

부문위원회 특별기고

계산과학과 인공지능이 여는 고분자과학의 다음 50년

1. 서론

한국고분자화학회가 창립 50주년을 맞은 2026년, 학회 내에서 오랫동안 축적되어 온 이론·계산 고분자 연구의 흐름은 인공지능·계산과학(Computation & AI, CAI) 부문위원회의 출범으로 이어졌다. 이는 단순히 새 계산 기법을 학회에 더한 사건이 아니라, 고분자 연구가 질문을 세우고 답을 검증하는 방식이 변하고 있음을 보여준다. 이론·시뮬레이션에 데이터과학, AI와 자동화 실험이 결합하면서 소재 탐색은 경험 중심에서 예측과 역설계, 그 결과가 다음 실험으로 이어지는 폐쇄형 연구 순환으로 나아가고 있다.

고분자는 단량체의 화학구조만으로 정의되는 물질이 아니다. 분자량과 그 분포, 공중합 조성과 서열, 가지·가교·네트워크 구조, 입체규칙성 등 다양한 구조적 변수가 고분자의 정체성을 결정한다. 실제 소재의 물성에는 평형 상태의 고유 물성뿐 아니라 공정조건과 온도·pH·습도 등의 환경 변수에 따라 형성되는 비평형 물성도 함께 작용한다. 원자 수준의 결합과 상호작용은 이러한 조건에 따라 사슬 형태와 위상학적 구속, 상분리와 결정화, 유변학적 응답으로 이어져 소재와 공정 성능을 좌우한다. 따라서 계산과 AI가 실질적인 발견 도구가 되기 위해서는 이론, 다중스케일 시뮬레이션, 데이터와 실험을 하나의 검증 가능한 순환 구조로 연결해야 한다.

2. 현재 핵심 연구 이슈

2.1 설명에서 예측으로: 고분자 이론·시뮬레이션의 역할 확장

이러한 복잡성을 이해하는 데 고분자 이론과 시뮬레이션은 필수적이다. 사슬 통계, 상분리, 사슬 간 구속과 점탄성 이론은 구조와 움직임이 물성으로 이어지는 과정을 설명하는 공통 언어이다. 계산 자원과 알고리즘의 발전으로 양자화학, 분자동역학, 장 이론과 유변학 모델은 사후 설명을 넘어, 직접 관찰하기 어려운 내부 상태와 작동 원리를 규명하고 예측하는 도구로 성장했다. 앞으로는 분자량 분포, 계면, 흐름과 변형, 제조조건 등 실제 실험의 복잡성을 반영하고, 긴 시간에 걸친 사슬 이완과 비평형 구조에 수반되는 오차와 불확실성까지 정량화해야 한다. 물리 법칙과 불확실성을 담은 이론·시뮬레이션을 AI와 결합해 실제 실험과 공정을 신뢰성 있게 예측하는 수준으로 발전시키는 것이 핵심 과제이다.

2.2 물리와 화학의 경계를 넘는 복잡 고분자 소재

예측 대상이 복잡할수록 물리와 화학을 함께 고려해야 한다. 고분자 물리는 연결성, 아키텍처와 토폴로지, 사슬 간 구속, Flory-Huggins 상호작용 매개변수 χ 로 구조와 움직임을 설명해 왔다. 그러나 에너지·환경·의료·전자 분야의 기능성 고분자에서는 작용기의 반응성, 정전기력과 용매화, 생분해, 생체 계면, 전하 전달과 화학적 도핑 등 화학구조 고유의 특성도 물리적 변수만큼 중요하다. 따라서 양자화학적 반응성 예측부터 분자구조, 상분리와 유동에 이르기까지 여러 길이·시간 척도의 모델을 연결하고, 분광·산란·전기화학·기계적 측정으로 검증해 궁극적으로는 화학구조-상호작용-형태-동역학-기능으로 이어지는 연결을 통합적으로 예측하는 다중스케일 체계를 구축하는 것이 중요하다.

2.3 표현·예측·검증의 순환: 인공지능과 자율실험

이처럼 고려할 구조와 조건이 많아지면서 AI와 자율실험의 역할도 커진다. 인공지능은 조성, 온도, 유량, 열처리처럼 변수와 목표가 명확한 공정 최적화에 강점을 보이며, 실시간 분석과 로봇 합성을 연결한 자율실험으로 확장되고 있다. 그러나 원하는 성능에서 소재와 공정을 탐색하는 역설계에는 고분자의 복잡한 구조와 이력을 포괄하는 표준적 표현체계가 아직 충분히