

콜로이드 역설계를 통한 이미지 기반 데이터의 정량 분석: 실험적 Pre-AI 접근

Quantitative Structural Mapping via Colloidal Imaging: Toward Physically Interpretable Pre-AI Data

주연서 · 황혜림 | Yeonsoo Joo · Hyerim Hwang

Department of Chemical Engineering and Materials Science, Ewha Womans University,
52 Ewhayeodae-gil, Seodaemun-gu, Seoul 03760, Korea
E-mail: hyerimhwang@ewha.ac.kr

1. 서론

최근 고성능 재료의 설계를 위한 기반 정보로서 구조 이미지 기반의 정량 분석의 중요성이 점차 대두되고 있다. 특히 인공지능(AI)과 머신러닝(ML)을 활용한 재료 물성 예측 기술이 빠르게 확산되면서, 신뢰할 수 있는 학습용 데이터베이스 확보가 핵심 과제로 떠오르고 있다. 그러나 다양한 열역학적 조건에서 원자 또는 분자 수준에서 구조 정보를 실험적으로 직접 획득하는 일은 여전히 기술적 한계를 지니며, 데이터의 반복 재현성과 라벨링의 정밀도 또한 확보하기 어렵다. 이러한 배경 속에서, AI 학습 이전(pre-AI) 단계에서 정제된 고품질의 입력 데이터를 제공할 수 있는 실험 기반 플랫폼, 즉 Pre-AI 시스템에 대한 관심이 높아지고 있다.

이러한 요구에 부응할 수 있는 실험 모델로 “콜로이드 모델링(colloid modeling)”이 주목받고 있다. 콜로이드는 나노에서 마이크로미터 크기의 입자가 분산된 계(system)로, 입자의 크기, 조성, 형상, 표면 특성 및 상호작용 등을 정밀하게 제어할 수 있다. 이로 인해 실제 원자 또는 분자계의 동역학 및 구조 형성을 상온·상압 조건에서 직접적으로 모사할 수 있는 실험적 플랫폼으로 널리 활용되고 있다. 또한, 단일 입자의 운동과 배열을 입자 이동 거리 및 시간 스케일에서 실시간으로 시각화 할 수 있다는 점에서, 전산모사나 이론 모델과는 차별화된 직접 관측 기반의 실험적 접근 방식을 제공한다.¹⁻³ 최근에는 목표 구조나 물성을 정의하고, 이를 실현할 수 있도록 입자 매개변수를 조정하는 역설계(reverse engineering) 방식이 도입되면서, 복잡한 구조 형성 과정을 정밀하게 구현할 수 있는 가능성도 열리고 있다.

콜로이드 모델링의 이러한 실험적 이점은 최근 이미지 기반의 구조 정량화(image-based structural quantification)라는 새로운 방향으로 확장되고 있다. SEM, TEM이나 공초점 현미경 등으로 획득한 고해상도 영상 데이터를 기반으로, 개별 입자의 위치 정보를 정밀하게 추출한 후, 다양한 분석 기법을 적용함으로써, 입자 수준에서의 정렬, 결합, 밀도 분포, 비정질성 등을 정량적으로 평가할 수 있다. 이러한 정량 분석은 전체 구조의 결정성, 유리화 정도, 결정 결합 밀도, 국소 밀도 변화 등과 같은 구조-물성 상관성을 이해하는 데 활용될 수 있으며, 이는 AI 학습 변수로 직접 사용 가능한 고신뢰 구조 데이터로 전환될 수 있다.

Author



주연서

2020

이화여자대학교 화공신소재공학과 (학사)

2023-현재 이화여자대학교 화공신소재공학과 (석사)



황혜림

2009

고려대학교 화공생명공학과 (학사)

2011 KAIST 생명화학공학과 (석사)

2016 Harvard University Applied

Physics (박사)

2017-2020 한국표준과학연구원 (Post-Doc.)

2022-현재 이화여자대학교 화공신소재공학과

조교수

이러한 콜로이드 모델링 기반의 이미지 분석은 단순한 시각화나 현상 기술을 넘어서, 정확하고 해석 가능한 학습 입력 데이터를 생성할 수 있는 실험적 수단으로 주목된다. 기존 전산모사 기반 데이터가 주로 이상화된 조건에서의 수치 정보에 국한되는 반면, 콜로이드 기반의 실험 시스템은 실제 구현 가능한 구조로부터 정량 지표를 추출할 수 있어, 실용성과 신뢰도를 동시에 확보할 수 있는 장점이 있다.

본 총설에서는 콜로이드 모델링 기반의 이미지 정량 분석 플랫폼을 중심으로, 구조-물성 상관성의 정량화 및 정제된 학습 데이터 구축 전략을 고찰한다. 특히 콜로이드 역설계를 통해 다양한 구조적 상태를 실험적으로 구현하고, 이를 기반으로 정량적 구조 분석을 수행하는 일련의 과정을 예시와 함께 제시하고자 한다. 나아가 이와 같은 플랫폼이 재료 시스템의 구조 분석, 물성 예측, 그리고 AI 기반 재료 설계로의 확장 가능성에 대해 논의할 것이다. 본 총설은 실험 기반 Pre-AI 분석 전략이 데이터 중심 재료 과학의 정밀성과 예측력을 향상시키는 데 중요한 기여를 할 수 있음을 제시하고자 한다.

2. 본론

2.1 콜로이드 구조 형성과 입자 수준 정량 분석: 공초점 이미징 기반 접근

콜로이드는 입자 간 상호작용을 정밀하게 설계할 수 있어, 단순한 결정 구조로부터 고도로 비정질화된 구조까지 다양한 배열 상태를 구현할 수 있는 실험적 모델 시스템이다. 예를 들어, 입자 간의 접촉 시 반발력을 기반으로 한 하드 스피어

(hard-sphere) 상호작용, 고분자 유도 섭동력(depletion interaction), 전기적·자기적 인력 또는 반발력, 패치성 입자 간 방향성 결합, DNA 혼성화를 통한 특이적 결합 등은 각각 고유한 상호작용 포텐셜 $U(r)$ 을 가지며, 이에 따라 정렬된 결정, 격자 왜곡 구조, 무질서 구조까지 폭넓은 구조적 다양성을 구현할 수 있다(그림 1a).⁵⁻⁹ 이러한 구조적 특이성은 실제 재료의 결정화도, 기계적 거동, 열역학적 안정성과 밀접히 연결되어 있기 때문에, 이를 실험적으로 구현하고 관측할 수 있는 플랫폼으로서의 콜로이드 모델의 가치가 더욱 커진다.

콜로이드 시스템의 중요한 강점은, 형성된 구조를 입자 단위에서 직접 관찰하고 정량화 할 수 있다는 점이다. 그림 1b는 고해상도 공초점 레이저 주사 현미경(confocal laser scanning microscopy, CLSM)으로 관찰한 형광 라벨링된 콜로이드 입자 이미지이며, 입자의 3차원 이미지를 통해 시간에 따른 정확한 위치 정보를 획득할 수 있으며, 이를 통해 구조 분석에 필요한 정제된 좌표 데이터가 생성된다.

영상은 전 처리 과정을 거쳐 각 입자의 중심 좌표를 sub-pixel 수준의 정확도로 추출할 수 있으며, 이러한 데이터는 Voronoi 테셀레이션, 최근접 이웃 입자와의 각도 분석 등 다양한 구조 분석 기법에 적용 가능하다. 이처럼 고정밀 좌표 기반 분석은 단순한 시각화를 넘어, 국소 환경의 기하학적 특성 평가를 기반으로 구조-물성의 상관성 해석으로 확장될 수 있다.

예를 들어, 그림 1b 하단의 결정구조와 비정질 구조는 입자 배열 방식, 각도 분포, 장거리 질서의 존재 유무, 밀도 균일성 등에서 명확한 차이를 보인다. 이러한 구조적 차이는 고해상도 이미지를 기반으로 추출된 입자 좌표를 활용하여

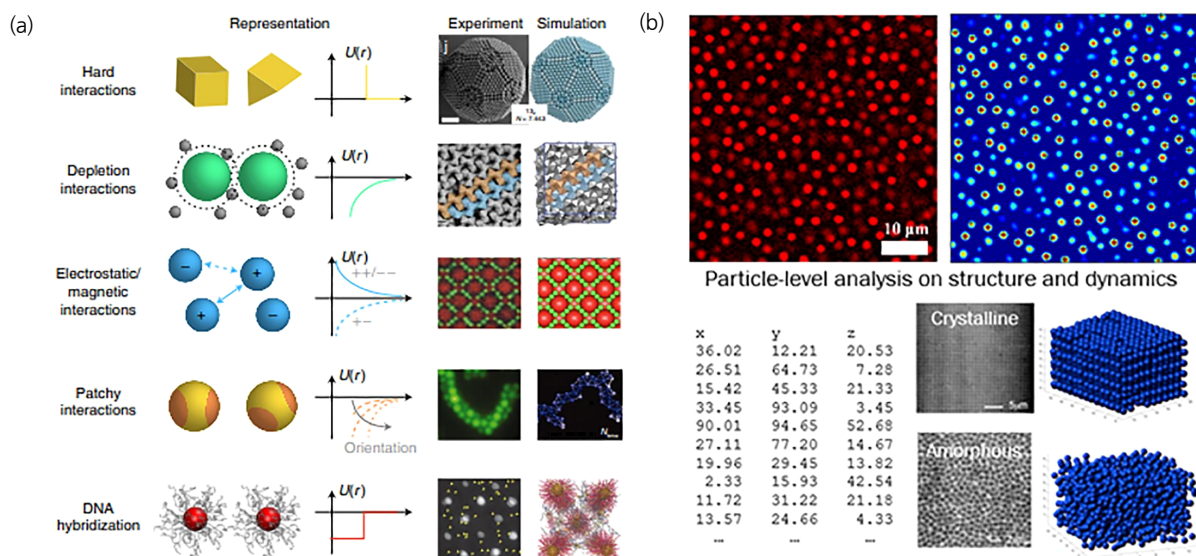


그림 1. 콜로이드 입자의 상호작용 종류에 따른 구조 형성 다양성과 입자 수준에서의 정량 분석 예시. (a) 콜로이드 입자 간 상호작용에 따라 형성되는 다양한 구조(실험 및 시뮬레이션).⁴ (b) 형광 콜로이드 입자의 공초점 이미지 및 입자 식별, 위치 추출. 입자 좌표 기반으로 얻어진 결정 구조와 비정질 구조.

정량적으로 분석할 수 있으며, 시스템에 맞는 지표로 수치가 가능하다. 입자 수준에서 정밀하게 획득된 데이터는 AI 기반 모델의 예측 성능을 향상시키고, 원하는 물성을 유도하는 구조 설계 조건을 역설계하는 데에도 높은 신뢰도로 기여할 수 있다.

2.2 콜로이드 결정화 과정과 구조 분석 지표의 정의

콜로이드의 결정화는 콜로이드 시스템으로 이용한 연구 중 가장 활발히 탐구되어 온 주제 중 하나이며, 고전적인 상전이 이론을 실험적으로 검증하거나, 결정 형성 과정의 미세한 동역학을 시각화 할 수 있는 대표적인 모델 시스템으로 널리 활용되어 왔다. 입자 크기, 상호작용 포텐셜, 외부 장, 농도 조건 등의 제어를 통해 결정화 과정 전체를 정밀하게 조절할 수 있으며, 형성되는 구조를 입자 수준에서 직접 관찰할 수 있다는 점에서 고체 재료의 결정화와 비교되는 독보적인 실험적 장점을 제공한다.¹⁰⁻¹²

기존의 콜로이드 결정화 연구는 일반적으로 특정 결정상(HCP, FCC)의 형성과 안정성에 초점을 두었으나, 실제 결정화 과정에서는 다양한 결정화 경로가 존재하며, 그에 따라 서로 다른 구조적 ordering이 동시에 또는 순차적으로 나타날 수 있다. 동일한 입자 시스템이라도 결정화 경로에 따라 국소 구조가 달라지고, 이로 인해 결정 내 결합, 입계(grain boundary), 중간 안정상(metastable phase) 등의 형성 양상도 달라지게 된다. 이러한 경로 의존적 결정화 행동을 이해하기 위해서는 전체 구조의 평균적 특징보다는, 국소 영역에서의 ordering의 출현과 진화를 시간적으로 추적하는 분석 기법이 필수적이다.

본 연구에서는 결정화가 진행되는 동안 개별 입자의 구조적 환경을 정량적으로 추적하기 위한 지표의 예로서, local number density 및 bond orientation parameter를 도입하였다. 각 입자 중심으로부터 일정 반경 내에 위치한 인접 입자 수를 기반으로 정의되며, 밀도 증가에 따라 결정화가 국소적으로 시작되는 위치와 그 전과 양상을 실시간으로 시각화 할 수 있다. 그림 2의 연구에서는 액적 내에서 수분의 증발 속도를 조절함으로써 동일한 입자 조성에서도 서로 다른 결정화 경로가 유도되도록 설계하였다.

수분이 빠르게 증발할 경우, 입자들은 충분한 시간동안 에너지적으로 안정된 배열을 형성하지 못하는 반면, 증발이 느리게 진행되면 입자 간 상호작용이 보다 잘 반영되며 결정화 이전 단계에서 icosahedral과 같은 국부적으로 에너지적으로 선호되는 구조가 나타나는 경향이 뚜렷하게 관찰되었다. 형성된 구조의 차이는 단순히 입자 농도의 함수로 설명되기 어려우며, 국소 대칭성과 공간적 밀도 변동성, 시간에 따른 동역학적 변화 등 복합적인 요인이 구조 발현에 영향을 주는 것으로 해석이 된다.

입자 배열의 시간적 변화를 반영할 수 있는 입자 기반의

구조 분석 지표를 도입함으로써, 단순한 결정성 여부를 넘어 결정화 경로상의 미세한 차이를 추적할 수 있으며, 이러한 분석 접근은 향후 시간 기반의 구조 데이터를 이용한 AI 학습용 데이터베이스 구축, 혹은 결정화 경로 예측 모델 개발에 있어 중요한 기반 정보를 제공할 수 있다.

2.3 이성분계 콜로이드 합금에서의 비정질 정도 정량화

재료의 미세구조는 그 기계적 물성을 결정짓는 핵심

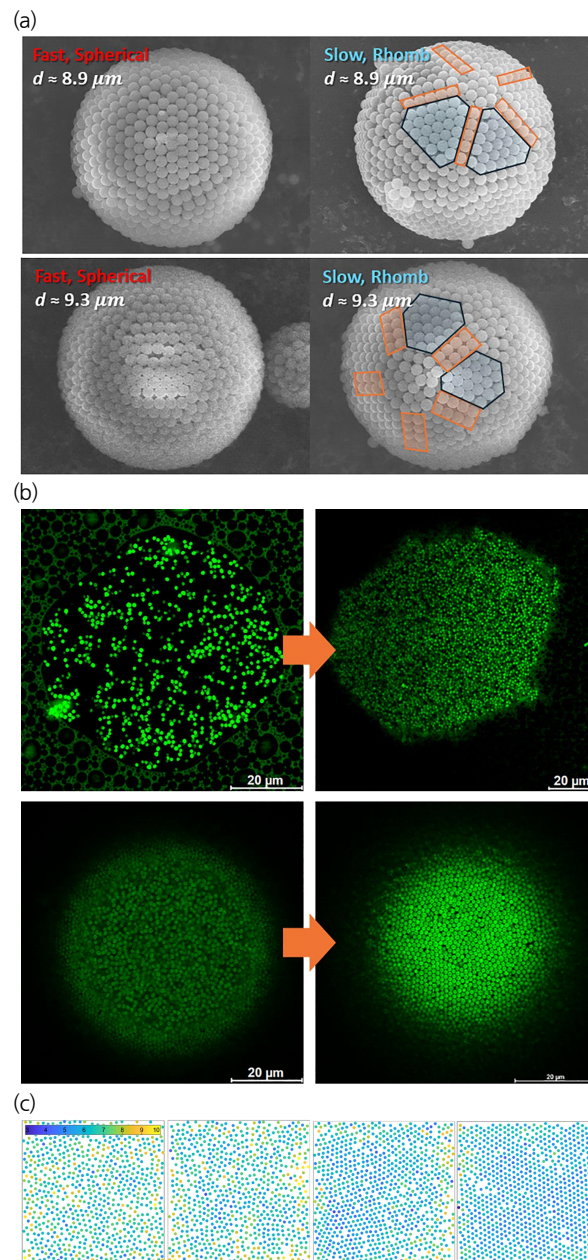


그림 2. 콜로이드의 농도 증가 속도에 따른 결정화 경로의 차이와 입자 수준 구조 분석 결과. (a) 결정화 경로에 따라 형성되는 구조의 기하학적 대칭성 차이. (b) 형광 공초점 이미징을 통한 구조 형성 과정의 시각화. (c) 이미지 기반 입자 좌표 추출을 통해 계산된 local order parameter 분석 결과.

요소이며, 특히 비정질의 정도는 파괴 강도, 연성, 탄성 등 다양한 기계적 물성에 직접적인 영향을 미친다. 고도로 무질서한 구조는 슬립면 형성이나 전단 변형의 국소화를 억제함으로써, 결정질 구조에서는 관찰되지 않는 독특한 기계적 거동을 유도할 수 있기 때문이다. 따라서 비정질화 경향을 입자 수준에서 정량적으로 평가하고 이를 물성과 연계하는 분석은, 데이터 기반 비정질 재료 설계와 AI 학습을 위한 입력 변수와 확보 관점에서도 핵심적인 전제 조건이라고 할 수 있다.

이러한 구조-물성 상관성을 실험적으로 규명하기 위한 효과적인 플랫폼으로, 이성분계 콜로이드 합금(binary colloidal alloy) 시스템을 구현할 수 있다. 크기가 상이한 두 종류의 입자를 조합함으로써, 원자 합금에서와 유사한 조성-구조 상관성을 구현할 수 있으며, 특히 금속에서 관찰되는 기하학적 붕괴(geometric frustration)나 결정화 억제 현상을 상온·상압 조건에서 직접 구현할 수 있다는 점에서 실험적 활용도가 높다.^{13,14}

최근 보고된 연구에서는, 구리-지르코늄(Cu-Zr) 금속 유리의 원자 반지름 비(1.43:1)를 모사한 이성분 polystyrene 콜로이드 입자계를 활용하여, 다양한 조성 조건에서의 구조적 비정질성을 고해상도 SEM 영상 기반으로 분석하였다. 실험 결과, 큰 입자(Cu 유사 입자)에 대해 작은 입자(Zr 유사 입자)의 조성비가 약 21.5–66.7 at.% 범위일 때 결정화가 억제되며, 무질서한 구조가 안정하게 형성되었고, 이는 실제 금속 유리계에서의 GFA 최적 조성 범위 와도 정량적으로 일치하였다(그림 3a).

비정질 구조가 형성되는 조성 범위 내에서도, 모든 조성이 동일한 수준의 구조적 무질서도를 갖는 것은 아니며, 그 내부에서도 비정질의 정도는 조성에 따라 연속적으로 변화하는 양상을 보인다. 이는 ‘비정질’이라는 하나의 상태 범주 안에서도, 국소 대칭성, 장거리 질서 등의 구조적 특징들이 조성에 따라 체계적으로 달라진다는 점을 시사한다. 이러한 차이를 식별하기 위해, 정밀한 이미지 기반 분석을 통해 조성에 따른 비정질 구조의 세부 특성 차이를 정량적으로 비교할 수 있다.

본 총설에서는 비정질 구조를 정량적으로 평가하기 위해, 세 가지 상호보완적 분석 지표를 활용하였다. Pair correlation function, $g(r)$ 분석을 통해 장거리 및 단거리 질서의 유무를 평가한 결과, 결정성 조성에서는 뚜렷한 다차 피크가 관찰되었으나, 비정질 조성에서는 빠른 수렴과 낮은 진폭이 나타나 무질서한 배열을 시사하였다. Voronoi 테셀레이션 기반의 다각형 분포 분석에서는 비정질 조성에서 오각형과 칠각형 셀이 증가하고 육각형의 정렬성이 저하되어 국소 대칭의 붕괴를 확인할 수 있다. Isoperimetric quotient(IQ) 분석은 육각형 셀 형태의 왜곡 정도를 수치화하며, 이상적

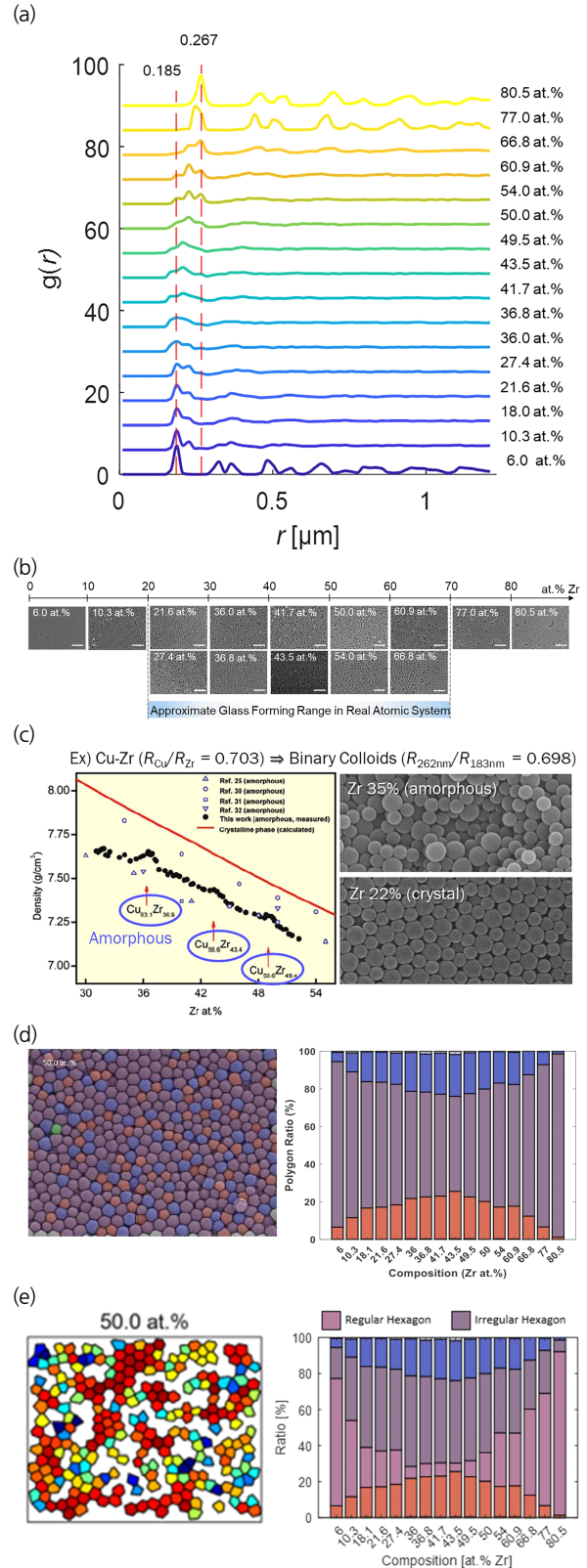


그림 3. 이성분계 콜로이드 합금 시스템에서 조성 변화에 따른 비정질 정도 정량 분석 (a) 원자계 Cu-Zr 합금과 콜로이드 합금에서의 조성-비정질 상관성. (b) 조성비에 따른 합금 구조 형성. (c) Pair correlation function, $g(r)$. (d) 50 at.% 조성에서의 비정질 SEM 이미지 voronoi 분석을 통한 (d) isoperimetric quotient(IQ) 및 (e) 다각형 분포.

육각형으로부터 크게 벗어난 셀의 비율이 비정질 조성에서 현저히 증가함을 확인하였다. 이들 분석은 서로 보완적으로 작용하며, 조성에 따른 비정질 구조의 차이를 정량적으로 구분하는 데 기여한다.

이성분계 콜로이드 합금 시스템의 정교한 조성비 조절을 통해 결정-비정질 전이를 실험적으로 정밀 구현할 수 있는 효과적인 플랫폼을 제시할 수 있으며, 형성된 구조 상태는 고해상도 이미지 기반 지표들 통해 체계적으로 정량화할 수 있다. 2차원 이미지에 적용 가능한 $g(r)$, polygon distribution, IQ와 같은 분석 지표는 Pre-AI 단계에서 활용 가능한 물리 기반 학습 입력 변수로 전환 가능하며, 이는 향후 비정질 데이터 기반 설계의 핵심 요소로 기능할 수 있다.

3. 결론

AI 기반 재료 설계가 빠르게 확산되고 있는 현재, 그 성능과 신뢰도는 학습에 사용되는 데이터베이스에 근본적으로 의존한다. 그러나 실제 재료 시스템에서의 데이터를 정제된 형태로 확보하는 데는 실험적, 해석적 한계가 따르며, 특히 원자 콜로이드는 원자·분자 수준에서의 반복 가능하고 해석 가능한 정량적 데이터베이스 확보는 여전히 어려운 과제이다. 이러한 맥락에서, 콜로이드는 원자·분자 수준의 구조 형성을 거시적으로 모사할 수 있는 실험 플랫폼으로서, 입자 크기·형상·상호작용의 정밀 제어와 단일 입자 수준의 시각화가 가능한 독보적인 장점을 지닌다. 본 총설에서는 이러한 콜로이드 모델링의 특성을 기반으로, 구조 이미지로부터 정량적 구조 지표를 도출하고 이를 Pre-AI 플랫폼으로 확장하는 연구 방향을 정리하였다.

공초점 이미징 기반의 입자 좌표 추출을 통해, 입자 배열의 구조적 질서, 국소 대칭성, 밀도 분포 등을 실시간으로 분석할 수 있으며, 이는 결정화 경로의 추적뿐만 아니라 비정질 구조의 정량화에도 효과적으로 활용된다. 특히 local number density, pair correlation function, polygon distribution, IQ와 같은 물리 기반 지표들은 입자 수준의 구조를 정량적으로 서술할 수 있으며, 기계적 물성이나 광학 응답과 같은 거시적 특성과의 연계 분석을 가능케 한다.

이와 같은 분석 과정은 단순한 실험적 해석을 넘어, 인공지능 기반 재료 설계를 위한 학습 입력 데이터셋의 정제 도구로 기능할 수 있다. 특히 AI 학습 이전 단계에서 물리적으로 해석 가능한 고정밀 데이터를 구축할 수 있다는 점에서, 콜로이드 기반 Pre-AI 접근은 데이터 중심 재료과학의 예측력과 해석력을 동시에 강화할 수 있는 전략으로 주목된다.

향후에는 콜로이드 모델링 기반의 이미지 정량 분석이 광범위한 소재로 확장되어, 복잡계 재료 설계에 있어 구조-물성의 연결 고리를 더욱 명확히 규명하는 핵심 수단으로 자리매김할 수 있을 것이다.

참고문헌

1. P. N. Pusey and W. Van Megen, *Nature*, **320**, 340 (1986).
2. E. R. Weeks, J. C. Crocker, A. C. Levitt, A. Schofield, and D. A. Weitz, *Science*, **287**, 627 (2000).
3. V. J. Anderson and H. N. W. Lekkerkerker, *Nature*, **416**, 811 (2002).
4. M. Dijkstra and E. Luijten, *Nat. Mater.*, **20**, 762 (2021).
5. M. Girard, S. Wang, J. S. Du, A. Das, Z. Huang, V. P. Dravid, B. Lee, C. A. Mirkin, and M. O. de la Cruz, *Science*, **364**, 1174 (2019).
6. A. P. Hynninen, C. G. Christova, R. Van Roij, A. Van Blaaderen, and M. Dijkstra, *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 138308 (2006).
7. J. Wang, C. F. Mbah, T. Przybilla, B. Apele Zubiri, E. Spiecker, M. Engel, and N. Vogel, *Nat. Commun.*, **9**, 5259 (2018).
8. J. Henzie, M. Grünwald, A. Widmer-Cooper, P. L. Geissler, and P. Yang, *Nat. Mater.*, **11**, 131 (2012).
9. Q. Chen, J. K. Whitmer, S. Jiang, S. C. Bae, E. Luijten, and S. Granick, *Science*, **331**, 199 (2011).
10. H. Hwang, D. A. Weitz, and F. Spaepen, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **116**, 1180 (2019).
11. U. Gasser, E. R. Weeks, A. Schofield, P. N. Pusey, and D. A. Weitz, *Science*, **292**, 258 (2001).
12. P. Bagheri, A. M. Almudallal, A. Yethiraj, and K. M. Poduska, *Langmuir*, **31**, 8251 (2015).
13. J. S. Langer, *Rep. Prog. Phys.*, **77**, 042501 (2014).
14. G. Wei, J. Cui, W. Wang, X. Guo, J. Ren, and W. Wang, *Phys. Rev. Mater.*, **6**, 055601 (2022).