

연수 제안서

연구 분야	제일원리계산 및 소재데이터베이스 구축
연구 과제명	재료 계면에 대한 전산모사와 기계학습 활용 플랫폼 개발
연수 제안 업무	다공성 소재 표면 연구 및 데이터베이스 구축
<p>(연수 내용)</p> <p>- 연수기간 : 2021년 1월 1일 - 2022년 12월 31일</p> <p>- 연수 내용 :</p> <ul style="list-style-type: none">● 지구 온난화의 주범인 메탄 및 이산화탄소 등과 같은 유해가스를 포집할 수 있는 소재 개발은 매우 중요한 연구 주제 중 하나임.● 화학적으로 반응성이 높은 다공성 소재의 표면을 활용한 유해가스 포집연구가 활발히 진행중.● 다공성 소재는 금속과 유기물의 결합으로 격자를 이루기 때문에 무한대에 가까운 조합으로 소재를 이룰 수 있음.● 따라서 다공성 소재 표면 특성에 대한 데이터베이스를 구축하는 것이 향후 기계학습을 이용한 다공성 소재 개발에 필수적임.● 이에 본 연수를 통해 다공성 소재 데이터베이스를 구축하는 플랫폼을 개발하고자 함.● 이렇게 구축된 다공성 소재 데이터베이스를 활용하여 유망한 유해가스 포집용 다공성 소재 개발 및 다양한 실험-계산 협력 연구 추진.	
소속 부 서 : 계산과학연구센터	
연수 책임자 : 선임연구원 이 정 훈	