

새로운 고분자 소재 연구 방법론 적용을 통한 고분자 물성 예측 및 합성 최적화

김성덕†

삼성전자 종합기술원

(doug.kim91@samsung.com†)

본 발표는 전자재료로 사용되는 고분자와 고분자 첨가물의 물성 예측과 합성 방법론에 대한 최근 연구 결과를 보고 하고자 한다. Machine Learning 모델을 통해 예측된 용매(good solvent)에서 continuous flow chemistry 로 반응 조건 최적화를 수행 하여 electro-optic 물질을 합성한 실례를 들어, 새로운 소재 개발 방법론 적용 전체 프로세스를 보여 주고자 한다.

용해도 모델링 측면에서 전통적인 QSPR 방법과 SVM, decision tree, graph neural network 등의 machine learning 모델링 방법을 비교한 결과, SMILES 기반 분자 정보를 input으로 활용한 neural network model으로 최적화된 모델을 찾았다. 현재 모델 정합도는 regression은 ~60% 수준이며, classification은 85% 이상까지 가능함을 보였다. 실험을 통한 반응 최적화는 미리 모든 실험 조건이 정해진 전통적인 DoE 방법보다는, Bayesian optimization 등의 방법을 적용하여 하나 하나의 실험이 진행될 때마다, 그간의 결과들을 바탕으로 optimization program이 자동으로 다음 실험 조건을 정해가는 방법으로 진행하였다. Bayesian optimization 전체 실험은 사람의 간섭없이도 continuous flow chemistry로 다량의 연속 실험 (upto 80 conditions) 을 진행하는 프로세스로 수행 되었다.