

연수 제안서

연구 분야	제일원리계산 및 인공지능을 통한 이차전지 소재 개발
연구 과제명	기계학습퍼텐셜을 활용한 고체전해질 및 이차전지용 신소재 개발
연수 제안 업무	제일원리계산 결과를 활용한 소재 인공지능 모델 개발
<p>(연수 내용)</p> <p>- 연수기간 : 2023.01.01. - 2023.12.31. (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 핵심구성요소인 고체전해질의 개발이 매우 중요해지고 있다. 고체전해질은 고체 구조 내에서의 이온 이동이 액체 전해질에서의 그것만큼 매우 빨라야 하며, 화학적/전기화학적 안정성이 우수해야 한다. 이러한 모든 조건을 만족하는 고체전해질 소재의 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: 제일원리계산 방법론을 이용하여 고체전해질 및 기타 이차전지 소재의 열적 안정성, 화학적/전기화학적 안정성을 분석하고, 충방전 거동을 설명.</p> <p>2. 제일원리 계산 데이터를 이용한 분자동역학 퍼텐셜 개발: 제일원리계산 결과 데이터를 학습하여 그 정확도를 재현할 수 있는 분자동역학용 퍼텐셜을 개발하고 이를 이용하여 복잡한 구조에서의 소재물성 파악.</p> <p>※ 연구 정보의 기밀 유지</p>	
소속 부 서 : 계산과학연구센터	
연수 책임자 : 이병주	