

연수 제안서

연구 분야	제일원리계산 및 분자동역학 계산
연구 과제명	다공소재 수소 흡착 엔탈피 및 기공크기 조절을 통한 수소저장 성능 극대화 연구
연수 제안 업무	제일원리 및 분자동역학 기반 다공소재 시뮬레이션
<p>(연수 내용)</p> <ul style="list-style-type: none">수소 저장용 다공소재 개발을 위해서는 선행적인 제일원리 계산이 필요.이에 본 연수를 통해 제일원리 기반의 다공소재 시뮬레이션 연구를 수행할 계획.먼저, 제일원리 계산을 이용하여 안정한 다공소재 구조를 찾고 이 구조들의 수소 흡착 엔탈피를 예측.하지만 제일원리 계산으로는 수소 흡착 profile (isotherm)을 예측할 수 없음.따라서 분자동역학 방법을 이용하여 유망한 후보군들의 수소 흡착 isotherm을 예측할 수 있는 GCMC (Grand canonical monte carlo) 계산을 수행할 계획.이를 통해 수소 흡착 특성이 좋고 전체 저장량이 큰 다공소재를 예측하고 합성을 시도할 계획. <p>- 연수기간 : 2022년 5월 1일 - 2023년 4월 30일</p> <p>※ 연구 정보의 기밀 유지</p>	
소속 부 서 : 계산과학연구센터	
연수 책임자 : 선임연구원 이 정 훈	