ISSN (Print) 1598-5385
ISSN (Online) 2233-6648
≪해설논문≫ Journal of the Korean Magnetics Society 36(5), 397-404 (2026) https://doi.org/10.4283/JKMS.2026.36.5.397

AI-based Inverse Materials Design: Advances in Generative AI-driven Inverse Materials Design Platforms

Hyochan Ahn†, Kiwon Yang†, and Joo-Hyoung Lee*
Department of Materials Science and Engineering, GIST, Gwangju 61005, Korea

(Received 21 September 2026, Received in final form 27 October 2026, Accepted 27 October 2026)

Artificial intelligence (AI) is rapidly transforming materials research from trial-and-error-based exploration to data-driven and inverse design. Early materials AI focused primarily on discriminative models for predicting properties of given crystal structures. With recent advances in generative AI, however, inverse-design approaches that directly generate new materials with desired properties have emerged as a major research direction. In particular, AI-based crystal structure generation offers a promising route to discovering structures beyond existing databases and overcoming the limitations of conventional high-throughput computation and combinatorial screening. This review summarizes the concepts and development of AI-based inverse materials design and introduces the fundamental principles of generative AI and crystal structure generation. We further discuss next-generation materials design platforms integrating property prediction, generative models, reinforcement learning, physics-informed AI and foundation models, and highlight key challenges and further research directions.

Keywords : inverse materials design, generative artificial intelligence, crystal generation, diffusion model, reinforcement learning

AI 기반 소재 역설계: 생성형 인공지능을 이용한 소재 역설계 플랫폼의 발전

안효찬† · 양기원† · 이주형*
광주과학기술원 신소재공학과, 전남광주통합특별시 북구 첨단과기로 123, 61005

(2026년 9월 21일 받음, 2026년 10월 27일 최종수정본 받음, 2026년 10월 27일 게재확정)

인공지능(Artificial Intelligence, AI)은 최근 소재 연구의 패러다임을 경험과 시행착오 중심의 탐색에서 데이터 기반 설계와 역설계 중심으로 빠르게 변화시키고 있다. 초기의 소재 AI 연구는 주어진 결정구조의 물성을 예측하는 판별 모델에 집중되었으나, 최근 생성형 인공지능의 급격한 발전으로 원하는 물성을 지닌 새로운 소재를 직접 생성하는 역설계 기술이 핵심 연구분야로 부상하였다. 특히 결정구조 생성 AI는 기존 데이터베이스에는 존재하지 않는 새로운 결정구조를 생성함으로써 기존의 고속계산과 조합적 탐색의 한계를 극복할 수 있는 차세대 소재 설계 기술로 주목받고 있다. 본 논문에서는 AI 기반 소재 역설계의 개념과 발전과정을 체계적으로 정리하고, 최근 급속히 발전하고 있는 생성형 AI와 결정구조 생성 기술의 핵심 원리를 소개한다. 또한, 물성예측 모델, 생성형 모델, 강화학습, Physics-informed AI 및 Foundation model을 통합한 차세대 소재 설계 플랫폼의 발전방향을 논의하고 향후 연구과제를 제시한다.

주제어 : 소재 역설계, 생성형 인공지능, 결정구조 생성, 확산모델, 강화학습

I. 서 론

지난 수십 년 동안 신소재 개발은 반도체, 자성재료, 이차전지 및 촉매와 같은 첨단 산업의 발전을 이끌어 온 핵심 기술이었다. 그러나 새로운 소재의 발견은 여전히 연구자의 경험과 직관에 크게 의존하는 시행착오적 접근에 기반하고 있다[1]. 연구자는 기존의 지식과 경험을 바탕으로 후보 물질을 제안하고 이를 합성한 후 다양한 특성을 측정하는 과정을 반복한다. 이러한 접근은 성공적인 사례를 만들어 왔지만, 탐색 가능한 물질공간의 극히 일부만을 조사할 수 있다는 근본적인 한계를 가진다[2].

계산과학의 발전은 이러한 문제를 부분적으로 해결하였다.

© The Korean Magnetics Society. All rights reserved.
†The authors contributed equally to this work.
*Corresponding author: Tel: +82-62-715-2322, e-mail: jhyoung@gist.ac.kr

특히 밀도범함수이론(Density functional theory, DFT)의 발전과 함께 Materials Project, OQMD, AFLOW와 같은 대규모 계산 데이터베이스가 구축되면서 수십만 개 이상의 결정구조와 물성이 축적되었다[3-5]. 이러한 데이터는 머신러닝 기반 물성예측 모델의 학습에 활용되었으며, 소재 연구는 경험 중심 연구에서 데이터 중심 연구로 빠르게 전환되었다. 인공지능(Artificial Intelligence, AI)을 이용한 초기의 소재 연구는 대부분 물성예측 문제를 대상으로 하였다. AI 모델을 이용한 이런 "결정구조→물성예측" 접근은 기존 후보 물질을 매우 빠르게 평가할 수 있으므로 고속 탐색 효율을 크게 향상시켰다. 그러나, 이와 같은 정설계(Forward design) 방식은 데이터베이스에 존재하지 않는 새로운 구조를 발견하는 문제에는 직접적으로 적용될 수 없다[6]. 이러한 한계는 최근 AI 기반 소재 연구의 중심이 "정설계"에서 "역설계(Inverse design)"로 이동하는 가장 중요한 이유가 되었다.

한편, ChatGPT를 비롯한 대규모 생성형 AI의 성공은 최근의 소재 연구에도 큰 영향을 미치고 있다[7,8]. Diffusion model이 새로운 이미지를 생성하고 대규모 언어모델(Large language model, LLM)이 자연스러운 문장을 생성하는 것처럼, 소재 분야에도 AI를 이용한 결정구조 생성 연구가 빠르게 발전하고 있다. 즉, AI는 더 이상 계산결과를 예측하는 보조도구가 아니라 새로운 후보 소재를 제안하고 설계하는 "설계 엔진(Design engine)"으로 변화하고 있다. 본 논문에서는 이러한 AI 기반 소재 역설계의 개념과 발전과정을 살펴보고, 최근 급속히 발전하고 있는 생성형 AI와 결정구조 생성 기술의 핵심 원리를 소개함과 동시에 차세대 소재 설계 플랫폼의 발전방향을 논의하고 향후 연구과제를 제시한다.

II. 소재 설계 패러다임의 변화

1. 소재 연구에 생성형 AI 도입

전통적인 소재 개발은 "합성→측정→개선"의 반복과정이었다. 이후 계산과학의 발전으로 DFT 방법론이 도입되면서 계산 기반 소재 설계가 가능해졌으며 최근에는 AI가 이 과정의 핵심 역할을 담당하게 되었다. 그러나, DFT 기반 소재 설계와 AI 기반 소재 설계는 경쟁하는 관계가 아니라 상호 보완적인 기술이다. 특히 생성형 AI는 기존 계산과학을 대체하는 것이 아니라, 계산과학이 다룰 후보 구조를 효율적으로 제공하는 역할을 수행한다.

역설계가 실제 소재 개발에 적용되기 위해서는 단순히 물성 예측을 넘어 새로운 구조를 생성할 수 있는 AI가 필요한데, 이러한 요구에 부응하여 최근 급속히 발전한 기술이 생성형 AI이다. 생성형 AI는 기존의 데이터를 단순히 분류하거나 예측하는 것이 아니라 데이터 자체의 확률분포를 학습하여 새로운 데이터를 생성한다는 점에서 기존의 "판별" 모델과는 근본적으로 구별된다[9]. 이러한 개념은 이미지 생성, 자연어 처리 및 단백질 설계 분야에서 성공적으로 적용되었으며, 최근에는 소재 결정구조 생성으로 빠르게 확장되고 있다. 그러나, 결정구조 생성은 일반적인 이미지 생성보다 훨씬 어려운 문제이다. 결정은 periodicity, space group symmetry, chemical composition, 원자 위치 및 결합 조건 등을 동시에 만족해야 하며, 생성된 구조는 thermodynamic stability를 보유해야 한다[10,11]. 따라서, 소재 분야의 생성형 AI 연구는 일반 생성모델을 단순히 적용하는 것이 아니라 결정학을 비롯한 물리적 제약조건을 생성과정에 포함하도록 발전하였다.

2. 물성예측 AI 모델의 필요성

생성형 AI가 수천 개의 후보 구조를 생성하더라도 이를 모두 DFT로 계산하는 것은 현실적으로 어렵다. 따라서 생성된 후보를 빠르게 평가하는 물성예측 AI가 반드시 필요하다. 현재 물성 예측에 널리 사용되는 AI 모델은 Graph Neural Network(GNN)이다. 결정은 원자의 집합이 아니라 원자들이 화학결합으로 연결된 네트워크로 이해할 수 있으며, 원자를 node, 결합을 edge로 표현하면 자연스럽게 결정그래프가 구성된다. GNN 기반의 물성예측 모델로는 CGCNN[12], MEGNet[13], ALIGNN[14] 등이 있으며, 최근에 제안된 GRACE[15], SevenNet[16] 등의 사례에서 볼 수 있듯이 DFT 수준의 예측 정확도를 보이는 경우도 보고되고 있다.

한편, 최근 소재 AI에서 큰 변화 가운데 하나는 transformer 구조의 도입이다. Transformer는 원래 자연어 처리를 위해 개발되었지만, self-attention 메커니즘을 통해 long-range interaction을 효과적으로 학습할 수 있으며 이는 전자 간 상호작용이 물성에 큰 영향을 미치는 결정구조에서 매우 유용하다[17]. Transformer 기반의 모델로는 CrabNet[18], MOFormer[19], CrystalFormer[17] 등이 있으며, 이러한 접근은 자연어 분야의 생성형 사전훈련 변환기(Generative Pre-trained Transformer, GPT)와 유사한 개념으로서 하나의 거대한 Foundation model이 다양한 소재 설계 문제를 해결하는 방향으로 발전하고 있다.

III. 생성형 AI를 이용한 소재 역설계

1. 생성모델의 기본 개념

생성모델은 학습 데이터의 확률분포를 학습한 후 그 분포로부터 새로운 데이터를 생성하는 모델이다. 결정구조 생성모델은 입력 데이터를 잠재공간(Latent space)의 한 점으로 mapping 한 후 잠재공간에서 새로운 점을 샘플링하여 결정구조를 생성한다. 일반적으로 생성모델은 크게 1. Variational

Autoencoder(VAE), 2. Generative Adversarial Network(GAN), 3. Diffusion model의 세 가지로 구분되는데 구조 생성 메커니즘과 학습 방식에 있어서 차이를 보인다.

2. Variational Autoencoder (VAE)

VAE는 생성형 AI가 소재 연구에 도입될 당시 널리 사용되었던 모델이다. 입력 결정구조를 연속적인 잠재공간으로 변환하고, 그 잠재공간에서 새로운 샘플을 생성하여 다시 결정구조로 복원하는 방식이다[20,21]. 이러한 VAE 구조는 결정구조뿐 아니라 자성 상태 생성에도 동일하게 적용되고 있다[22] (Fig. 1(a)). 이와 같은 접근은 결정 간의 연속적인 구조 변화와 잠재공간 최적화를 가능하게 하여 초기 결정구조 생성 연구의 기반을 마련하였다. 그러나 VAE는 잠재공간을 단순한 Gaussian 분포로 가정하기 때문에 복잡한 결정구조 분포를 충분히 표현하지 못하며, 생성된 구조가 평균화(over-smoothing)되는 경향을 가진다. 또한 space group symmetry와 periodicity를 직접 반영하기 어렵다는 한계가 있어서 결정구조 생성 이후 별도의 정제 과정이 필요한 경우가 많다. 이러한 한계는 이후 GAN과 Diffusion 기반 모델이 발전하는 계기가 되었다.

3. Generative Adversarial Network (GAN)

VAE는 잠재공간을 이용하여 새로운 결정구조를 생성한다는 개념을 확립하였지만, 생성결과가 평균화되는 경향과 생성 다양성의 한계를 가지고 있었다. GAN은 이 문제를 다른 방식으로 접근한다[23,24]. GAN에서는 생성자(Generator)와 판별자(Discriminator)가 서로 경쟁적으로 학습하며, 생성자는 실제 데이터와 구별하기 어려운 구조를 생성하고 판별자는 생성된 구조와 실제 구조를 구분하도록 학습된다(Fig. 1(b)). 이러한 경쟁학습(Adversarial learning)을 반복함으로써 생성자는 점차 실제 데이터의 분포를 효과적으로 모사하게 된다.

결정구조 생성분야에서 GAN은 초기 생성형 AI 연구에 중요한 역할을 수행하였다. 특히 Conditional GAN은 화학 조성이나 목표 물성을 조건으로 입력받아 이를 만족하는 결정구조를 생성할 수 있는 가능성을 제시하였다[24]. 그러나 결정구조는 translational 및 space group symmetry, chemical stability 등 복잡한 제약조건을 동시에 만족해야 하므로 GAN을 직접 적용하기에는 여러 어려움이 존재하였다. 생성된 구조가 물리·화학적으로 타당하지 않거나 결정학적 제약을 만족하지 못하는 경우가 빈번하였으며, 생성결과의 다양성이 부족한 mode collapse 문제도 큰 한계로 지적되었다. 이러한 이유로 현재 결정구조 생성 분야에서 GAN의 활용은 제한적이다. 그럼에도 GAN은 생성모델 연구의 발전 과정에서 중요한 이정표를 제시하였으며, "경쟁학습"이라는 개념은 이후 다양한 하이브리드 생성모델의 설계에 영향을 미쳤다.

4. Diffusion Model

최근 결정구조 생성 AI의 발전을 주도하는 기술은 Diffusion model이다[10,11,25,26]. Diffusion model은 이미지

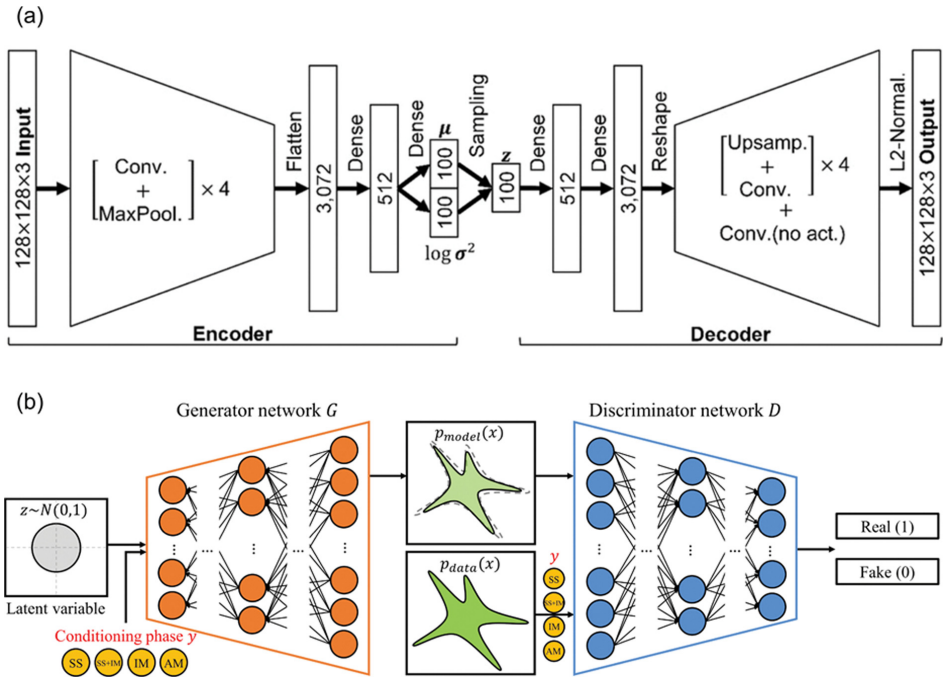


Fig. 1. (Color online) Representative architectures of (a) VAE- [22] and (b) GAN-based generative models [24]. All figures are reproduced under CC BY-NC-ND 4.0.

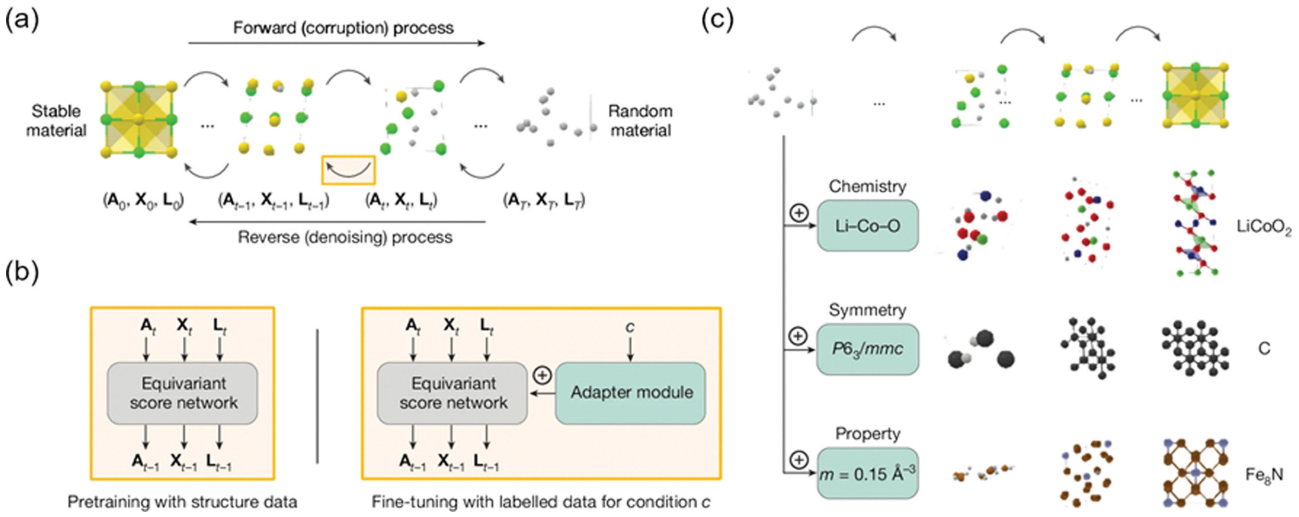


Fig. 2. (Color online) Architecture of MatterGen. (a) The forward diffusion process progressively corrupts the atom types A, atomic coordinates X, and lattice L toward their respective noise distributions, whereas the reverse denoising process generates crystal structures from the random state. (b) An equivariant score network is pretrained on a large dataset of stable crystal structures and subsequently fine-tuned on labeled data using an adapter module for conditional generation. (c) The fine-tuned model generates materials subject to desired chemistry, symmetry, or scalar-property constraints. This figure is adopted from Ref. [10] under CC BY 4.0.

생성분야에서 뛰어난 성능을 보인 이후 소재 분야에도 빠르게 도입되었으며, 현재 대부분의 최신 결정구조 생성모델은 Diffusion model을 기반으로 개발되고 있다. Diffusion model은 Fig. 2(a)와 (b)에 나타낸 것과 같이 데이터에 점진적으로 noise를 추가하는 Forward diffusion 과정과, 추가된 noise를 단계적으로 제거하여 원래 구조를 복원하는 Reverse diffusion 과정을 통해 학습하는데, 학습이 완료되면 순수한 noise로부터 새로운 결정구조를 생성할 수 있다. 이 접근법은 VAE, GAN과 비교하여 다음과 같은 장점을 가진다.

- 학습 안정성이 높다.
- Mode collapse에 덜 취약하여 생성 다양성을 확보하기에 용이하다.
- 복잡한 확률분포를 효과적으로 학습할 수 있다.
- 조건부 생성이 용이하다.
- 결정학적 제약을 생성과정에 통합하기 쉽다.

특히 소재 연구에서는 생성된 구조가 물리·화학적으로 안정해야 하므로 diffusion 과정에서 물리적 제약조건을 함께 고려하는 Physics-guided Diffusion 연구가 활발히 진행되고 있다(Fig. 2(c)).

5. 대표적인 결정구조 생성 모델

결정구조 생성을 위해 널리 사용되는 모델로는 Crystal Diffusion Variational Autoencoder(CDVAE)[25], DiffCSP[26], MatterGen[10] 등이 있다. 이 중 CDVAE는 VAE의 잠재공간 표현 능력과 Diffusion model의 높은 생성 품질을 결합한 대표적인 하이브리드 모델이다[25]. 기존 VAE가 가지는 평균화 문제를 크게 완화하면서도 잠재공간 해석 가능성을 유지하였다는 점에서 중요한 의의를 지닌다. 또한, 결정구조 생성 연구가 초기의 VAE 기반 접근에서 Diffusion 기반 접근으로 발전하는 중요한 전환점이 된 모델이라고 할 수 있다. 한편, DiffCSP는 결정구조 예측과 생성을 동시에 수행하도록 설계된 Diffusion model이다[26]. 기존의 Crystal Structure Prediction이 global optimization을 통해 안정한 구조를 탐색하였다면, DiffCSP는 학습된 구조 분포를 이용하여 안정한 후보 구조를 직접 생성한다. 따라서 탐색 효율을 크게 향상시키며, 특히 대규모 화학 조성 공간에서 높은 성능을 보이는 것으로 보고되고 있다. MatterGen은 Microsoft Research가 제안한 Foundation model 기반 생성모델로서, 수십만 개 이상의 결정 데이터를 사전학습하여 다양한 조성과 목표 물성을 조건으로 새로운 결정구조를 생성할 수 있다[10]. MatterGen은 단순히 기존 구조를 모방하는 것이 아니라 목표 물성에 적합한 새로운 후보를 생성할 수 있다는 점에서 차세대 Materials Foundation Model의 대표적인 사례로 평가되고 있다.

IV. AI 기반 소재 역설계 기술의 고도화

최근 소재 AI 연구는 생성형 AI만으로는 충분하지 않다는 인식 하에 여러 AI 기술을 통합하는 방향으로 발전하고 있다. 생성된 구조를 보다 효율적으로 탐색하고 실제 소재 개발에 연결하기 위해서는 강화학습, Physics-informed AI, 능동학습 및 Foundation model과 같은 기술이 함께 활용되어야 한다.

1. 강화학습 기반 소재설계

강화학습(Reinforcement learning, RL)은 목표 물성을 최대화하는 방향으로 생성과정을 반복적으로 개선하는 접근법이다. 기존 생성모델이 학습 데이터의 분포를 모방하는 데 초점을 두었다면, RL은 보상함수(Reward function)를 이용하여 생성방향을 능동적으로 최적화한다[27](Fig. 3(a)~(c)). 예를 들어, band gap, formation energy 및 magnetization의 조합을 하나의 보상함수로 정의하면 RL 기반 AI는 보상을 최대화하는 결정구조를 반복적으로 생성하게 된다. 이러한 접근은 특히 다목적 최적화(Multi-objective optimization)에 매우 적합하다(Fig. 3(d)). 최근에는 Proximal Policy Optimization (PPO)를 기반으로 한 소재 설계 연구가 증가하고 있으며[28], 대규모 언어모델 학습에서 발전한 Group Relative Policy Optimization(GRPO)의 개념 역시 생성형 소재 AI에 적용되고 있다[29,30].

2. Physics-informed AI 및 능동학습

생성형 AI가 실제 소재 설계에 활용되기 위해서는 생성된

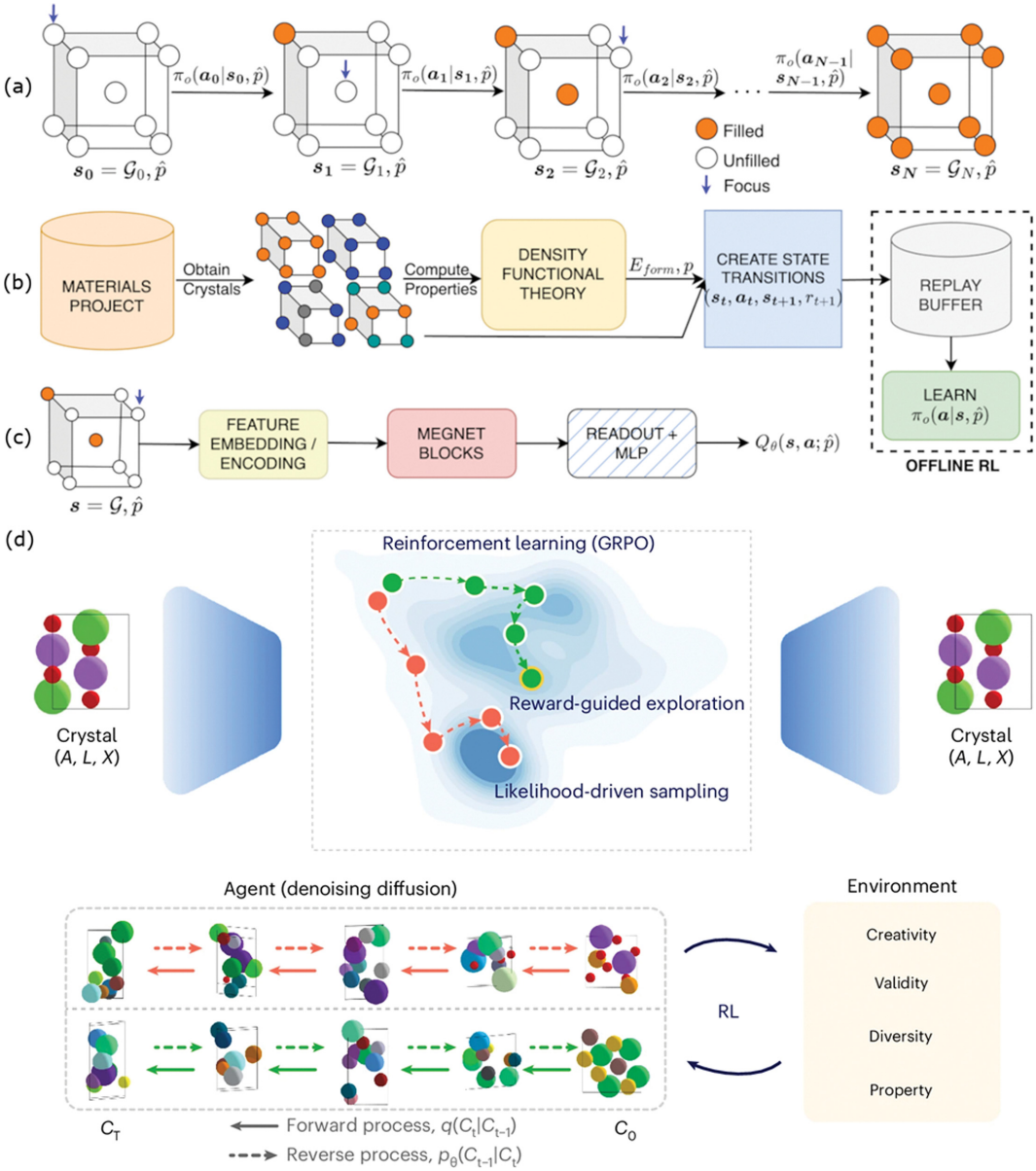


Fig. 3. (Color online) Examples of RL-guided generator models. (a) Composition filling of a predefined crystal template using an RL policy. (b) Construction of offline RL trajectories from Materials Project entries. (c) A MEGNet-based graph neural network policy trained for property-conditioned crystal generation. Taken from Ref. [27] under CC BY 4.0. (d) Chemeleon2 combines latent diffusion with GRPO. Taken from Ref. [29] under CC BY 4.0.

구조가 물리적으로 타당해야 한다. 따라서 최근에는 물리 법칙을 생성과정에 직접 통합하는 Physics-informed AI가 중요한 연구분야로 부상하였다. 대표적으로 결정의 병진 및 회전 대칭성은 Equivariant Neural Network(ENN)를 이용하여 모델의 구조에 직접 반영할 수 있다. 예를 들어 DiffCSP는 결정의 주기성과 회전대칭성을 고려한 Periodic-E(3)-equivariant 모델을 사용하여 격자벡터와 원자의 상대좌표를 동시에 생성함으로써 결정학적 대칭성을 반영한다[26]. 또한 비현실적으로 짧은 원자 간 거리나 불안정한 결합구조를 억제하기 위해 원자 간 거리 또는 에너지에 기반한 제약항을 손실함수에 추가하거나, 생성된 구조에 대해 에너지 최소화 과정을 적용할 수 있다. 한편, MatterGen은 결정구조의 주기성과 대칭성을 고려한 Diffusion model에 조건부 학습을 결합하여 화학 조성, 결정 대칭성 및 목표 물성을 만족하는 구조를 생성하도록 설계되었다[10]. 이처럼 물리적 제약조건을 모델의 구조, 학습과정 또는 생성과정에 반영하면 불필요한 탐색을 줄이고 물리적으로 타당한 결정구조의 생성효율과 신뢰성을 크게 향상시킬 수 있다[31].

한편, 생성형 AI가 제안하는 후보 구조의 수는 매우 많지만, 이들 모두를 DFT 계산이나 실험으로 검증하는 것은 현실적으로 어렵다. 따라서 계산 자원을 가장 효율적으로 활용하기 위한 전략으로 능동학습(Active learning)이 널리 사용되고 있다. 기존의 AI 모델 학습에서는 학습 데이터가 처음부터 모두 주어진다고 가정한다. 그러나 소재 연구에서는 새로운 데이터의 획득 자체가 매우 고비용 작업이다. DFT 계산에는 수 시간에서 수일이 소요될 수 있으며, 실제 합성과 특성평가는 수주 이상의 시간이 소요되기도 한다. 이러한 상황에서 능동학습은 현재 모델이 가장 불확실하게 판단하는 후보를 우선적으로 선택하여 계산이나 실험을 수행함으로써 최소한의 비용으로 모델의 성능을 향상시킨다. AI 기반 소재 역설계에서의 능동학습은 일반적으로 "(1)생성형 AI에 의한 후보구조 생성 → (2)물성예측 AI 모델이 후보의 물성을 예

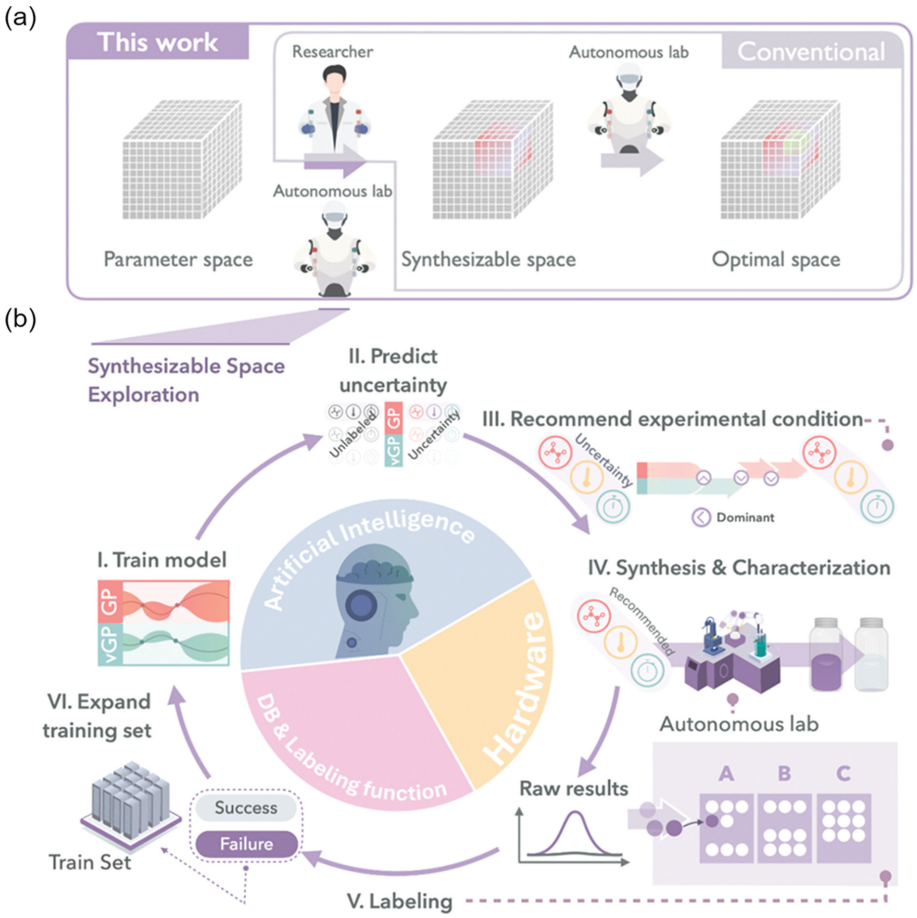


Fig. 4. (Color online) Active-learning framework for autonomous exploration of synthesizable materials space. (a) The experimentally accessible parameter space is refined into synthesizable and target-specific regions. (b) In the closed-loop workflow, probabilistic models evaluate unexplored conditions and their predictive uncertainty, and an acquisition function selects the most informative experiment. The selected condition is autonomously synthesized and characterized, and the resulting labeled data are added to the training set to iteratively update the model and refine the synthesizable space. Taken from Ref. [32] under CC BY 4.0.

측 → (3)예측 불확실성이 큰 후보 또는 목표 물성에 근접한 후보 선택 → (4)DFT 계산 또는 실험으로 실제 물성 평가 → (5)새롭게 얻어진 데이터를 학습 데이터에 추가 → (6)생성모델과 물성예측 모델 재학습"의 과정을 반복하여 탐색공간을 점진적으로 줄여감으로써 목표 물성에 적합한 구조를 생성하도록 발전한다[32,33](Fig. 4). 생성형 AI와 능동학습의 결합은 현재 대부분의 자율 소재 개발 플랫폼에서 핵심 구성요소로 사용되고 있으며, 향후 완전 자율 소재 연구의 기반 기술이 될 것으로 기대된다.

3. Foundation model

최근 인공지능 분야에서 관찰된 큰 변화 가운데 하나는 Foundation model의 등장이다. Foundation model은 대규모 데이터를 이용하여 범용적인 표현을 사전학습(Pre-training)한 후 다양한 문제에 활용하는 접근법이다. 자연어 처리에서는 GPT 계열 모델이 대표적인 Foundation model이며, 컴퓨터 비전에서는 Vision Transformer(ViT)가 대표적인 사례이다. 소재 분야에서도 Materials Project, OQMD, AFLOW, NOMAD 등 수백만 건 이상의 계산 데이터를 활용하여 범용 Materials Foundation Model을 구축하려는 연구가 활발히 진행되고 있다. Foundation model이 기존의 개별 모델과 다른 점은 특정 물성만을 예측하는 것이 아니라 다양한 작업을 하나의 모델로 수행할 수 있다는 점이다. 이러한 접근은 주어진 문제마다 별도의 모델을 구축해야 했던 기존의 방식보다 훨씬 높은 범용성을 제공한다. 최근에 Foundation model의 개념을 결정구조 생성에 적용한 사례들이 보고되고 있으며, 이는 향후 소재 AI의 발전 방향을 제시한다고 볼 수 있다[10,34].

V. 맺는글

인공지능은 소재 연구의 패러다임을 경험 기반 탐색에서 데이터 기반 설계로, 그리고 다시 목표 물성을 직접 만족하는 AI 기반 소재 역설계로 빠르게 변화시키고 있다. 초기에는 GNN을 중심으로 한 물성예측 모델이 연구를 주도하였으나, 최근에는 생성형 AI의 발전에 따라 새로운 결정구조를 직접 생성하는 기술이 소재 AI 연구의 핵심 분야로 자리 잡고 있다. 앞서 언급한 바와 같이 결정구조 생성은 일반적인 생성형 AI와 달리 crystal periodicity, space group symmetry 및 thermodynamic stability 등을 동시에 만족해야 하는 고차원 생성 문제이며, 이를 해결하기 위해 crystal representation, 물리 제약 및 생성 알고리즘이 함께 발전해 왔다.

현재 생성모델은 VAE와 GAN을 거쳐 Diffusion Model 중심으로 발전하였으며, CDVAE, DiffCSP, MatterGen과 같은 최신 소재 AI 모델은 기존 데이터베이스에 존재하지 않는 안정한 결정구조를 효과적으로 생성할 수 있음을 보여주고 있다[10,25,26]. 동시에 물성예측 AI, 생성형 AI, 강화학습, 능동학습, Physics-informed AI 및 Foundation model이 하나의 통합 플랫폼으로 결합되면서 자율 소재 연구(Autonomous Materials Discovery)가 활발히 이루어지고 있다[32,33]. 그러나, 현재의 생성형 AI 역시 완전한 해결책은 아니다. 무엇보다 생성된 구조의 합성 가능성을 정확하게 평가하는 방법론은 아직 충분히 확립되지 않았다. 대부분의 연구는 formation energy나 thermodynamic stability 등을 기준으로 후보를 선별하지만, 실제 합성과정에서는 reaction path, dynamic stability 및 공정조건 등이 중요한 영향을 미친다. 이와 같은 부분까지 포함된 AI 알고리즘이 개발되면 보다 현실적인 소재 역설계가 가능할 것이다.

한편, 현재의 발전속도를 고려할 때, 향후 소재 AI는 단순한 후보 생성 기술을 넘어 계산과학, 실험자동화 및 AI Agent를 포함하는 지능형 연구 플랫폼으로 발전할 것으로 전망된다. 이러한 발전은 신물질 발견의 속도를 획기적으로 향상시킬 뿐 아니라, 자성재료, 반도체, 이차전지 및 촉매를 포함한 다양한 첨단 소재 분야에서 새로운 연구 패러다임을 제시할 것으로 기대된다.

감사의 글

본 연구는 2026년도 교육부 및 전남광주통합특별시의 재원으로 광주앵커센터가 지원하는 지역성장 인재양성체계(앵커) 사업(2026-ANCHOR-05-001)과 과학기술정보통신부가 지원하는 광주과학기술원 전략연구사업(KH1150)의 지원을 받아 수행되었습니다.

References

[1] G. Hautier, Comput. Mater. Sci. **163**, 108 (2019).
[2] D. W. Davies, K. T. Butler, A. J. Jackson, A. Morris, J. M. Frost, J. M. Skelton, and A. Walsh, Chem **1**, 617 (2016).
[3] A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier, W. Chen, W. D. Richards, S. Dacek, S. Cholia, D. Gunter, D. Skinner, G. Ceder, and K. A. Persson, APL Mater. **1**, 011002 (2013).
[4] J. E. Saal, S. Kirklin, M. Aykol, B. Meredig, and C. Wolverton, JOM **65**, 1501 (2013).
[5] S. Curtarolo, W. Setyawan, S. Wang, J. Xue, K. Yang, R. H. Taylor, L. J. Nelson, G. L. W. Hart, S. Sanvito, M. Buongiorno Nardelli, N. Mingo, and O. Levy, Comput. Mater. Sci. **58**, 227 (2012).
[6] M. Cheng, C.-L. Fu, R. Okabe, A. Chotrattanapituk, A. Boonkird, T. H. Nguyen, and M. Li, Nat. Mater. **25**, 174 (2026).
[7] E. O. Pyzer-Knapp, M. Manica, P. Staar, L. Morin, P. Ruch, T.

Laino, J. R. Smith, and A. Cuioni, npj Comput. Mater. **11**, 61 (2025).
[8] X. Jiang, W. Wang, S. Tian, H. Wang, T. Lookman, and Y. Su, npj Comput. Mater. **11**, 79 (2025).
[9] P.-P. De Breuck, H.-C. Wang, G.-M. Rignanese, S. Botti, and M. A. L. Marques, npj Comput. Mater. **11**, 370 (2025).
[10] C. Zeni, R. Pinsler, D. Zügner, A. Fowler, M. Horton, X. Fu, Z. Wang, A. Shysheya, J. Crabbé, S. Ueda, R. Sordillo, L. Sun, J. Smith, B. Nguyen, H. Schulz, S. Lewis, C.-W. Huang, Z. Lu, Y. Zhou, H. Yang, H. Hao, J. Li, C. Yang, W. Li, R. Tomioka, and T. Xie, Nature **639**, 624 (2025).
[11] D. Levy, S. S. Panigrahi, S.-O. Kaba, Q. Zhu, K. L. K. Lee, M. Galkin, S. Miret, and S. Ravanbakhsh, Proc. Int. Conf. Learn. Represent. (2025).
[12] T. Xie and J. C. Grossman, Phys. Rev. Lett. **120**, 145301 (2018).
[13] C. Chen, W. Ye, Y. Zuo, C. Zheng, and S. P. Ong, Chem. Mater. **31**, 3564 (2019).
[14] K. Choudhary and B. DeCost, npj Comput. Mater. **7**, 185 (2021).
[15] Y. Lysogorskiy, A. Bochkarev, and R. Drautz, npj Comput. Mater. **12**, 114 (2026).
[16] Y. Park, J. Kim, S. Hwang, and S. Han, J. Chem. Theory Comput. **20**, 4857 (2024).
[17] Z. Cao, X. Luo, J. Lv, and L. Wang, Sci. Bull. **70**, 3522 (2025).
[18] A. Y.-T. Wang, S. K. Kauwe, R. J. Murdock, and T. D. Sparks, npj Comput. Mater. **7**, 77 (2021).
[19] Z. Cao, R. Magar, Y. Wang, and A. Barati Farimani, J. Am. Chem. Soc. **145**, 2958 (2023).
[20] J. Noh, J. Kim, H. S. Stein, B. Sanchez-Lengeling, J. M. Gregoire, A. Aspuru-Guzik, and Y. Jung, Matter **1**, 1370 (2019).
[21] Z. Ren, S. I. P. Tian, J. Noh, F. Oviedo, G. Xing, J. Li, Q. Liang, R. Zhu, A. G. Aberle, S. Sun, X. Wang, Y. Liu, Q. Li, S. Jayavelu, K. Hippalgaonkar, Y. Jung, and T. Buonassisi, Matter **5**, 314 (2022).
[22] H. Y. Kwon, H. G. Yoon, S. M. Park, D. B. Lee, J. W. Choi, and C. Won, Adv. Sci. **8**, 2004795 (2021).
[23] A. Nouira, N. Sokolovska, and J.-C. Crivello, arXiv:1810.11203 (2018).
[24] S. Y. Lee, S. Byeon, H. S. Kim, H. Jin, and S. Lee, Mater. Des. **197**, 109260 (2021).
[25] T. Xie, X. Fu, O.-E. Ganea, R. Barzilay, and T. Jaakkola, Proc. Int. Conf. Learn. Represent. (2022).
[26] R. Jiao, W. Huang, P. Lin, J. Han, P. Chen, Y. Lu, and Y. Liu, Adv. Neural Inf. Process. Syst. **36**, 17464 (2023).
[27] P. Govindarajan, S. Miret, J. Rector-Brooks, M. Phielipp, J. Rajendran, and S. Chandar, Digital Discovery **3**, 769 (2024).
[28] Z. Cao and L. Wang, Phys. Rev. B **113**, 024106 (2026).
[29] H. Park and A. Walsh, Nat. Mach. Intell. **8**, 1087 (2026).
[30] T. Mohanty, M. Mehta, H. M. Sayeed, B.-E. Oded, I. Pitussi, A. Borenstein, V. Srikumar, and T. D. Sparks, Integr. Mater. Manuf. Innov. **15**, 416 (2026).
[31] H. Metni, L. Ruple, L. N. Walters, L. Torresi, J. Teufel, H. Schopmans, J. Östreicher, Y. Zhang, M. Neubert, Y. Koide, K. Steiner, P. Link, L. Bär, M. Petrova, G. Ceder, and P. Friederich, Adv. Mater. **38**, e23620 (2026).
[32] N. Kim, H. J. Yoo, D. Kim, H. Lee, C. S. Hong, and S. S. Han, J. Am. Chem. Soc. **148**, 19170 (2026).
[33] N. J. Szymanski, B. Rendy, Y. Fei, R. E. Kumar, T. He, D. Milsted, M. J. McDermott, M. Gallant, E. D. Cubuk, A. Merchant, H. Kim, A. Jain, C. J. Bartel, K. Persson, Y. Zeng, and G. Ceder, Nature **624**, 86 (2023).
[34] L. Wu, W. Huang, R. Jiao, J. Huang, L. Liu, Y. Zhou, H. Sun, Y. Liu, F. Sun, Y. Ren, and J.-R. Wen, Nat. Commun. **17**, 6103 (2026).