

연수 제안서

연구 분야	소재 전산모사 및 프로그램 개발
연구 과제명	재료의 표면과 계면에 대한 전산모사와 기계학습 활용 플랫폼 개발
연수 제안 업무	반도체 물질 전산모사와 신규 DFT 범함수 프로그램 제작
<p>(연수 내용)</p> <p>- 연수기간 : 2021.10.01. ~ 2022.09.30</p> <p>- 연수 내용 :</p> <ul style="list-style-type: none"> • 밴드갭이 있는 물질의 전자 구조, 광학 특성 계산 • 고체 이중 접합 연구를 기본으로 type-II 및 Z-scheme 광촉매 연구와 반도체 계면 연구 • 새롭게 제안된 pseudo-hybrid functional을 기존 DFT 프로그램에 적용하는 프로그램 제작 (참고문헌: "First-principles approach with a pseudohybrid density functional for extended Hubbard interactions", Physical Review Research 2, 043410 (2020)) 	
<p>소속 부 서 : 계산과학연구센터</p> <p>연수 책임자 : 김승철</p>	