

연수 제안서

연구 분야	에너지 및 환경소재 제일원리계산 계산
연구 과제명	AI 기반 에너지 및 환경소재 데이터 수집 및 활용기술 개발
연수 제안 업무	제일원리 기반 태양전지 및 다공소재 시뮬레이션
<div>(연수 내용)</div> <ul style="list-style-type: none">● AI 기반의 에너지 환경소재 활용기술을 개발하기 위해서는 제일원리와 같은 정확한 계산 방법으로 질 높은 데이터를 생성할 필요가 있음.● 뿐만 아니라 다양한 에너지 환경소재에 대한 이해를 높이기 위해서 제일원리계산 기반의 연구가 진행되어야 함.● 본 연수를 통해 제일원리계산을 이용하여 태양전지 소재의 기본 물성과 준안정상에 대한 연구를 진행할 계획.● 또한 가스 흡착 및 저장용 소재로서 많이 활용되고 있는 다공성 소재의 가스 흡착 특성을 예측하고 흡착 메커니즘을 이해하는 연구를 수행하여 향후 AI 연구에 활용될 수 있는 양질의 데이터를 생성할 계획임. <p>- 연수기간 : 2022년 9월 1일 - 2023년 8월 31일</p> <p>※ 연구 정보의 기밀 유지</p>	
<div>소속 부 서 : 계산과학연구센터</div> <div>연수 책임자 : 선임연구원 이 정 훈</div>	