2024-09-30 (4개월)
		35백만원	37.5백만원	미정
		18과제	4과제	미정
본연구 선정	절차	경쟁형 평가 (선18개-본6개, 3:1)	경쟁형 평가 (선4개-본2개, 2:1)	경쟁형 평가
	일정	2018-05-24~05-25	2020-12-10	‘24.10월 중
본연구 수행		2018-07-16~ 2024-07-15 (6년(2.5+3.5))	2021-01-01 ~ 2024-12-31 (4년(2+2))	2024-11-01 ~ 2029-10-31 (5년(미정))
		과제당 총 89억원 (연간 15억원 이내)	과제당 총 20억원 (연간 5억원 이내)	과제당 총 150억원 (연간 30억원 이내)
		6과제	2과제	5과제

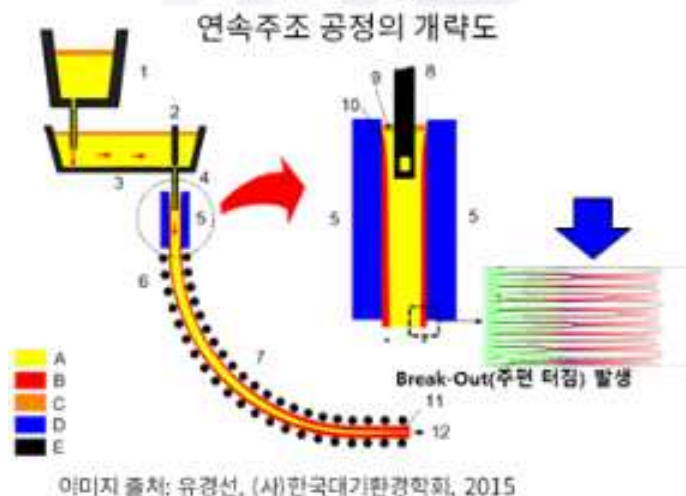
□ 구조/안전소재 분야

1. 사업수행 내용: 미래 모빌리티(자동차, UAM 등), 차세대 전차/장갑차, 우주/항공 등 다양한 분야에서 기존 구조재료를 대체할 수 있는 데이터 기반의 소재 탐색과 산업현장에 적용 가능한 스케일업(scale-up) 공정개발 및 소재/공정 DB 구축
 - 구조재료 분야 新 소재설계 패러다임인 Processing(공정) - Micro Structure(미세구조) - Property(물성) 상관관계를 확보할 수 있는 실험 및 계산 데이터베이스 구축 (그림 1 참조)
 - 구축되는 실험 데이터의 호환성을 위해 구조재료 분야 주조/열처리 및 측정/분석 실험의 표준 정의
 - 확보된 P-S-P 상관관계 DB로부터 응용 분야에 적합한 새로운 구조재료 합금 설계 및 랩스케일 제조 실증
 - 관련 산업 현장에 적용 가능한 스케일업 공정 개발(예: 철강 소재의 경우 연속주조공정에 사용 가능, 알루미늄 소재의 경우 다이캐스팅에 적용 가능)
2. 예시: 주조/전신재, 열처리/비열처리 통합형 플렉시 알루미늄 합금 개발
 - 열처리/비열처리, 주조/전신 합금의 경계를 허무는 크로스오버(crossover) 합금 개발
 - 데이터 기반 소재탐색:
 - * 조성-공정-미세구조-물성 상관관계 예측을 위한 일련의 데이터 (실험 및 계산) 생산/가공/활용 프로토콜 확립
 - * 구축된 DB로부터 원하는 물성의 소재를 설계할 수 있는 인공지능 기법 개발(Active learning or inverse design)
 - * 도출 소재의 랩스케일 제조 실증
 - 데이터 및 계산 기반 스케일업 공정설계:

- * 구조재료 분야에서 실험기반의 스케일업 공정 개발은 현재의 예산으로 불가능
 - * 매크로 유동/열전달, 매크로 변형 및 미세구조 예측 공정해석 소프트웨어를 기반으로 스케일업 공정 설계 (그림3 참조)
 - * 스케일업 공정에서 공정-미세구조-물성 사이 상관관계 예측을 위한 계산 데이터 생산/가공/활용 프로토콜 확립 (그림3 참조)
 - * 설계된 소재 및 공정이 관련 산업현장에서 적용 가능해야 함 (그림 2 참조)
- 설계된 스케일업 공정의 검증을 위해 준양산 스케일에서 시작품 제작

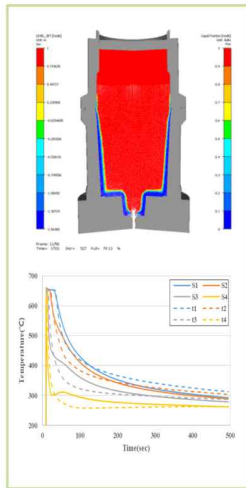


< 그림 1 > 실험데이터를 P-S-P 상관관계가 구성되도록 생산해야만 인공지능 학습 성능을 우수함을 보여주는 그림 (A. Molkeri et al. Acta Mater. (2022))

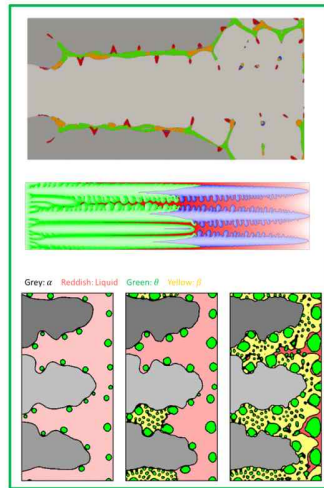


< 그림 2 > 파란색 화살표의 응고 미세구조를 가지는 철강 합금은 철강 연속주조 공정에 적용 시 Breakout 발생 가능성이 높아 산업현장에 사용할 수 없음

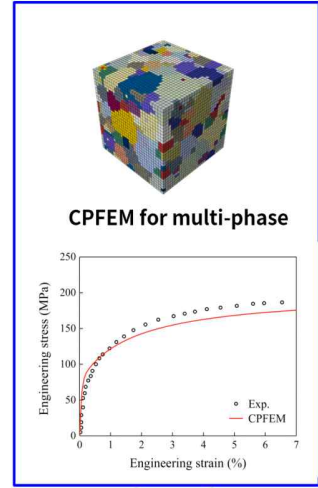
Macro casting module



Microstructure prediction module



Plastic deformation module



< 그림 3 > 공정-미세구조-물성 상관관계 예측을 위한 계산 데이터 확보 프로토콜의 예시

iris

□ 스마트IT 소재 분야 (차세대 반도체 집적회로의 배선 소재)

1. 시작품 구현을 위한 정량적, 정성적 연구개발 목표의 자율 제시

가. 배선소재 탐색/설계: 개별 소재 단일 박막 관련

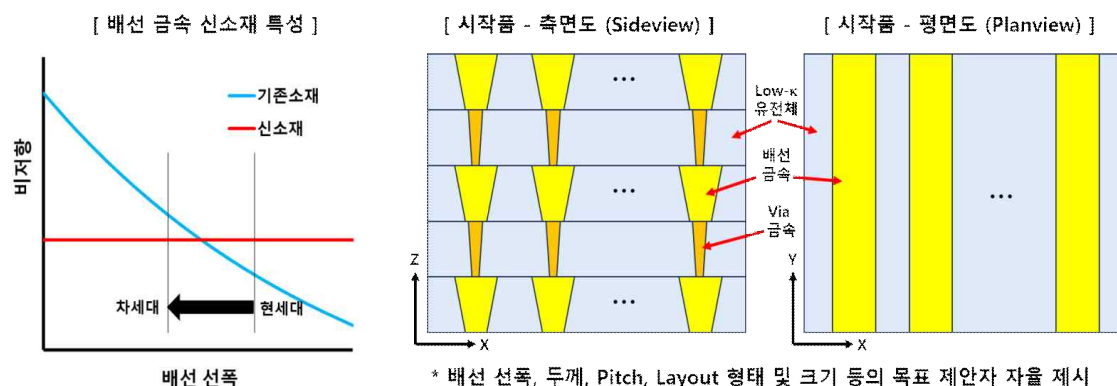
- 비저항, 탄성계수, 열팽창 계수 등의 소재 물성값 목표
- Electromigration, Stress migration 억제 수준
- 기타 핵심 물성들

나. 공정조합설계: 제한 조건 및 핵심 공정 요소 관련 목표 제시

- 공정 온도, 잔류 응력
- Gap fill (Gap의 폭, 깊이) 또는 식각 공정 (Top/bottom CD) 등
- Low- κ 유전체, Barrier 금속, Via 금속 등 접합 물질과의 상호 작용
- (CVD, ALD) Precursor 또는 (PVD) Sputter Target 등
- 기타 관련 요소들

다. 시작품: 집적도, 재현성, 성능 적정 수준 목표 제시

- 가로, 세로 크기 및 최대 적층 수
- 박막 두께, 선폭, Pitch 등
- RC Delay
- 기타 핵심 성능들



< 그림 4 > 차세대 배선 소재 공정개발 과제 수행 후, 제시할 시작품의 예시

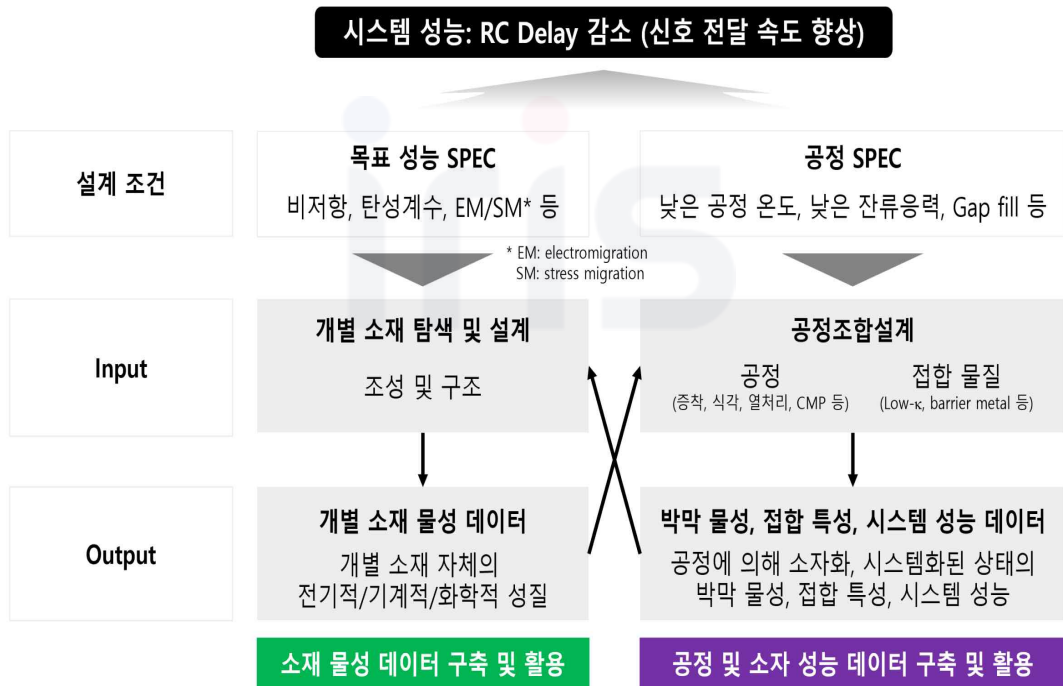
2. 소재 및 공정 DB 구축 계획 제시

가. 개별 소재 관련 데이터베이스

- (Input) 조성 및 구조 → (Output) 소재 물성

나. 공정에 따른 소재 물성 및 소자/시스템 성능 데이터베이스

- (Input) 소재 선택 및 두께 변화 → (Output) 소재 물성 변화
- (Input) 공정 조건 변화 → (Output) 결함(결정립계, 기공, 계면거칠기 등) 형성 및 물성 변화
- (Input) 물질 접합 → (Output) 접착 저항, Intermixing 등
- 기타 중요 인자들에 대한 사항 고려



< 그림 5 > 과제 목표 달성 과정에서의 데이터 생성 및 흐름도

3. 최종 결과물

가. 목표 성능을 만족시키는 시작품군

- 차세대 배선 소재군 도출

- 소재별 최적 공정조합 도출
- 소자의 성능을 좌우하는 핵심 공정인자 도출

나. 차세대 배선 소재 설계 및 공정 데이터군

- 사업단에서 공통으로 활용한 표준 템플릿 구축
- 차세대 배선 소재 설계 및 합성에 대한 데이터 수집 및 활용 기법 개발, 관련 데이터 생성
- 배선 소재 물성 측정과 평가 기법 개발 및 관련 데이터 생성
- 소자화를 위한 각 공정별 데이터 수집 및 공정 최적화 활용 기법 개발, 관련 데이터 생성
- 소자화를 위한 집적 공정 데이터 수집 및 공정조합 최적화 활용 기법 개발, 관련 데이터 생성
- 차세대 반도체 집적회로 성능 측정과 평가 기법 개발 및 관련 데이터 생성
- 축적된 데이터와 설계 및 공정 최적화 프로그램, K-MDS에서 구동할 수 있도록 구현

4. 기타 산출물

- 가. 성능 구현 시작품과 후보 소재군, 관련 데이터를 기술이전
- 나. 사업 종료 후에도 관련 분야 연구자들이 지속적으로 데이터를 구축하고 활용함으로 차세대 반도체 집적회로 배선 분야의 허브 역할

□ 환경·에너지 소재 분야(황화물계 전고체 전지용 소재 및 공정기술 개발)

1. 시작품 구현을 위한 정량적, 정성적 연구개발 목표의 자율 제시

가. 전고체 전지 소재 탐색 및 개발: 양·음극 활물질, 전해질, 분산재, 도전재, 바인더 등 관련 지표

- 양·음극 활물질: 에너지밀도(용량)/출력/충·방전율/충·방전 내구수명 등
- 고체 전해질: 이온전도도, 계면 저항 등
- 소재별 물리적·화학적 내구도 (전기화학적 안정성, 내열성, 수분 환경 내구성 등)
- 소재별 중간재로의 가공 가능성 (분산성, 수분 환경 내구성 등)

나. 중간재 제조 및 가공물성 분석 및 제어 기술 관련 지표

- 소재 물성 지표 (입자 크기, 입자 형상, 입도 분포, 표면 특성, 이온 전도도)와 공정 변수 (코팅/건조/압착 등), 전극 성능 변수 (결착력, 계면저항, 고율 특성 등)의 연계 이해
- 소재들의 조성, 첨가물, 혼합 방식 등의 최적화를 통한 균일한 분산의 중간재 제조 기술 개발 (분산성 평가 기술 발굴 및 활용 등)
- 만들어진 중간재의 가공물성 (유변물성 등)을 분석하고, 핵심 공정 (코팅/건조/압착 등)과 전극 구현시 핵심 성능 지표 (결착력, 계면 저항, 고율 특성 등)를 연계하는 total engineering 기술 개발
- 최종 전고체전지 셀의 불량과 핵심 공정 변수를 연계할 수 있는 소재 및 공정 인자 도출 (공정 수율 제고 목적)

다. 중간재의 최적 가공을 위한 핵심 공정 기술 관련 지표

- 중간재를 가공하여 전극을 제조하기 위한 핵심 공정 (코팅, 건조, 가압 등) 관련 신기술 개발 및 활용
- 기존 핵심 공정의 생산성 향상 (대면적화, 후막화, 양산 가능성 확보 등) 기법 개발

라. 소재 및 공정 DB 구축 및 활용 기술 관련 지표

- 1) 황화물계 전고체 전지 소재의 핵심 물성 데이터 (입도 분포, 전

- 극 조성, 바인더 분자량 등), 2) 혼합 및 분산을 통해서 제조된 중간재의 가공물성 데이터, 3) 핵심 공정 중에 얻어진 공정 데이터, 4) 전극 핵심 특성 데이터들을 효과적으로 저장 및 활용 가능한 형태의 데이터 베이스(DB)로 구축 및 관리하는 플랫폼 개발
- 기계학습 및 인공지능 기법을 도입하여, 구축된 소재, 공정, 전극 성능 데이터를 효과적으로 활용하는 기술 개발 및 활용 사례 도출 및 검증: 구축 데이터로 공정 수율/양산 캐패시티, 셀 성능 사전 시뮬레이션 기능

마. 시작품 관련 지표

- 소재 데이터 허브를 기반으로 도출된 최적 황화물계 전지의 종합적인 평가
 - 1) 전지의 성능: 전압/전류/SOC 정밀도, 충·방전율, 출력 특성, 급속 충전 특성, 에너지 용량 및 효율, 사이클 수명, 충·방전 내구수명
 - 2) 전지의 안전성 및 신뢰성: 고온 및 저온 운전 및 방치 특성, Nail penetration
 - 3) 전지의 운전 편의성: 체결압 및 구동 온도 특성
 - 4) 차량 탑재 가능성: 대면적화, 적층 시의 성능 유지 특성, 파우치 셀의 연속 가압 공정 여부 (불연속 WIP 공정 대체)

2. 소재 및 공정 DB 구축 및 활용 계획

가. 개별 소재 DB 구축

- 양·음극 활물질, 고체 전해질, 도전재, 고분자 바인더, 분산제 등의 전고체 전지용 소재들의 물성 데이터 베이스의 표준화 및 체계화
 - 1) 소재별 핵심 물성 항목 제시 및 이들 간의 조합 범위 규정
 - 2) 핵심 물성 항목별 측정 조건 표준화 및 기준 프로토콜 제시

나. 중간재 DB 구축

- 중간재 제조 공정 조건에 따른 중간재의 유변물성 기반 가공 물성 데이터 베이스의 표준화 및 체계화

- 1) 핵심 공정과 밀접하게 관련된 중간재의 핵심 가공 물성 항목 도출
- 2) 중간재별 핵심 가공 물성 항목 측정 조건 표준화 및 기준 프로토콜 제시

다. 핵심 공정 DB 구축

- 공정조건에 따른 중간재의 가공 결과물의 특성 및 성능 (전극 미세구조, 전극 두께, 접착력 등) 데이터 베이스의 표준화 및 체계화

- 1) 공정별로 중요한 공정성 분석 및 생산성 평가 지표 정의
- 2) 공정성 및 생산성 지표에 기반한 공정 DB 구축

라. 소재-중간재-공정 DB를 기계학습과 조합하여 활용할 수 있는 플랫폼 구축

- 구축된 DB를 쉽게 공유, 관리 및 활용할 수 있는 자체 데이터 관리 및 활용 플랫폼을 개발하고, K-MDS와 연계하여 활용
- 소재-중간재-공정-셀 데이터 베이스와 기계학습 기법을 조합하여 최적의 소재-공정-셀 조합을 도출함으로써, 고성능, 대량생산 가능한 황화물계 전고체 전지 개발에 활용



< 그림 6 > 소재 DB 허브 (황화물계 전고체 전지용 소재 및 공정기술 개발)의 추진전략 및 최종 결과물

3. 최종 결과물

가. 소재 DB 기반의 소재-공정 조건 최적화를 통한 고성능 황화물계 전고체 전지 및 관련 기술 개발

- 소재 DB와 인공지능 및 기계학습의 조합을 통해서 최적의 소재 공정 조건을 도출하고, 이를 활용함으로써 고성능의 황화물계 전고체 전지 개발시 시행착오를 줄일 수 있음
- 가공 특성과 셀 성능이 우수한 고체전해질 조성 및 형상 도출
- 분산성, 배합성 및 전극 내 결착/계면저항 특성이 우수한 바인더 및 분산제 개발
- 제조 공정 및 전극 성능에 적합한 유변물성을 갖는 중간재 설계
- 전고체 배터리 전극 제조에 특화된 코팅 기술 확보
- 대량생산이 용이하고 수율 제어가 가능한 전고체 배터리 생산 기술

나. 소재 DB의 구축 및 활용을 위한 노하우 및 벤치마킹 사례

- 다양한 소재 DB를 기계학습과 연계하여 효과적으로 활용할 수 있게 해주는 플랫폼의 개발 (다른 소재 시스템에 활용 가능)
- 소재 DB를 구축하여 신제조 스킴 개발로 발전시킨 상징적인 벤치마킹 사례로 활용 기대

1) 인력 Pool 조사 방법

- 국내 소재분야 계산과학 및 데이터과학 PI급 전문가(재료/금속/신소재공학, 화학공학, 기계공학, 물리, 화학 등 전공자) 122명에게 이메일 발송(조사 기간: 1주일)
- 보유기술(계산과학, 데이터과학, 시뮬레이터 개발 기술) 및 관심 소재/연구 분야 조사
- 보유기술 및 관심소재/연구분야 기입 시 중복 선택/기입 가능
- 122명 중 85명 회신(응답률: 69.7%)

2) 보유 기술 분석

- 계산과학기술 중 소재 탐색 시 많이 활용되는 원자/나노 레벨의 시뮬레이션 기술(제일원리 및 분자동역학) 전문가가 가장 많음
- 제일원리계산 (60명, 71%), 분자동역학 (41명, 48%)
- 공정 설계 시 활용될 수 있는 매크로/마이크로 레벨의 시뮬레이션 기술(유한요소법, Phase field, CFD 등)은 응답자의 40%가 기술 보유
- 분자동역학 시뮬레이션의 경우 공정 설계 시에도 활용 가능하며 관련 전문가까지 포함할 경우 공정 설계 전문가 비율은 91%까지 증가

< 계산과학기술 전문가 비율 (응답자 85명 기준, 기술별 중복 응답 가능) >

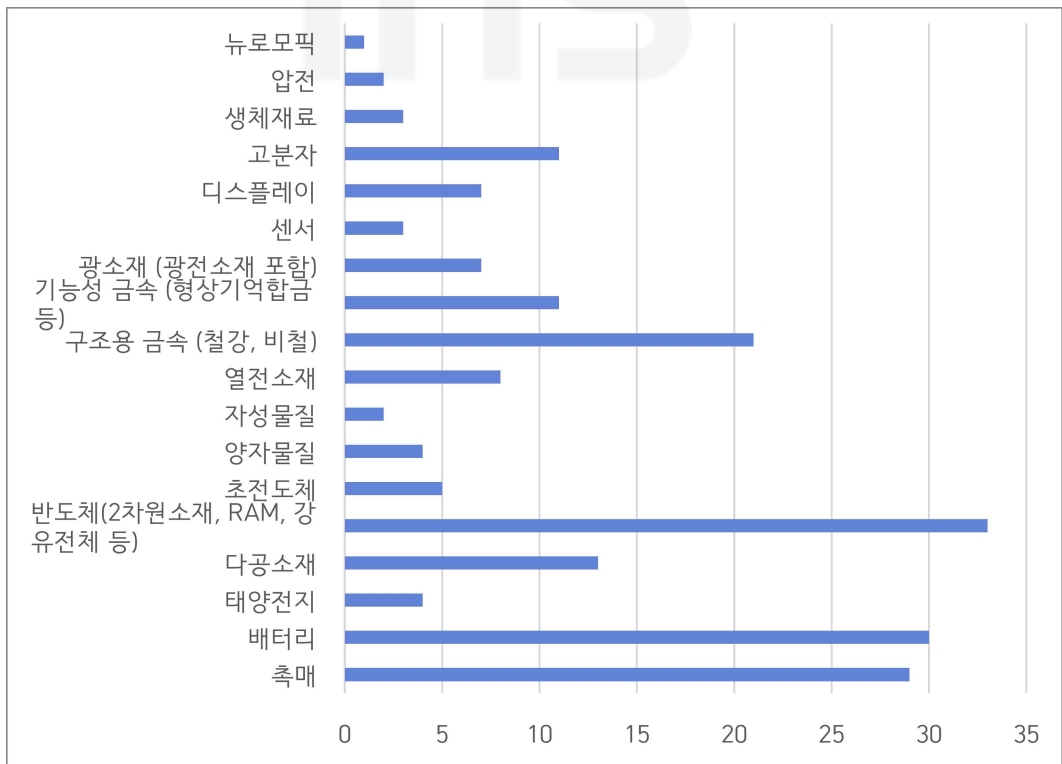
	제일 원리	분자 동역 학	몬테 카를로	Phase field	유한요소 법	CFD*	계산 열역학	기타 (장 이론, 수치해석 등)
인원 (명)	60	41	8	7	11	4	5	9
인원 (비율)	71%	48%	9%	8%	13%	5%	6%	11%

* CFD: Computational Fluid Dynamics

- 데이터과학 기술은 기계학습(62명, 73%), 딥러닝(40명, 47%), 소재정보학(11명, 13%), 데이터마이닝(10명, 12%) 순으로 전문가 분포
- 계산과학 기술 전문가는 대부분 데이터과학 기술까지 같이 보유하고 있음
- 시뮬레이터 (계산과학/데이터과학 기술 기반 소재탐색 및 공정설계용 프로그램 및 플랫폼) 개발 가능 전문가는 응답자의 51%(43명)

3) 관심 소재 및 연구 분야 분석

- 응답자의 관심 소재(군)은 반도체(2차원소재, RAM, 강유전체 등)가 가장 많고(33명, 39%), 배터리(30명, 35%), 촉매(29명, 34%), 구조용 금속(21명, 25%), 다공소재(13명, 15%) 순서로 분포(아래 그림 참고)
- 반도체 소재는 타 분야에 비해 넓은 소재 범위를 지니고 있음
- 본 분류에서 반도체 소재는 2차원소재, 메모리소재, 강유전체까지 포함하고 있어서 가장 많은 전문가 비율을 보이는 것으로 판단됨



- 관심연구분야를 ‘탐색/설계’-‘측정/분석*’-‘공정설계’로 분류하면, 탐색/설계(73명, 86%), 공정설계(33명, 39%), 측정/분석(10명, 12%) 순으로 나타남

* 측정/분석기술의 예로 AI 기반 이미지 데이터 (미세조직 등) 분석

< 시사점 >

① 국내 소재분야 데이터 기반 연구인력 규모의 적정성

- 한 팀 당 소재분야 계산과학 및 데이터과학 PI급 전문가 4인씩 컨소시움*으로 참여할 때, 전체 약 30개의 HUB 연구팀 구성 가능

* 인공지능, 탐색설계, 측정분석, 공정설계, 검증(전통적 소재연구자 참여)

- 1년에 5개의 연구팀을 5년간 지원할 경우, 매년 5개 팀씩 선정 가능

- 다만, 관심 연구 분야가 일부에 집중*되어 있음을 고려할 때, 모든 분야에 대한 middle-up-down 방식의 품목정의서 작성보다는 연구인력의 확보 가능성, 시급성, 파급효과 등이 큰 분야에 우선순위를 두고 전략적으로 품목을 발굴하는 방식이 보다 적절할 것으로 판단됨

* 반도체(39%)가 가장 많고, 배터리(35%), 촉매(34%), 구조용 금속(25%) 순으로 나타남

※ 다만 기술수요조사를 통한 매칭 및 비교분석 필요

② 데이터 기반 소재연구의 필요 기술 전문가 충족 여부

- 신규 HUB 사업 수행시 계산과학 등 탐색설계 전문가, 공정설계 전문가, 인공지능 전문가, 전통적 소재연구자(lab-scale 검증 전문가)의 참여가 필수적임

- 조사결과 소재탐색 및 공정설계용 소프트웨어 개발가능 PI급 전문가는 43명으로, 사업규모를 고려할 때 신규사업 추진에 무리가 없을 것으로 판단됨

※ 계산과학기술 중 소재 탐색 시 많이 활용되는 제일원리와 분자동역학 전문가는 각각 60명(71%), 41명(48%)으로 가장 많이 차지, 공정설계에 활용 가능한 유한요소법, Phase field, CFD 등 기술 보유 전문가는 약 40% 차지

□ 미국

운영 주체	명칭	주요 내용
로렌스 버클리 국립연구소 KRISTIN PERSSON 교수팀 주도	Materials Project ²⁵⁾	- 무기재료 약 70만여 개를 대상으로 다양한 소재 기초물성을 구축 - 주로 저장된 성질: 열역학 성질(생성에너지 등), 자기적 성질(자기 모멘트 크기 등), 전기적 성질(밴드 다이어그램, density of states (DOS) 등), 기계적 성질(체적 탄성율, 전단 탄성율 등)
노스웨스턴 대학 Chris Wolverton 교수팀 주도	OQMD Open Quantum Materials Database (OQMD) ²⁶⁾	- DFT 총에너지 계산데이터 47만여 개 구축 - 재료의 열역학적 및 구조적 특성을 밀도범함수이론 (Density Function Theory)으로 계산 - 계산된 총 에너지를 기반으로 재료의 생성에너지, 상태도와 같은 핵심적인 열역학 성질을 제공 - 무기 결정 구조 데이터베이스(ICSD)의 화합물 및 일반적으로 발생하는 결정 구조에 대한 약 30만 개의 계산 데이터 제공 - 본 DB는 합금 촉매, 리튬 이온 배터리, 고효율 나노 구조 열전소자 등 분야의 재료를 발굴하는 데 활용
NIST (표준과학기 술연구원)	Materials Data Repository ²⁷⁾	- 광범위한 재료 연구자 커뮤니티에서 데이터 공유 및 재사용을 촉진하기 위해 구축한 재료과학 데이터 저장소로, 본 DB는 실험/계산 구분 없이 모든 사용 가능한 데이터(주로 문헌자료 기반) 축적 - 데이터 제공기관, 재료의 물성/합성/공정법 등의 데이터를 종류별로 검색 가능
NIST 산하 Center for Hierarchical Materials Design	Material Data Facility(M DF) ²⁸⁾	- 소재 데이터를 등록/공유/검색할 수 있는 플랫폼 ※ 유사한 오픈 액세스 데이터 공유/등록 플랫폼으로는 Zenodo²⁹⁾, Materials Cloud³⁰⁾가 있음
미국 듀크 대학교의 Stefano Curtarolo	Automatic -FLOW for Materials	- 다양한 온라인 계산 프레임워크의 개발, 서비스 및 유지를 목표로 여러 대학 연구 컨소시엄으로 추진

운영 주체	명칭	주요 내용
연구팀 중심	Discovery(AFLOW) 31)	- 무기 화합물의 양자, 열, 구조 및 탄성 특성에 대한 데이터, 특성 분석에 사용되는 고처리량 오픈 소스 코드, 데이터 분석 도구 제공* * '23년 현재 353만개 화합물에 대한 7.3억 건 이상의 계산물성 데이터 제공
UC San Diego 연구팀	Matterverse.ai ³²⁾	- 머신러닝 알고리즘이 예측한 특성을 가진 3천만 개 이상의 아직 합성되지 않은 재료 데이터베이스 제공* * 단백질 구조 예측 AI 알고리즘 AlphaFold³³⁾(Google DeepMind)를 벤치마킹하여 UC San Diego 연구팀 개발
Center for Hierarchical Materials Design	Polymer Property Predictor and Database ³⁴⁾	- 고분자 특성을 자동으로 추출하는 정보 추출 파이프라인을 개발하여 고분자 정보학에 필요한 데이터 제공 - 자연어 처리 소프트웨어(ChemDataExtractor)를 사용하여 저널 논문에서 화학 실체의 이름과 특성을 자동으로 추출 - 산업계의 신소재 개발에 기여하는 것을 목적으로 금속 및 폴리머에 걸친 다양한 소재 설계 방법론을 시연

※ 출처 : 연구진 작성

- 이 외에도 American Mineralogist(광물구조정보), CatApp(촉매 흡착에너지, 활성화에너지), CINDAS High Performance Alloy Database(항공우주 재료의 열 안정성 및 기계적 강도), DOE Hydrogen Storage Materials Database(수소저장 물질의 저장용량), Harvard Clean Energy Project(태양전지용 유기물 소재 물성), Thermoelectrics Design Lab (열전소재 성능변수) 등이 구축되어 운영 중

※ 출처 : KISTEP(2022). 소재 신(新)연구방법론

25) <https://next-gen.materialsproject.org/>

26) <http://oqmd.org>

27) <https://www.nist.gov/programs-projects/materials-data-repository>

28) <https://materialsdatafacility.org/>

29) <https://zenodo.org/>

30) <https://www.materialscloud.org/home>

31) <https://www.aflowlib.org/>

32) <https://matterverse.ai/>

33) <https://alphafold.ebi.ac.uk/>

34) <https://pppdb.uchicago.edu/>

- 표준과학기술연구원(NIST) : MGI의 중추적 추진 기관인 표준과학기술연구원(NIST)은 재료 관련 데이터 검색, 다운로드 및 표준화 뿐만 아니라 연구자 커뮤니티에서의 데이터의 공유 및 재사용을 촉진하기 위한 각종 데이터베이스 구축 운영

데이터베이스	주요 기능
Materials Resource Registry ³⁵⁾	- 데이터 세트의 등록 및 검색뿐만 아니라 소프트웨어, 프로젝트 및 재료 과학과 관련된 조직을 등록하고 검색할 수 있도록 구축된 연합 레지스트리
NIST Materials Data Repository ³⁶⁾	- 재료 데이터 공유 및 재사용을 촉진하기 위한 범용 데이터베이스로 광범위한 큐레이션을 거치지 않은 데이터라도 다른 사람이 사용할 수 있도록 제공 ※ 공공 서비스로 제공되는 이 데이터에 대해 NIST는 책임소재가 없음을 명시화
NIST Schema Repository and Registry ³⁷⁾	- 재료 관련 스키마, 데이터 모델, 온톨로지 등의 검색, 액세스 및 재사용을 개선하기 위해 운영되는 서비스
Materials Data Curation System ³⁸⁾	- Configurable Data Curation System ³⁹⁾ 을 통해 비정형 데이터를 구조화된 형식으로 변환하여 데이터 분석에 즉시 액세스할 수 있는 잘 구조화된 형태의 데이터를 제공, 재료 데이터를 캡처 및 공유하여 XML 기반 또는 다른 형식으로 전환 가능하도록 구조화된 형식으로 변환
TRC Alloy Data ⁴⁰⁾	- 공개된 실험 열물리 및 열화학적 특성 데이터 모음
PhaseData Repository ⁴¹⁾	- 다양한 0차원, 1차원, 2차원, 3차원 계산 및 실험 데이터가 포함되어있으며 현재는 확산 데이터와 다 성분 실험 데이터에 중점
High-Throughput Experimental Materials Collaboratory ⁴²⁾	- 현재 고처리량 실험(HTE)을 할 수 없는 연구자들의 접근성을 높이고 실험 데이터 세트의 가용성을 더욱 확대하기 위해 추진

※ 출처 : 연구진 작성

35) <https://materials.registry.nist.gov/>

36) <https://materialsdata.nist.gov/>

37) <https://schemas.nist.gov/>

38) <https://mdcs.nist.gov/>

39) <https://www.nist.gov/itl/ssd/information-systems-group/configurable-data-curation-system-cdcs>

40) http://trc.nist.gov/metals_data

41) <https://phasedata.nist.gov/>

42) <https://mgi.nist.gov/htemc>

□ 유럽

국가(운영주체)	명칭	주요 내용
독일 (FIZ Karlsruhe)	Inorganic Crystal Structure Database(ICSD) ⁴³⁾	- FIZ Karlsruhe의 주도 하에 수집된 세계 최대의 무기재료 결정구조 데이터베이스로 원자 좌표를 포함하여 1913년 이후 발표된 거의 모든 알려진 무기 결정 구조의 목록 제공 - '23년 4월 기준, 281,626 개의 소재가 등록되어 있으며, 해마다 평균 12,000개 이상의 새로운 소재들과 관련 정보들이 추가되며 퀄리티 검증*을 받은 정보만이 등록 * 구조가 완전히 설명되어야 하고, 원자 좌표가 결정되었거나 알려진 구조 유형에서 파생될 수 있어야 하며, 구성이 완전히 명시되어야 데이터베이스에 포함 가능
영국 (Cambridge Crystallography Data Centre)	Crystallography Open Database(CSD) ⁴⁴⁾	- 영국 Cambridge Crystallography Data Centre의 주도 하에 1965년부터 수집된 세계 최대의 유기물 구조 데이터베이스로 작은 유기물 분자들 또는 금속-유기물 화합물에 대하여 구조 정보를 축적 - 현재 백만 개가 넘는 소재들이 등록되어 있으며, 해마다 출판 자료를 기반으로 평균 30,000개 이상의 새로운 소재들이 추가 등록
영국 (Royal Society of Chemistry)	Chem Spider ⁴⁵⁾	- Royal Society of Chemistry (RSC)의 주도 하에, 1억 개가 넘는 구조, 특성 및 관련 정보에 빠르게 액세스할 수 있는 무료 화학 구조 데이터베이스 - 수백 개의 고품질 데이터 소스의 화합물을 통합하고 연결함으로써 연구자들은 한 번의 온라인 검색으로 무료로 제공되는 화학 데이터를 가장 포괄적으로 분석 가능
스위스 (École polytechnique fédérale de Lausanne)	Materials Cloud ⁴⁶⁾	- 계산과학을 위한 리소스를 개방적이고 원활하게 공유할 수 있도록 설계된 개방형 플랫폼 제공 - 교육, 연구 및 아카이빙 도구, 시뮬레이션 소프트웨어 및 서비스, 큐레이션 및 원시 데이터를 제공하여 전산 재료 과학 분야의 리소스를 원활하게 공유하고 배포할 수 있도록 구축
EU CoE Center of Excellence	NoMAD ⁴⁷⁾	- 소재물성 데이터, 빅데이터 분석, 가시화 등 다양한 기능 - 계산연구그룹과 고성능 컴퓨팅 센터가 참여 중 * NOMAD의 서버와 스토리지는 독일 가르칭에 있는 막스 플랑크 컴퓨팅 및 데이터 시설(MPCDF)에서 호스팅

국가(운영주체)	명칭	주요 내용
독일 (막스플랑크 연구소)	BIGMax ⁴⁸⁾	- 기존에 존재했던 대규모 데이터를 혁신적으로 활용하여 소재연구의 원동력으로 만드는 것을 목표로 함 - 재료의 구조와 소성, 3D 이미지의 데이터 분석, 패턴·상호관계·인과관계 분석, 재료의 열역학적 특성 학습, 실험 샘플 및 방법에 대한 메타데이터 등 데이터 및 소재정보학 연구 수행
스위스 (National Centre of Competence in Research)	MARVEL ⁴⁹⁾	- 전산재료과학 기반 신소재 설계와 탐색의 가속화를 목표로 함 - 에너지 하베스팅, 저장, 변환을 위한 소재, ICT를 위한 소재, 유기결정/의약품을 중심으로 탐색
덴마크 (덴마크 공대)	Computational Materials Repository (CMR) ⁵⁰⁾	- 전자 구조 시뮬레이터(electronic-structure simulators)에서 생성된 데이터를 수집, 저장, 검색, 분석, 공유할 수 있는 소프트웨어 인프라 제공 - 재료 물성, 문헌값 등

※ 출처 : 연구진 작성

- AI를 활용한 소재 데이터 분석 플랫폼으로는 nanoHUB⁵¹⁾, pyIron⁵²⁾, AiiidaLab⁵³⁾, MatBench⁵⁴⁾ 등이 있음

43) <https://icsd.products.fiz-karlsruhe.de/>

44) <https://www.crystallography.net/cod/>

45) <https://www.chemspider.com/>

46) <https://www.materialscloud.org/home>

47) <https://nomad-lab.eu/nomad-lab/>

48) <https://www.bigmax.mpg.de/>

49) <https://nccr-marvel.ch/>

50) <https://cmr.fysik.dtu.dk/>

51) <https://nanohub.org/>

52) <https://pyiron.org/>

53) <https://www.aiidalab.net/>

54) <https://matbench.materialsproject.org/>

□ 일본

운영 주체	명칭	주요 내용
국립 물질재료 연구소(NIMS)	Materials Information Technology Station(MITS) ⁵⁵⁾	- '01년에 구성하여 데이터베이스 인프라를 구축하고 '03년부터 관련 서비스를 시작 - 첨단 소재의 특성 평가 및 표준화 연구 등을 위한 데이터를 생성·수집하고 관련 사용자에게 적절한 데이터를 제공
국립 물질재료 연구소(NIMS)	MatNavi ⁵⁶⁾	- 일본 최대의 오픈 데이터베이스로서 '03년부터 제공 - 고분자, 무기 화합물 등의 6개의 물성 특성화 데이터베이스를 포함하여 엔지니어링과 응용에 관련된 2개 데이터베이스, 3개의 응용 시스템, 4개의 구조 재료 데이터 시트로 구성 - 기 출판된 방대한 학술 문헌에서 추출한 수치 데이터와 NIMS내에서의 실험 데이터를 수집, 데이터베이스화하고 있기 때문에 신뢰도가 높지만, 데이터 기반의 학습을 전제로 구축되어 있지는 않기 때문에 텍스트 마이닝을 이용하여 논문의 정보를 자동으로 데이터베이스화하는 기술개발
국립 물질재료 연구소(NIMS)	DICE ⁵⁷⁾	- 재료과학 분야의 데이터 기반 신소재 연구개발 추세에 맞춰 데이터 생성·수집·사용의 서비스를 제공하는 통합 플랫폼 구축·운영 - DICE 소재 데이터 플랫폼은 데이터를 수집 및 편집하여 연구자가 사용할 수 있도록 하는 포괄적인 시스템으로 재료 데이터베이스(MatNavi) 및 재료 데이터 저장소(MDR)를 포함한 서비스를 공개적으로 제공 - 데이터 시각화 시스템과 다양한 분석 소프트웨어뿐만 아니라 소재 정보학 등 재료 개발 문제 해결의 실마리를 제공할 수 있는 시스템 과학 서비스도 제공 - 최근 실험 연구 데이터를 온라인으로 신속하게 등록할 수 있도록 자체 개발한 RDE* 시스템을 DICE에 통합 * 축적된 데이터를 사용자와 연구 그룹이 쉽게 사용할 수 있도록 기계학습에 적합한 형식으로 데이터를 자동으로 변환하여 클라우드 스토리지에 저장하는 시스템

※ 출처 : 연구진 작성

55) https://www.nims.go.jp/mits/english/massage_e.htm

56) <https://mits.nims.go.jp/>

57) <https://dice.nims.go.jp/>

□ 중국

개발 주체	명칭	주요 내용
베이징 과학기술대학교 등	National Materials Data management and Service Platform (NMDMS) 58)	- 기존의 Materials Genome Engineering Databases(MGED)을 개선한 이종의 재료과학 데이터의 공개와 공유를 위한 소재데이터 저장소로서 FAIR(Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) 원칙을 준수함 - '18년부터 국가 게놈 공학 데이터 공개 및 공유를 위해 활용되는 중이며, 중국의 “국가 핵심 연구개발 프로그램: Material Genetic Engineering Key Special Project”에서 동 플랫폼을 통해 프로젝트 데이터를 공개 및 공유하고 있음 - '22년 기준, '18년부터 총 45개 프로젝트 87개 소재군의 1,225만 건 데이터 등록, 1,912건의 사용자 정의 템플릿 개발
상하이 교통 대학의 JinJin Li 연구팀	AlphaMat 59)	- 상하이 교통 대학의 JinJin Li 연구팀에서 개발, Supervised Learning(SL), Transfer Learning, Unsupervised Learning(UL)을 동시에 보유한 최초의 재료 정보 플랫폼으로 데이터 규모의 제약없이 재료 모델링 작업 수행 가능 - 90개 이상의 기능(데이터 수집 → 데이터 전처리 → 피처 엔지니어링 → 모델 수립 → 파라미터 최적화 → 모델 평가 → 결과 분석)으로 재료 모델링의 전체 라이프사이클을 지원하는 AI 플랫폼

58) Gong, H., He, J., Zhang, X. et al. (2022). A repository for the publication and sharing of heterogeneous materials data. Sci Data 9, 787

59) Wang, Z., Chen, A., Tao, K. et al. (2023). AlphaMat: a material informatics hub connecting data, features, models and applications. npj Comput Mater 9, 130