

# 신소재 설계를 위한 모델링 및 데이터 마이닝 기술

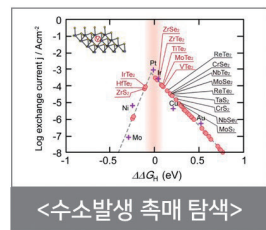
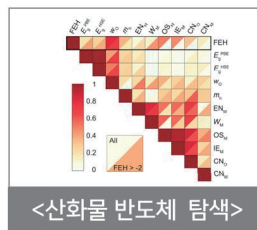
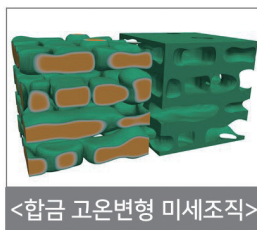
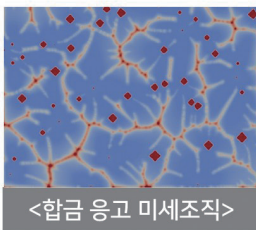
## 트렌드

소재 모델링, 소재정보학과 정밀분석을 연계한 신소재 탐색·개발 가속화



## 기술내용

메조스케일 미세조직 모델링 : 전산열역학 및 phase-field 모델 기반 구조용 소재 미세조직 예측  
 제일원리계산 기반 소재설계 : 밀도범함수 이론 및 데이터 기반 에너지·환경 신소재 탐색 및 설계



## 응용분야

주요 적용처		개발내용
		<ul style="list-style-type: none"> <li>전산열역학 데이터베이스 구축 및 CALPHAD 기반 소재설계</li> <li>경량(Al, Mg)합금 주조 미세조직 예측 기술</li> <li>금속 적층제조(additive manufacturing) 미세조직 예측 기술</li> </ul>
		<ul style="list-style-type: none"> <li>수소발생 촉매 소재 스크리닝 및 전기화학반응 예측 기술</li> <li>태양전지 흡수체용 신소재 탐색 및 전자수송특성 예측 기술</li> <li>P-type 산화물 반도체 신물질 탐색 및 특성예측 기술</li> </ul>

## 협력희망

- 멀티스케일 소재 모델링 활용 신소재 개발 공동연구
  - 구조용 소재 제조공정 시 미세조직 예측, 기능성 신소재 탐색 및 물성 예측
- 기술이전(소재 모델링 노하우 및 소프트웨어 활용 교육)

# 신소재 설계를 위한 모델링 및 데이터 마이닝 기술

## 기술 개요

- 에너지·환경용 기능성 미래소재와 구조용 신소재 개발 효율화 및 신속화 요구
- 4차 산업혁명 시대 진입에 따라 데이터 구동형 소재 R&D 및 QSPR 기반 소재설계 기술 개발 필요
- Hard modeling(대용량 시뮬레이션)과 soft modeling(인공지능)이 소재 R&D의 핵심으로 대두



소재개능연구전략 (Materials Genome Initiative)

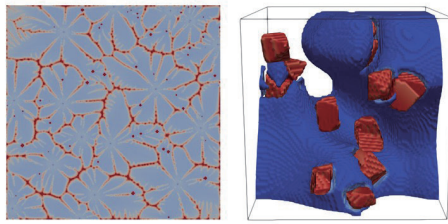
통합전소재료공학 (Integrated Computational Materials Engineering)

소재정보학 (데이터과학 + 인공지능 기술) (Materials Informatics)

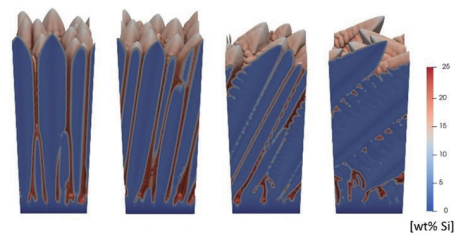
## 기술 특장점

### 핵심1 CALPHAD 방법론 및 phase-field 모델 기반 구조용 소재 미세조직 예측 및 소재설계 기술

- CALPHAD 열역학/확산데이터베이스 생성, 전산열역학 활용 소재설계, 미세조직 예측 및 해석 기술
- 실용 구조용 다상, 다원계 합금 제조공정 시 시공간적 미세조직 변화의 phase-field 모델링 기술



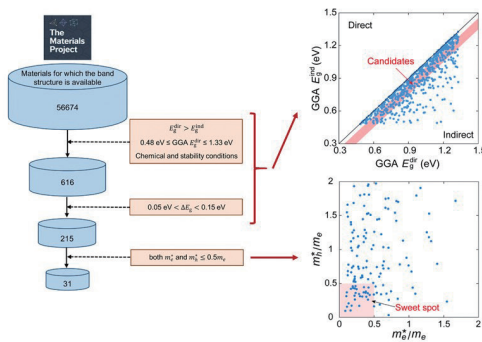
과공정 시 합금 응고 미세조직 형성의 2, 3차원 phase-field 모델링



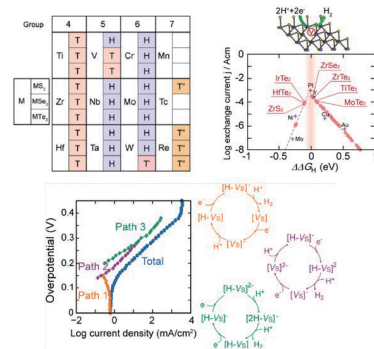
적층제조공정 AlMgSi 합금 미세조직 형성의 3차원 phase-field 모델링

### 핵심2 제일원리계산 및 대용량 소재 데이터 기반 에너지·환경 신소재 탐색 및 소재물성 예측 기술

- 제일원리계산을 이용한 수소발생 촉매용 2차원 소재 스크리닝 및 수소발생 전기화학 반응 메커니즘 해석
- 제일원리계산과 소재 데이터 마이닝을 활용한 광전흡수체 소재, P-type 산화물 반도체 신물질 탐색과 물성 예측



제일원리계산과대용량 소재 데이터 마이닝을 통한 광전흡수체 소재 탐색



제일원리계산을 활용한 2차원 촉매 탐색과 반응기구 해석

## 논문

- Phase-field 모델링과 정밀분석을 연계한 경량합금 미세조직 예측 및 해석 (Scientific Report 9, 3981 (2019); Scripta Materialia 리뷰중 (2019); JOM (Journal of Metal) 리뷰중 (2019))
- 제일원리계산을 활용한 2차원 촉매소재 탐색 및 촉매반응기구 해석 (ACS Catalysis 8, 4508 (2018); The Journal of Physical Chemistry Letters 9, 2049 (2018); ChemSusChem 12, 2671 (2019))
- 제일원리계산과대용량 소재물성 데이터 마이닝을 활용한 광전흡수체 및 p-type 산화물 반도체 신물질 탐색 및 소재물성 예측 (Physical Review Applied 10, 044013 (2018); Chemistry of Materials 31, 4072 (2019); Chemistry of Materials 31, 5475 (2019))