

# 연수 제안서

연구 분야	광촉매 및 형광체의 제1원리 계산
연구 과제명	Multifunctional catalytic filtration용 다차원 나노소재 interface engineering 기술 개발
연수 제안 업무	전산모사에 기반한 연구
<p>(연수 내용)</p> <p>- 연수기간 : 2021.04.01. ~ 2022.03.31</p> <p>- 연수 내용 : 제 1원리 계산을 이용하여, 란탄족 3가 원소가 도핑된 상향변환 형광 나노구조체(upconversion nanostructures)에서 란탄족 3가 원소의 4f 오비탈 에너지 준위 예측하고, 이에 광촉매가 장식된 상향변환 형광 나노구조체 (photocatalyst-decorated upconversion nanoparticles)의 계면 모사 및 이의 안정성 평가를 진행할 계획임. 이러한 전산모사 연구를 통해 상향변환 형광체/광촉매 이중상 나노구조체에서 일어나는 적외선 입사광에 의한 청색 가시광선 발광 기전을 규명할 계획임. 또한, 이차원의 metal sulfide의 여러 가지 물리적 특성에 따른 광특성을 예측하고 우수한 광센싱 재료 screening을 위한 데이터베이스 구축 예정이며, 사용될 코드는 VASP 및 WIEN2k임.</p>	
소속 부 서 : 물질구조제어연구센터	
연수 책임자 : 박 경 원	