

연수 제안서

연구 분야	제일원리 및 분자동역학 계산을 통한 이차전지 소재 분석 및 AI활용
연구 과제명	이온전도체 전산모사를 위한 머신러닝퍼텐셜 기술 및 플랫폼 개발
연수 제안 업무	제일원리 및 분자동역학 계산을 통한 이차전지 소재 분석 및 AI활용
<p>(연수 내용)</p> <p>- 연수기간 : 2022.09.01. - 2023.08.31. (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 하며, 화학적/전기화학적 안정성이 우수해야 한다. 이러한 모든 조건을 만족하는 고체전해질 소재를 개발을 가속하기 위해, 실험을 거치지 않고 소재의 물성을 파악할 수 있는 제일원리계산 전산모사 방법론을 사용한 연구를 진행하고자 한다.</p> <p>1. 고체전해질 및 기타 이차전지 소재 물성 분석: 제일원리 및 분자동역학 계산을 이용하여 고체전해질 및 기타 이차전지 소재의 이온전도 메커니즘, 열적 안정성, 화학적/전기화학적 안정성을 분석하고, 충방전 거동을 설명.</p> <p>2. 제일원리 계산 데이터를 이용한 기계학습법 개발: 제일원리계산 결과 데이터를 이용하여 머신러닝퍼텐셜, 구조-물성 예측 모델 등 소재분야 기계학습법 개발에 응용.</p> <p>※ 연구 정보의 기밀 유지</p>	
소속 부 서 : 계산과학연구센터	
연수 책임자 : 이병주	