

연수 제안서

연구 분야	머신러닝퍼텐셜을 이용한 비리튬계 고체전해질 탐색 연구
연구 과제명	AI기반 에너지·환경 소재 데이터 수집 및 활용기술 개발
연수 제안 업무	머신러닝퍼텐셜을 이용한 비리튬계 고체전해질 탐색 연구
<p>(연수 내용)</p> <p>- 연수기간 : 2022.03.01. - 2023.02.28. (추후 평가를 거쳐 연장 가능)</p> <p>- 연수 내용 :</p> <p>최근 전기자동차, 에너지저장장치 등의 수요 폭증으로 인해 더욱 안전하고 에너지 밀도가 높은 전고체 전지에 대한 관심이 집중되고 있으며 그 중에서도 가격 경쟁력이 높은 비리튬계 전고체 전지는 미래 전지 시장의 패러다임을 바꿀 중요한 시스템으로 꼽히고 있다. 고체 전해질은 전고체 전지의 가장 핵심적인 부품으로, 고체 상태이면서도 그 구조 내에서의 이온 이동이 액체 전해질에서의 그것만큼 매우 빨라야 한다. 하지만 고체상의 고속 이온전도체가 너무 적게 알려져 있어, 새로운 이온전도체를 찾아내는 것이 시급한데, 제일원리 계산을 이용한 이온전도도 예측은 계산 비용이 너무나 많이 들어 대규모 소재 탐색 연구에 부적합하다. 이에 기계학습법을 이용한 시뮬레이션 방식인 머신러닝 퍼텐셜을 이용하여 고체전해질 탐색 연구를 다음과 같이 진행하고자 한다.</p> <p>1. 머신러닝 퍼텐셜 개발: 머신러닝 퍼텐셜은 화학 성분계가 달라지면 새로 학습하여야 한다는 단점을 가지고 있는데, 성분계가 달라지더라도 학습에 사용되는 계산 비용을 줄일 수 있는 전이가능한 모델을 개발하고자 한다.</p> <p>2. 머신러닝 퍼텐셜을 이용한 고체전해질 탐색: 학습된 화학 성분계로부터 결정질 및 비정질 이온전도체를 찾아내고, 화학적/전기화학적 안정성을 분석하여 새로운 고체전해질 후보를 발굴한다.</p> <p>※ 연구 정보의 기밀 유지</p>	
소속 부 서 : 계산과학연구센터	
연수 책임자 : 이병주	