

산학연 연구실 소개(1)

전남대학교 고분자융합소재공학부 고분자재료 수치모사 연구실

(Theory and Simulation for Soft Matters Lab. (SML), Chonnam National University)

주소: 광주광역시 북구 전남대학교 공대 5호관 309호 (우: 61186)

전화: 062-530-1772, E-mail: shur@jnu.ac.kr

홈페이지: <https://jnusml.wixsite.com/labintro>

연구책임자 | 허수미 교수
전남대학교
고분자융합소재공학부

1. 연구실 소개

컴퓨터 시뮬레이션을 통한 이론적 접근법은 전통적인 실험적 접근만으로는 어렵고 비효율적인 무수히 많은 가능한 분자 구조 탐색 및 분자수준의 현상에 대한 이해와 현상학적 해석을 제공하는 주요한 연구방법론으로 그 필요성이 증가하고 있습니다. 시뮬레이션 연구는 대상 시스템에 대한 수학적 모델링, 수치해석적 방법론의 개발 및 활용을 통한 대상 물성치 계산과 분석, 그리고 이를 통한 해석 등을 모두 아우르는 연구로써, 그 대상에 따라 다양한 방법론 개발을 요구합니다. 예를 들어, 분자동역학은 원자나 분자 수준의 상세한 움직임을 연구하는 데 사용되며, 필드 이론은 더 큰 스케일에서의 고분자 집합체 거동을 연구하는 데 적합합니다. 최근에는 머신러닝과 인공지능 기술의 발전으로 새로운 형태의 시뮬레이션 방법론이 등장하고 있습니다. 데이터 기반 접근법은 기존의 물리 기반 시뮬레이션의 한계를 보완하고, 더 효율적이고 정확한 예측을 가능하게 합니다. 특히 제한된 실험 데이터로부터 물성을 예측하고 새로운 분자 구조를 설계하는 데 큰 잠재력을 보여주고 있습니다.

고분자재료 수치모사 연구실은 통계역학에 기초한 고분자 물리 이론과 멀티스케일 수치모사, 그리고 인공지능(기계학습) 기반 소재정보학을 융합하여 고분자 재료의 구조-물성 간 상관관계를 이해하고, 궁극적으로 차세대 첨단 소재를 예측·설계하는 데 주력하고 있습니다. 본 연구실은 이론적(계산적) 연구결과만으로 그치지 않고, 여러 국내외 실험팀과의 협업을 통해 연구 성과를 실제 응용으로 발전시켜 산업계의 실질적 문제해결에도 기여하고 있습니다.

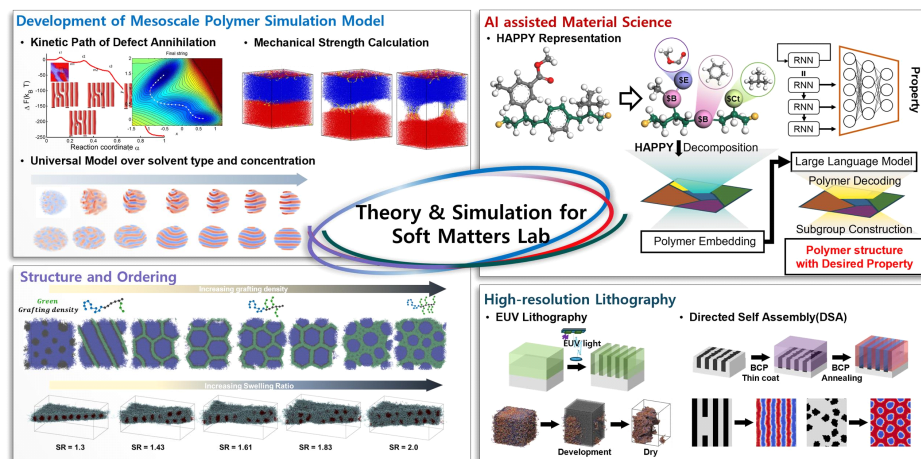


그림 1. 고분자재료 수치모사 연구실의 연구 분야.

2. 주요 연구분야

2.1 구조적/화학적 복잡성이 반영된 고분자 시스템 모델링 및 해석

고분자의 물성은 화학구조뿐만 아니라 사슬 구조에 의한 큰 영향을 받습니다. 그러나 구조-물성에 대한 이론은 매우 제한적인 경우에만 적용 가능하며, 합성 기술의 발전에도 불구하고, 물리적 구조-물성 관계를 통합적으로 이해하기 위한 실험 데이터는 여전히 부족합니다. 본 연구실은 다양한 스케일 수치모사에 대한 전문성을 바탕으로, 원자기반 분자 시뮬레이션으로는 해석이 불가능한 다변화된 사슬구조를 가지는 고분자 시스템의 메조스케일 현상해석에 주력해 왔습니다(그림 2).

특히, 그림 2에 보이는 선형 백본 사슬에 높은 밀도로 사이드 체인이 접합된 가지구조의 바틀브러쉬 고분자의 경우, 기존의 시뮬레이션 접근법이 사이드 체인에 의해 유도된 백본의 강직성을 반영하지 못하고 있으며, 바틀브러쉬 자기조립 수치모사는 희석용액에 한정되어 있다는 한계점이 있습니다. 이러한 한계점을 극복한 새로운 모델과 계산 도구를 개발하여, 비선형 고분자 시스템에서 메조스케일 사슬 집합체 구조의 다중 스케일의 분자 계층 조직과 고유한 기계적, 광학적 특성과 자기조립 성질 간의 관계를 이해하기 위해 노력 중입니다.

일 예로, 용융상태에서 백본 분자량에 따른 바틀브러쉬 블록공중합체 라멜라 도메인 크기 스케일링을 성공적으로 재현하고, 블록비율, 사이드 체인 길이, 접목밀도 변화에 따른 바틀브러쉬 공중합체 조성의 변화에 대한 자기조립 상평형도를 완성했습니다. 또한, 다양한 용매성질과 전 농도 범위에서 고분자 용액의 거동을 해석할 수 있는 단일 메조스케일 시뮬레이션 플랫폼상의 이멸전 드랍렛 용액공정 모델과 결합하여 백본 길이에 따라 이멸전 드랍렛이 양파모양에서 라바형으로 변화되는 것을 밝혔습니다.

나아가 인공지능을 활용하여 사슬 구조의 복잡성이 물성에

미치는 영향을 구체적으로 규명하기 위한 노력 또한 진행중입니다. 이를 위해 시뮬레이터의 연산 효율을 개선하고, 다양한 물성 데이터베이스를 구축하고 있습니다. 복잡한 물리적 사슬 구조를 효과적으로 표현할 수 있는 계층적 그래프 표현법(hierarchically abstracted polymer graph)을 개발하고, 이에 특화된 그래프 신경망 구조를 설계 중입니다.

또한 열역학적 평형상태 뿐 아니라, 동적거동 및 경로에 의존하는 비평형상태 고분자 시스템 해석에도 주력하고 있습니다. 블록공중합체 자기조립 형성의 동적 경로를 효과적으로 묘사할 수 있는 샘플링 기법을 적용하여, 결합구조 제어 경로와 그 기반에 있는 분자레벨에서의 거동을 동시에 설명하여, 고분자 물질의 자기조립에 관한 이해 수준을 현저히 증강시키는데 기여하였습니다. 비평형상태가 더욱 중요해지는 용액상 고분자 시스템의 동적 거동과 메조스케일의 상분리를 예측하고 설명함으로써, 용매 종류 및 공정조건이 시스템에 미치는 영향을 해석하고, 이를 바탕으로 자기조립 패턴을 제어의 이론적 토대를 제공하고 있으며, 열역학적 평형/비평형 상태의 모폴로지를 제어/구현 방안을 설계하고 있습니다.

2.2 고분자용 인공지능 네트워크 및 표현자 개발

본 연구실은 고분자 과학 분야에서 데이터의 한계를 극복하고 인공지능을 효과적으로 활용하기 위한 혁신적인 방법론 개발에 주력하고 있습니다. 기존의 고분자 물성 예측 모델들이 직면한 대규모 학습 데이터 요구라는 근본적 한계를 극복하고자, 고분자의 계층적 구조 특성을 효과적으로 표현할 수 있는 새로운 접근법을 제시했습니다.

본 연구실이 개발한 HAPPY(Hierarchically Abstracted rePeat unit of PolYmers) 표현법은 고분자 단량체의 화학 구조를 계층적으로 함축화하여 문자열로 표현하는 혁신적인 방법입니다. 이는 제한된 데이터 조건에서도 우수한 예측 성능을 달성할 수 있을 뿐만 아니라, 역설계 과정에서 비유효(invalid) 물질이 생성될 확률을 낮추게 합니다. HAPPY를 RNN(Recurrent Neural Network) 네트워크와 결합하여 고분자 용융체의 주요 물성(유리전이온도, 밀도, 유전상수, 열전도도, 용해도) 예측에 적용한 결과, 기존 SMILES 기반 RNN보다 우수한 성능을 보임을 입증하여 고분자 정보학 분야에서 주목할 만한 성과를 거두었습니다. 현재는 자연어 처리 분야의 최신 발전을 고분자 정보학에 접목하는 연구를 진행하고 있습니다. HAPPY 계층적 화학 서브구조 함축화/단순화 과정을 자동화하는 토크나이저를 개발하고, GPT와 DeBERTa와 같은 고급 언어 모델의 문맥 학습 능력을 활용하여 화학 구조 간의 복잡한 관계를 포착하는데 성공했습니다. 이러한 고도화된 HAPPY 표현 체계는 고분자 물성 예측의 정확도를 크게 향상시킵니다.

나아가 본 연구실은 제한된 실험 데이터를 기반으로 목표 물성 및 기능성을 달성하는 고분자 소재의 화학 또는 형태학적

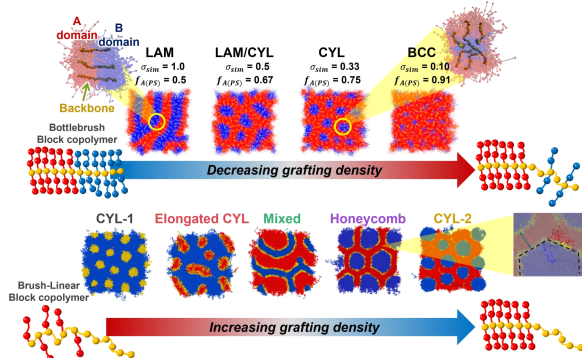


그림 2. 바틀브러쉬 고분자 및 브러쉬-선형 고분자의 grafting density에 따른 상변화.

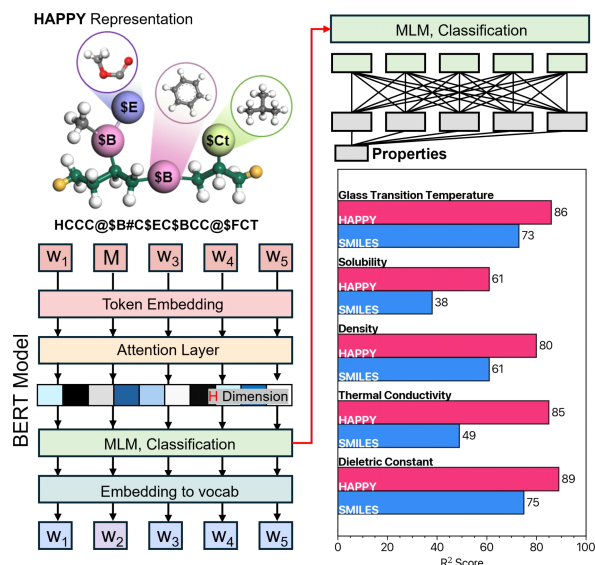


그림 3. HAPPY 표현자를 통한 transformer 기반 물성예측 네트워크.

구조 설계를 위한 역설계 문제에도 도전하고 있습니다(그림 3). IM-HAPPY(Inverse Model based on HAPPY)는 이산 공간과 연속공간에서의 고분자 화학구조 탐색이라는 두 가지 접근법을 통해 개발되고 있습니다. 이산공간 접근법에서는 SHAP 분석을 통해 각 화학구조가 물성에 기여하는 정도를 정량화하고, 이를 유전 알고리즘과 결합하여 효율적인 구조 탐색을 수행합니다. 연속공간 접근법에서는 VAE, GAN, transformer 등의 생성형 딥러닝 네트워크를 활용하여 목표 물성을 만족하는 영역에서 새로운 구조를 생성합니다.

이러한 연구는 실험적 접근만으로는 발견하기 어려운 혁신적 분자 구조를 효율적으로 탐색할 수 있게 함으로써, 초고속 통신용 저유전 소재나 고내열성 및 기계적 강도를 가진 수전해 멤브레인 개발등과 극한 물성이 요구되는 첨단 소재 개발에 실질적으로 기여할 것으로 기대됩니다. 본 연구실은 이러한 계산과학과 인공지능 기반의 접근법이 미래 소재 개발의 새로운 패러다임을 제시할 것으로 확신하며, 지속적인 연구를 통해 이 분야를 선도해 나가고자 합니다.

2.3 극자외선 리소그래피용 레지스트 및 패터닝 공정 모델링

본 연구실은 반도체산업의 실질적 문제 해결에도 노력하고 있습니다. 10 nm 미만급 차세대 반도체 공정의 핵심 기술인 극자외선 리소그래피(extreme ultra violet lithography) 이미징 소재 및 공정 개발에서, 패턴 크기가 포토레지스트를 이루는 분자의 크기에 근접하는 수준이므로 시스템의 분자 수준 이해가 필수적이라는 점에 주목했습니다. 특히 13.4 nm 파장의 EUV 리소그래피 기술에서는 광자 수가 크게 제한되어 충분한 양의 광자가 레지스트로 흡수되지 못하는 근본적인 문제가 있습니다. 이로 인한 photon shot noise는 line edge roughness (LER)의 주요 원인이 되고 있습니다. 또한 고에너지 광자에 의해 발생된 2차전자의 확산과 산 증폭 거리가 목표 패턴 크기에 비해 상대적으로 커서, 화학 증폭형 레지스트에서 해상도를 제한하는 주요 요인이 되고 있습니다.

이러한 도전 과제를 해결하기 위해, 본 연구실에서는 기존의 연속체 모델에 광화학반응의 확률적 항들을 단순히 추가하는 수준을 넘어, 고분자 사슬을 비롯한 이미징 소재 구성 요소들의 입체배향 및 구조 변화를 명시적으로 모사가능한 분자 통계역학 기반의 시뮬레이터를 개발했습니다(그림 4). 개발된 시뮬레이터는 코팅, 열처리, 노광, PEB(post exposure baking), 현상 등 EUV 패터닝의 전 공정 단계를 포괄하며, 특히 노광 및 광화학반응 후 포토레지스트 내부의 광자 분포 및 화학 반응의 무작위 변동성으로 인한 stochastic effect와 고분자 사슬의 거동을 동시에 모사할 수 있습니다. 시뮬레이터를 활용한 체계적인 분석을 통해, 광화학반응의 인자와 고분자 등의 재료분포, 사슬의 크기, protected group의 분포, 유리 전이온도, acid의 분포, deprotection rate 등 다양한 인자의 영향을 고찰하였고, 최종 패턴 LER은 광자 분포의 변동에 가장 민감하지만, 물질 분포와 산 확산 속도도 LER에 상당한 영향을 미치는 것을 확인했습니다. 이는 광화학적 확률적 인자를 극도로 제한한다 해도, 재료에서 오는 본질적 한계가 존재함을 의미합니다.

본 연구실은 이러한 통찰을 바탕으로, 다양한 레지스트 시스템에 대한 재료 구조 설계와 공정 조건 최적화를 통해 고해상도와 낮은 선평거칠기를 동시에 달성하기 위한 새로운

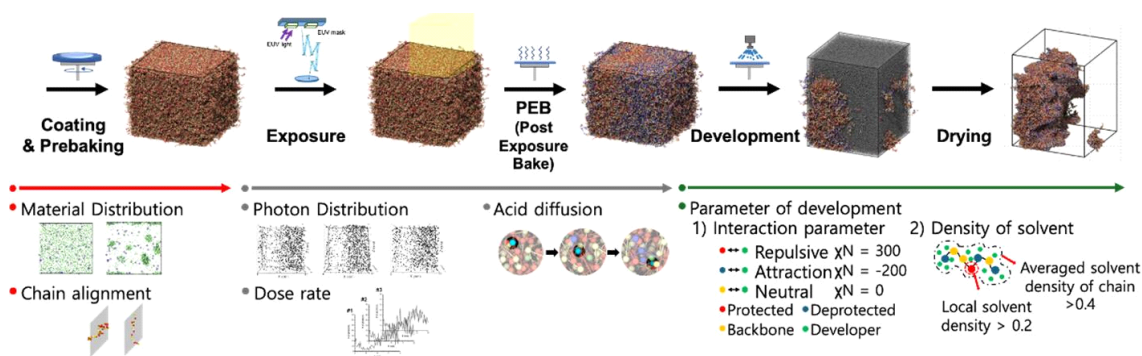


그림 4. 화학증폭형 레지스트 기반 극자외선(EUV) 리소그래피 공정 시뮬레이터의 모식도.

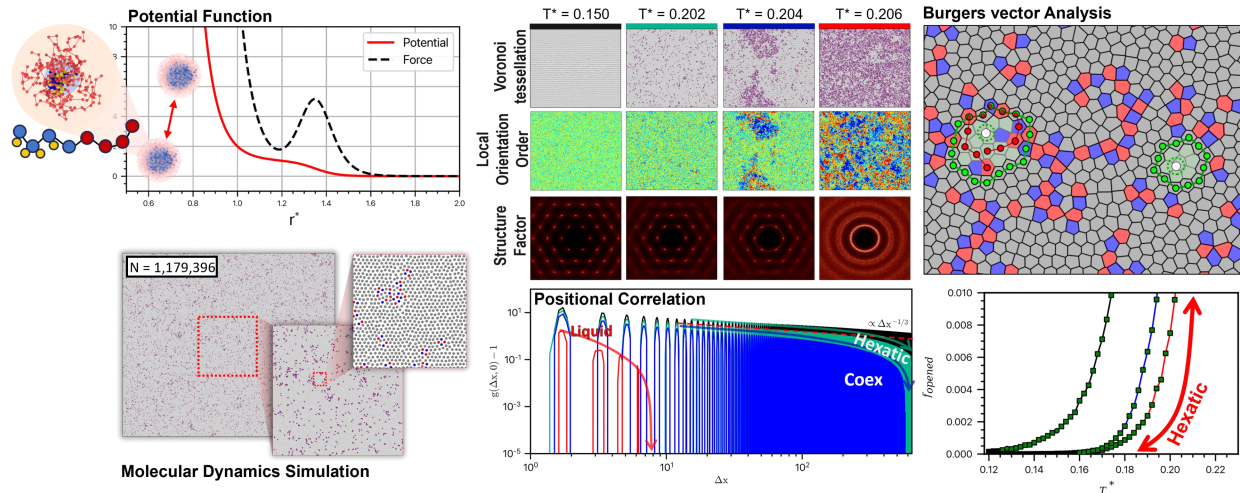


그림 5. 초거대면적 분자동역학(MD) 시뮬레이션을 통한 KTHNY 모형과 녹음 메커니즘 규명.

접근법을 개발하고 있습니다. 최근에는 무기물 기반 레지스트나 하이브리드 시스템에서 발생하는 광화학 반응과 구조 변화도 모사할 수 있도록 시뮬레이터를 확장하고 있으며, 특히 다층 레지스트 시스템에서의 계면 현상에 대한 연구와 EUV 리소그래피와 DSA 기술의 시너지 효과에도 주목하고 있습니다. 이러한 다각적인 접근을 통해, 각 레지스트 시스템의 장단점을 체계적으로 분석하고, 초고해상도 패턴링을 위한 최적의 소재 및 공정 조건을 도출하고자 합니다.

2.4 나노 유기격자구조 용융 메커니즘 규명과 구조 제어

본 연구실은 2차원 나노 유기격자의 상전이 현상을 규명하고 이를 차세대 양자 소자 개발에 응용하는 연구를 수행하고 있습니다. 특히 블록공중합체 자기조립으로 형성되는 2차원 격자 시스템에서 결합구조를 정밀하게 제어함으로써 물성을 극대화하는 데 주력하고 있습니다.

2차원 격자 시스템은 제한된 열적 요동으로 인해 3차원과 본질적으로 다른 녹음(melting) 거동을 보입니다. KTHNY 이론은 고체상(solid or crystalline phase)과 액체상 사이에 hexatic phase가 존재할 것으로 예측하였으며, 일부 시스템에서는 이러한 중간상이 관찰되었으며, 그 존재와 상전이 메커니즘에 대해서는 여전히 일치된 관찰과 해석이 부족하였습니다. 이러한 난제를 해결하기 위해 본 연구실은 전례없는 규모의 분자동역학 시뮬레이션을 수행했습니다. 100만 개 이상의 격자점을 포함하는 초거대면적 시스템을 다양한 밀도와 온도 조건에서 분석함으로써, 유기 격자 내에서의 ODT(order-disorder transition) 임계 현상과 상전이 메커니즘을 포괄적으로 규명할 수 있었습니다. 논란의 여지가 있던 hexatic 상이 확실히 존재하며, 전통적인 KTHNY 모형과 다른 녹음 메커니즘을

가짐을 입증하였으며, 기존의 믿음과 달리 hexatic 상이 넓은 영역에 걸쳐 존재하며, 기존 해석의 논란은 작은 시스템 크기에 기인했음을 밝혔습니다.

본 연구실은 이러한 2D 유기격자 시스템의 특이한 물리적 현상을 바탕으로 광자, 플라스몬, 포논 또는 스핀과 같은 준입자의 국소화/확장을 제어하여 플라스모닉 또는 양자 메모리 디바이스와 같은 개념 증명 신호 처리 장치에 활용을 위해 노력 중입니다. 이러한 연구는 나노스케일에서 물질의 기본 특성을 이해하고 제어하는 새로운 패러다임을 제시할 것으로 기대됩니다.

3. 연구실 현황 및 비전

본 연구실은 계산과학·고분자 물리·인공지능을 아우르는 융합적 접근으로 차세대 소재 과학의 새로운 지평을 열어가고 있습니다. 고분자 시스템의 시뮬레이션과 대규모 데이터 분석 수행을 위해 Dell PowerEdge R740 서버와 NVIDIA A100 GPU 클러스터 기반의 고성능 컴퓨팅 인프라를 구축하였으며, 이를 통해, 극저유전·고내열·고강도 등의 극한 물성을 가지는 혁신적 소재 개발에 주력하고 있습니다.

국내외 연구기관 및 산업체와의 긴밀한 협력을 통해, 현장에서 직면하는 복잡한 소재 문제에 정교한 해석과 솔루션을 제시함으로써 학술적·실용적 파급효과를 함께 창출해 나가고자 합니다. 이러한 노력을 통해 반도체, 통신, 배터리, 에너지 등 미래 핵심 산업에서 요구되는 혁신적 소재와 공정 기술 개발을 선도하고, 나아가 대한민국 소재 산업의 국제 경쟁력 강화에 기여하고자 합니다. 본 연구실은 앞으로도 끊임없는 혁신과 도전을 통해 소재 과학 분야의 새로운 패러다임을 창출해 나갈 것입니다.