

연수 제안서

| | |
|--|---|
| 연구 분야 | 제일원리계산/머신러닝 분야 |
| 연구 과제명 | 계산과학-조합실험-첨단분석 기술 기반 양자 알케미 촉매 개발 (과기정통부 미래소재디스커버리사업) |
| 연수 제안 업무 | 제일원리계산 및 머신러닝기술 이용 합금 촉매 설계 |
| <p>(연수 내용)</p> <ul style="list-style-type: none"> ◎ 본 연수에서는 과기정통부 미래소재디스커버리사업 일환으로 계산과학(주로 제일원리계산)을 이용하여 과산화수소(H_2O_2) 및 암모니아(NH_3) 합성용 합금계 촉매 설계를 주로 수행 예정 ◎ 현재 본 연구팀이 보유한 Catalysis Genome Map에서 비백금계 촉매를 대체할 수 있는 여러 저가형 합금 촉매를 제안한 상태에 있으며, 제일원리계산을 이용하여 이 촉매의 과산화수소 및 암모니아 합성 반응 메커니즘 해석 ◎ 규명된 반응 메커니즘을 통한 신규 합금 촉매 설계 ◎ 본 연구는 KIST내 실험팀 및 고려대, KAIST 등의 실험 연구팀과 공동연구 수행 ◎ 현재 본 연구팀은 금속 촉매 관련 데이터베이스를 구축하고 있고, 연수 기간동안에 얻어진 연구결과는 모두 데이터베이스화 할 예정. 이를 기반으로 촉매 설계용 머신러닝 기술 개발 연구도 진행 중이며 본인이 원할 경우 관련 공동연구도 수행 가능 | |
| <p>소속 부 서 : 계산과학연구센터</p> <p>연수 책임자 : 한상수</p> | |