

## 연수 제안서

연구 분야	DFT 전산모사 프로그램 개발
연구 과제명	재료의 표면과 계면에 대한 전산모사와 기계학습 활용 플랫폼 개발
연수 제안 업무	Pseudo-hybrid functional 방법을 DFT 프로그램에 적용
<p>- 연수기간 : 2021.05.01. ~ 2023.04.30</p> <p>- 연수 내용</p> <ul style="list-style-type: none"><li>pseudo-hybrid functional(Phys. Rev. Research 2, 043410)을 SIESTA에 적용하는 루틴 개발</li><li>이종 접합이나 불순물이 적용된 광촉매, 전자, 광학 소재 전산모사</li></ul>	
소속 부 서 : 계산과학연구센터	
연수 책임자 : 김승철	