

Materials Science Agentic AI

"MatSci Agent Framework" - 재료 과학 연구를 위한 AI 에이전트 시스템

Concept Document | 2026-02-01

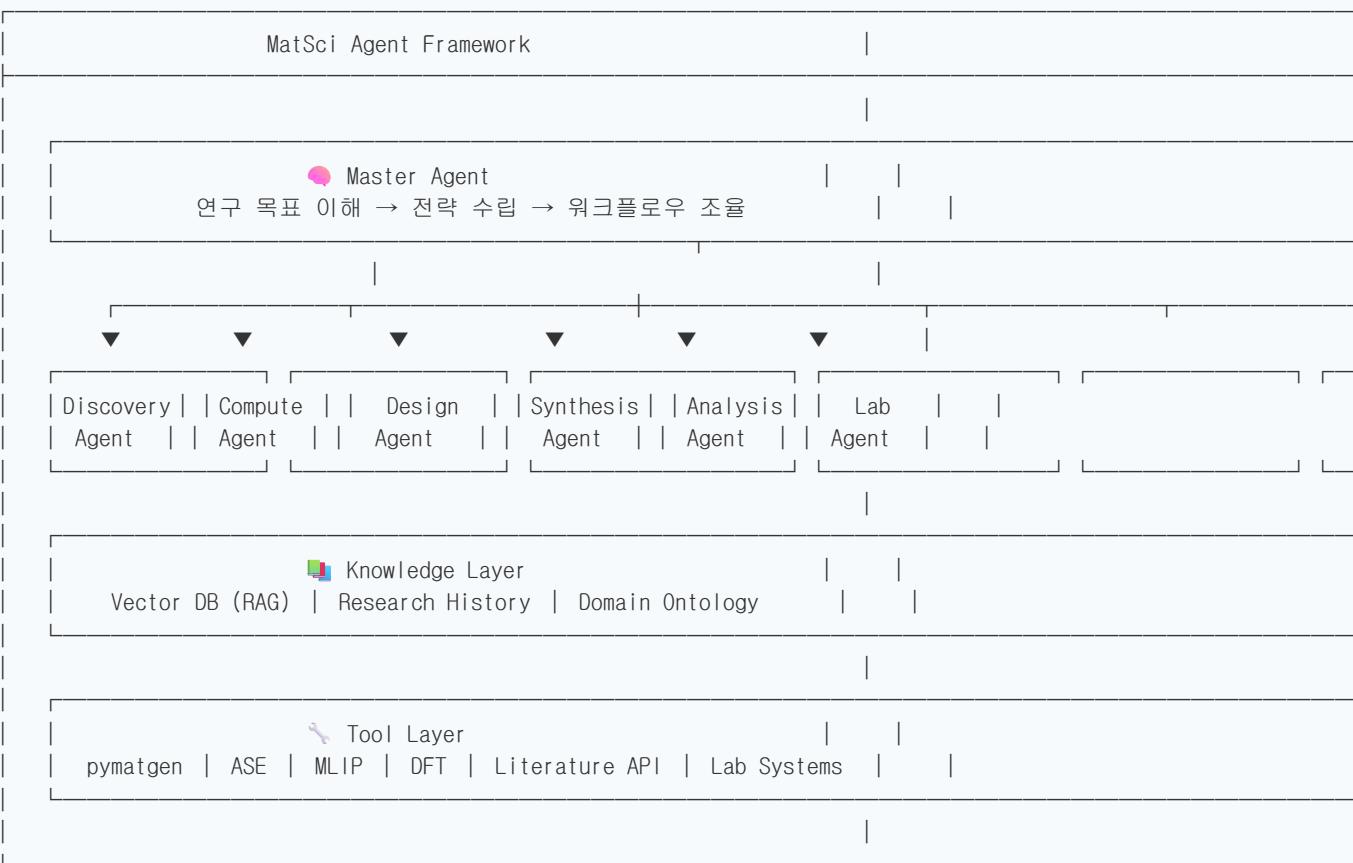
1. 개요

MatSci Agent는 재료 과학 연구의 전 과정을 지원하는 Agentic AI 시스템입니다. 데이터베이스 검색부터 계산, 설계, 합성, 분석까지 연구 워크플로우 전체를 자동화합니다.

핵심 가치

- **통합 연구 환경** - 분산된 도구들을 하나의 인터페이스로
- **자동화된 워크플로우** - 반복 작업 자동화, 연구자는 의사결정에 집중
- **지능형 추천** - 다음 실험/계산 자동 제안
- **지식 축적** - 연구 히스토리 학습 및 활용

2. 시스템 아키텍처



3. Skill 카탈로그

🔍 Discovery Skills - 탐색 및 검색

Skill	설명	데이터 소스
database_search	재료 데이터베이스 통합 검색	MP, ICSD, AFLOW, OQMD
literature_search	논문/특허 검색 및 요약	Semantic Scholar, arXiv
prior_art_check	선행 연구 및 특허 조사	Google Patents, USPTO
knowledge_graph	재료-특성-응용 연결 탐색	Custom Ontology

⚡ Computation Skills - 계산 및 시뮬레이션

Skill	설명	도구
mlip_energy	MLIP 에너지/힘 계산	UPET, M3GNet, CHGNet
dft_submit	DFT 계산 작업 제출	VASP, Quantum ESPRESSO
molecular_dynamics	MD 시뮬레이션	LAMMPS, ASE
phase_diagram	상평형도 생성	pymatgen PhaseDiagram
defect_calculation	결함 에너지 계산	pydefect, PyCDT
phonon_analysis	포논/열적 특성 계산	Phonopy

Design Skills - 재료 설계

Skill	설명	방법론
inverse_design	목표 특성 → 후보 재료	Generative Model, CGCNN
composition_opt	조성 최적화	Bayesian Opt, Genetic Algo
structure_predict	결정 구조 예측	USPEX, CALYPSO
alloy_design	합금 설계	CALPHAD, Cluster Expansion
doping_suggest	도핑 원소/농도 추천	Formation Energy Scan

Synthesis Skills - 합성 계획

Skill	설명	기능
recipe_search	합성 레시피 검색	Text-mined DB 검색
recipe_generate	합성 경로 자동 생성	규칙 기반 + LLM
precursor_select	전구체 선택	비용/가용성 최적화
condition_optimize	조건 최적화	온도/시간/분위기
scale_up_plan	스케일업 계획	Lab → Pilot → Production
safety_check	안전성 검토	MSDS, 독성 DB 연동

Analysis Skills - 분석 및 해석

Skill	설명	출력
<code>structure_analyze</code>	구조 분석	대칭성, 결합, 배위수
<code>stability_check</code>	안정성 분석	E_hull, 분해 경로
<code>xrd_predict</code>	XRD 패턴 예측/매칭	Peak 위치, 강도
<code>spectro_interpret</code>	분광 해석	XPS, Raman, IR
<code>property_correlate</code>	구조-특성 상관분석	Feature importance
<code>failure_analyze</code>	실패 원인 분석	근본 원인 + 대안

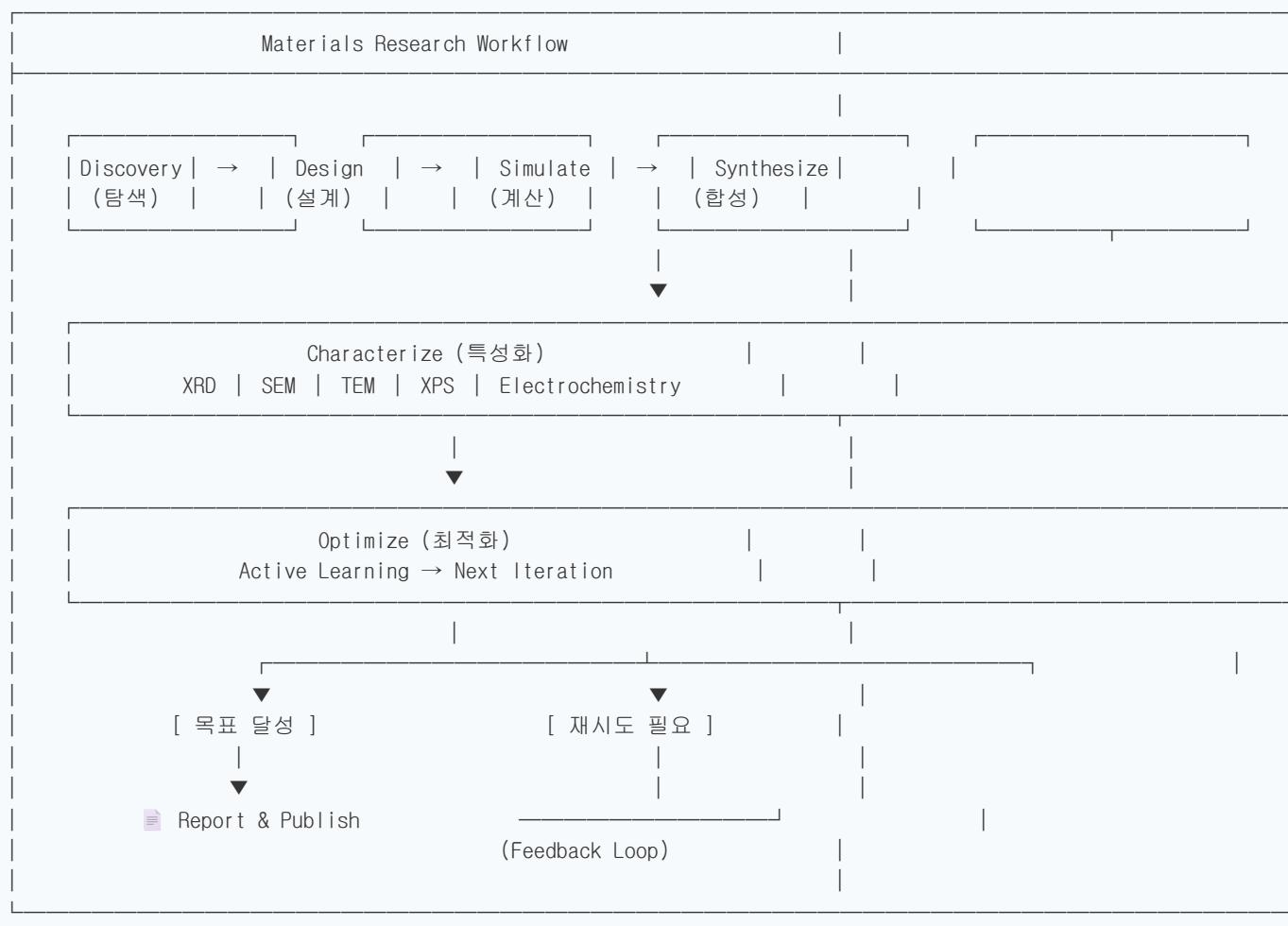
Experiment Skills - 실험 연동

Skill	설명	연동
<code>experiment_plan</code>	실험 계획 수립	DOE (Design of Experiments)
<code>hte_screen</code>	고속 탐색 설계	HTE 자동화
<code>lab_integrate</code>	자동화 실험실 연동	A-Lab 스타일 로봇
<code>result_interpret</code>	실험 결과 해석	자동 리포트
<code>next_experiment</code>	다음 실험 추천	Active Learning

 Report Skills - 문서화

Skill	설명	출력 형식
summarize_findings	연구 결과 요약	구조화된 요약
compare_materials	재료 비교 분석	비교표, 레이더 차트
generate_report	기술 보고서 생성	PDF, Word
write_paper_draft	논문 초안 작성	LaTeX, Word
patent_search	특허 가능성 조사	선행기술 리포트

4. 연구 워크플로우



5. 사용 예시

예시 1: 배터리 양극재 개발

사용자: "LiFePO4보다 에너지 밀도가 높은 양극재를 찾아줘"

Master Agent:

|→ Discovery Agent:

| | "고에너지 밀도 양극재 논문 검색... LiNiMnCoO₂, LiNiCoAlO₂ 발견"

|→ Compute Agent:

| | "후보 재료 MLIP 에너지 계산... 안정성 확인"

|→ Design Agent:

| | "Ni:Mn:Co 비율 최적화... 8:1:1 추천"

|→ Synthesis Agent:

| | "공침법 레시피 생성... 850°C, 12h, O₂ 분위기"

|→ Report:

| | "NMC811 추천, 예상 용량 200mAh/g, 합성 조건 첨부"

예시 2: 신규 열전재료 탐색

사용자: "ZT > 1.5인 친환경 열전재료 후보 추천해줘"

Master Agent:

|→ Discovery: "Pb-free 열전재료 DB 검색"

|→ Compute: "SnSe, BiCuSeO 등 ZT 계산"

|→ Design: "도핑 원소 스크리닝 (Na, K, Bi)"

|→ Analysis: "밴드 구조, 포논 분석"

|→ Report: "Top 5 후보 + 예측 ZT + 합성 난이도"

6. 기술 스택

Frontend / Interface

- Web UI (Next.js / React)
- CLI (Claude Code 스타일)
- Jupyter Notebook Integration
- VS Code Extension

Agent Framework

- LangGraph / LangChain
- Claude API (Tool Use)
- AutoGen / CrewAI
- Vector DB (Pinecone, Weaviate)

Domain Tools

- pymatgen, ASE, mp-api
- UPET, M3GNet, CHGNet (MLIP)
- VASP, Quantum ESPRESSO
- RDKit, OpenBabel (분자)

Data Sources

- Materials Project API
- ICSD, AFLOW, OQMD
- Synthesis DB (text-mined)
- Semantic Scholar API

7. 기존 도구와의 차별점

구분	기존 도구	MatSci Agent
인터랙션	단일 쿼리 → 응답	다단계 연구 워크플로우
계산 실행	수동 스크립트 작성	자동 계산 제출/모니터링
결과 처리	Raw 데이터 반환	해석 + 다음 단계 추천
데이터 검색	개별 DB 각각 검색	통합 지식 그래프
학습	없음	연구 히스토리 기반 개선
협업	단일 도구	Multi-Agent 협업

8. 로드맵

Phase	목표	주요 기능
Phase 1 MVP	핵심 기능 구현	DB 검색, MLIP 계산, 기본 합성 추천
Phase 2 확장	계산 연동 강화	DFT 워크플로우, 문헌 검색, 보고서 생성
Phase 3 자동화	실험 연동	HTE 연동, Active Learning, 자동 최적화
Phase 4 지능화	자율 연구	가설 생성, 실험 자동 설계, 논문 작성

9. 기대 효과

- 연구 속도 10배 향상 - 반복 작업 자동화
- 신소재 발견 가속화 - 체계적 탐색 + AI 추천
- 지식 축적 및 재활용 - 조직 내 연구 자산화
- 비전문가 접근성 - 도메인 지식 없이도 활용 가능

MatSci Agent Framework - Concept Document

2026-02-01