

부문위원회 특별기고

CAMA(콜로이드 및 분자조립) 부문위원회

1. 서론

콜로이드 과학과 분자조립은 고분자과학, 연성물질, 나노소재, 계면과학, 구조소재 및 기능성 소재 연구를 폭넓게 연결하는 학문 분야이다. 이 분야는 분자와 입자 수준의 상호작용을 조절하여 더 큰 길이수준의 구조와 물성을 구현한다는 점에서, 새로운 고분자 기반 소재를 설계하는 데 중요한 기반이 되고 있다. 콜로이드 입자는 대략 1 nm에서 수 μm 에 이르는 메조스케일에 위치하며, 원자·분자 수준의 양자 효과와 거시적 연속체 거동 사이를 연결하는 독특한 물리화학적 특성을 보인다. 한편 분자 조립은 수소결합, 소수성 상호작용, π - π 스택킹, 호스트-게스트 상호작용 등 다양한 비공유결합성 상호작용을 설계 변수로 활용하여 기능성 구조체를 아래에서 위로, 즉 bottom-up 방식으로 구현하는 접근법이다.

한국고분자학회 CAMA, 즉 콜로이드 및 분자조립 부문위원회는 이 두 분야가 만나는 학문적 접점을 중심으로 활동해 왔다. 국내 연구자들의 역량이 꾸준히 성장하는 과정에서 CAMA 부문위원회는 관련 연구자들이 교류하고, 새로운 연구 주제를 논의하며, 국제적 연구 흐름과 국내 연구 기반을 연결하는 역할을 담당해 왔다. 한국고분자학회 창립 50주년을 맞아, 현재 콜로이드 및 분자조립 분야에서 세계적으로 주목받고 있는 주요 연구 이슈를 살펴보고, 앞으로의 연구 방향과 발전 가능성을 전망해 보고자 한다.

2. 현재 핵심 연구 이슈

2.1 능동형 콜로이드 조립체(Active Colloidal Assembly)

고전적인 콜로이드 자기조립이 주로 열역학적 평형을 향해 진행되는 수동적 과정으로 이해되어 왔다면, 능동형 콜로이드 조립체는 외부 에너지를 지속적으로 소비하면서 비평형 상태를 유지하는 동적 구조체로 볼 수 있다. 빛, 전기장, 화학반응 등 외부 자극에 의해 자기 추진(self-propulsion)하는 능동 입자들이 집합적으로 플로킹(flocking), 스워밍(swarming)과 같은 거동을 나타낸다는 사실은 최근 수년 동안 큰 관심을 받아왔다.

특히 2024년 이후에는 화학반응과 전기 분극을 결합하여 실시간으로 재구성될 수 있는 콜로이드 조립체가 보고되면서, 스마트 소재 설계의 가능성을 한층 넓혀 주었다. 또한 광제어 기반의 비상호적(nonreciprocal) 상호작용을 활용한 능동 분자 구조체 연구도 주목받고 있으며, 살아 있는 물질(living matter)의 동적 특성을 모사하는 생물 영감형 시스템 구현이 중요한 연구 과제로 부상하고 있다. 이 분야는 소프트 로보틱스, 세포 모사 시스템, 자율 응답 소재와 밀접하게 연결되어 있어, 기초 과학적 의미뿐 아니라 응용 가능성도 매우 크다.

2.2 DNA-프로그래머블 나노입자 조립(DNA-Programmable Assembly)

DNA는 염기쌍 형성의 높은 특이성, 가역성, 서열 프로그램 가능성을 동시에 갖고 있다. 이러한 특성 때문에 DNA를 콜로이드 입자 표면에 도입하면, 일종의 '분자 언어'를 이용해 입자들의 조립 구조를 설계할 수 있다. DNA-코팅 나노입자는 특정 결정 구조, 유한 크기 클러스터, 복잡한 다성분 초격자(superlattice)를 높은 수율과 선택성으로 구현할 수 있어, 이미 오랜 연구 역사를 갖고 있음에도 여전히 빠르게 발전하고 있는 분야이다.

최근에는 DNA 오리가미(origami)와 콜로이드 입자를 결합하여 자기제한(self-limiting) 유한 구조체를 설계하는 연구가 활발히 진행되고 있다. 또한 지질 이중막 위에서 이동성 DNA 링커가 입자의 원자가(valence)를 조절하는 시스템, 표면 활성화를 통해 결정 성장의 두께를 제어하는 접근법 등도 새로운 연구 이슈로 떠오르고 있다. 이러한 연구들은 바이러스 캡시드나 리보솜과 같이 자연계가 구현하는 정밀 나노기계를 인공적으로 모사하는 데 중요한 설계 원리를 제공하고 있다.

2.3 초분자 고분자의 자기조립 및 기능화(Supramolecular Polymer Assembly)

초분자 고분자는 저분자량 빌딩 블록들이 비공유결합 상호작용을 통해 거대분자적 구조로 자기조립되면서 형성되는 시스템이다. 이러한 구조는 자극 응답성, 자기 치유성, 분해 가능성, 동적 재구성 능력 등을 함께 가질 수 있다는 점에서 기존 공유결합성 고분자와 구별되는 장점을 갖는다. 수소결합, 금속-리간드 배위, 호스트-게스트 복합체, 예를 들어 β -사이클로덱스트린/페로세닐 계열 상호작용, π - π 스택킹에 기반한 다양한 초분자 고분자 아키텍처는 약물 전달, 진단, 조직공학 등 여러 분야에서 활발히 연구되고 있다.

특히 수용액계 초분자 고분자의 열역학 및 동역학 제어는 현재 중요한 연구 주제이다. 핵형성-성장 협동 메커니즘을 통해 구조가 어떻게 만들어지고 성장하는지, 그리고 pH, 온도, 빛, 산화환원, 효소와 같은 생리적 자극에 대해 조립체가 어떻게 반응하는지를 분자 수준에서 규명하려는 연구가 이어지고 있다. 이를 위해 실험적 분석과 복잡계 동역학 시뮬레이션을 결합한 다중 스케일 접근법도 점차 중요해지고 있다.

2.4 계층적·비평형 자기조립과 조립 경로 제어(Hierarchical & Pathway-Controlled Assembly)

자연계의 정교한 나노구조, 예를 들어 콜라겐 섬유, 세포골격, 리포솜 등은 단순히 열역학적 평형에 도달하는 과정만으로 설명되기 어렵다. 이들 구조는 특정한 조립 경로(pathway)를 거쳐야만 형성되는 경우가 많다. 이러한 자연계의 원리를 모사하는 경로 의존적 자기조립 연구는, 동역학적으로 제한된 구조, 즉 kinetically trapped structure를 제어함으로써 동일한 성분으로도 서로 다른 기능성 나노구조를 선택적으로 만들 수 있도록 한다.

예를 들어 펩타이드 양친매성 분자(peptide amphiphile)의 구형 마이셀에서 β -시트 폴리머로의 전환, 스티프-스틸벤 비스-우레아 양친매성체의 엔탈피 구동 핵형성-신장 메커니즘, 블록 공중합체의 directed self-assembly(DSA)를 이용한 sub-10 nm 나노리소그래피 패터닝 등이 이 분야의 대표적인 최첨단 연구 사례로 꼽힌다. 조립 경로를 정밀하게 제어하는 기술은 광자결정, 플라즈모닉 소자, 반도체 나노패터닝 등 차세대 제조공정과도 직접적으로 연결된다.

2.5 AI·머신러닝 기반 역설계(AI/ML-Guided Inverse Design)

콜로이드 및 분자조립 분야는 실험 공간과 설계 파라미터가 매우 넓다. 입자의 크기, 형태, 표면화학, 조성, 농도, 용매, 온도, 이온강도, 조립 시간 등 수많은 변수가 서로 얽혀 있기 때문에, 기존의 시행착오적 접근만으로는 전체 설계공간을 충분히 탐색하기 어렵다. 이러한 상황에서 머신러닝과 분자동역학 시뮬레이션의 결합은 구조-특성 관계를 보다 효율적으로 이해하고, 원하는 물성을 갖는 구조를 역설계할 수 있는 가능성을 제공한다.

최근에는 블록 공중합체 나노패턴 예측을 위한 SEM 이미지 데이터베이스 구축과 딥러닝 모델, DNA-기능화 나노입자의 조립 구조 예측을 위한 SHAP 기반 해석 가능 머신러닝, 광자결정 구조 최적화를 위한 AI 활용 등이 중요한 연구 사례로 부각되고 있다. 이러한 역설계 접근법은 “원하는 기능 $\rightarrow$ 최적 구조 $\rightarrow$ 필요한 빌딩 블록”으로 이어지는 소재 설계의 논리적 흐름을 가능하게 하며, 기존의 합성 및 조립 최적화 과정을 크게 단축시킬 수 있을 것으로 기대된다. 특히 다성분 공조립, 비평형 동역학 경로, 결합 제어처럼 이론적으로도 복잡한 문제에서 AI 보조 설계의 실효성이 점차 확인되고 있다.

3. 향후 전망 및 발전 방향

3.1 바이오·의료 분야와의 융합

초분자 조립체와 콜로이드 나노시스템의 의생명과학 분야 적용은 앞으로 가장 빠른 성장이 예상되는 영역 중 하나이다. 자극 응답형 약물 방출 시스템, pH, GSH, 효소와 같은 생체 신호에 반응하는 지능형 나노캐리어, 세포외기질(ECM)을 모사한 주입형 조립체 등은 암, 대사질환, 신경질환 치료에서 아직 충분히 해결되지 않은 의학적 요구, 즉 unmet medical need를 해결할 수 있는 플랫폼으로 발전할 가능성이 있다. 특히 펩타이드 및 단백질 기반 자기조립 나노구조의 in vivo 안정성과 면역원성 제어는 임상 진입을 위해 반드시 넘어야 할 핵심 허들로서 앞으로 더욱 집중적으로 연구될 전망이다.

3.2 에너지·환경 소재

콜로이드 초격자와 광자결정은 태양전지의 광포획층, 발광 디스플레이, 광촉매 소재 등으로의 응용 가능성이 확대되고 있다. 수계 초분자 고분자 기반 고체 전해질, 콜로이드 조립 기반 다공성 분리막, 오염물 포집을 위한 기능성 계면 시스템 등은 에너지 전환과 환경 분야에서 새로운 소재로 활용될 것으로 기대된다. 또한, 탄소중립이 중요한 시대적 과제로 자리 잡으면서, 생분해

가능한 초분자 소재와 순환 가능한 조립 소재의 설계는 앞으로 더욱 큰 관심을 받을 것으로 예상된다.

3.3 물리 AI 및 소프트 로보틱스

능동형 콜로이드 조립체와 자극 응답성 초분자 시스템은 물리 AI(Physical AI)의 소재적 기반으로도 주목받고 있다. 외부 자극을 감지하고, 그에 따라 형태나 기능을 자율적으로 바꾸는 소프트 액추에이터, 자기 복구가 가능한 구조색 소재, 형태 기억성을 갖는 콜로이드 조립체 등은 차세대 소프트 로보틱스, 웨어러블 디바이스, 이식형 디바이스의 핵심 소재로 발전할 가능성이 높다. 이러한 시스템은 단순히 외부 명령에 반응하는 소재를 넘어, 물리적 구조 자체가 감지, 판단, 반응 기능의 일부를 담당하는 방향으로 확장이 가능하다.

3.4 비평형 열역학의 정량적 이해

콜로이드 및 분자조립 연구에서 오랫동안 남아 있던 난제 중 하나는 비평형 조립 과정을 정량적으로 기술하는 일이었다. 단일 입자 추적, 초고해상도 현미경, 초고속 X선 산란(SAXS/WAXS), 분자 시뮬레이션을 보다 긴밀하게 결합한다면, 조립 경로의 에너지 지형(energy landscape)과 핵형성 장벽을 원자 또는 분자 수준에서 규명하는 연구가 더욱 심화될 것이다. 이러한 이해는 단순히 인공 소재의 조립을 설명하는 데 그치지 않고, 단백질 폴딩, 세포분열, 바이러스 조립과 같은 생명체의 동적 자기조립 과정을 이해하고 모사하는 데에도 중요한 토대를 제공할 것으로 기대된다.

3.5 다중 스케일 설계 플랫폼 구축

향후 10년 동안 중요한 과제 중 하나는 분자 수준의 비공유결합 설계에서 출발하여, 콜로이드 수준의 상호작용 공학, 그리고 거시적 소재 기능으로 이어지는 다중 스케일 설계 플랫폼을 구축하는 것이다. 이를 위해서는 coarse-grained 모델, phase-field 이론, 머신러닝 포텐셜을 계층적으로 연결하는 전산 방법론이 필요하다. 동시에 이러한 계산 결과를 실험적으로 검증할 수 있는 고처리량 합성 및 분석 기술도 함께 발전해야 한다. 결국 콜로이드 및 분자조립 분야의 경쟁력은 분자 설계, 조립 경로 예측, 구조 분석, 기능 평가를 하나의 흐름으로 연결할 수 있는지에 달려 있다.

4. 결론

콜로이드 과학과 분자조립은 한국고분자학회의 중요한 연구 축 가운데 하나로 자리 잡아 왔으며, 그 학문적 저변과 응용 범위는 계속 넓어지고 있다. 능동형 콜로이드, DNA 프로그래머블 조립, 초분자 고분자, 비평형 경로 제어, AI 기반 역설계 등의 핵심 주제는 향후 콜로이드 및 분자조립 분야를 이끌 핵심 연구 방향이 될 것이다. 이러한 상황에서 CAMA 부문위는 국내외 연구자 교류를 촉진하고, 국제 학술 심포지엄을 유치하며, 차세대 연구자를 육성함으로써 콜로이드 및 분자조립 연구의 국내외 구심점 역할을 하고자 한다.

한국고분자학회 콜로이드 및 분자조립 부문위원회