

연료전지 기술과 분자 모델링

박치훈[†]

경남과학기술대학교

(chpark@gntech.ac.kr[†])

최근의 컴퓨터 하드웨어 및 소프트웨어 기술의 급격한 발달은 전통적인 컴퓨터 관련 분야뿐만 아니라, 컴퓨터를 실험 및 분석 도구로서 사용하는 통계학, 머신러닝, 전산모사 등의 다른 학문 분야에도 급격한 기술 진보를 가져왔다. 특히, 컴퓨터를 이용하여 재료, 유체 등의 거동 및 특성을 분석하는 전산모사 기술은, 모사 대상의 크기 및 관심 시간 영역에 따라서 계산 시간이 급격하게 증가를 하게 된다. 그런데, 최근의 컴퓨터 기술의 발달은 더 값싼 시스템을 이용하여 더 짧은 시간에 계산을 완료할 수 있도록 함으로써, 전산모사에 대한 진입장벽을 낮추고, 더 많은 연구자들이 전산모사에 관심을 가질 수 있는 환경을 만들어 주었다.

본 발표에서는 이러한 전산모사 기술 중에서 원자 및 분자를 계산 대상으로 하여 화학 물질의 내부 구조를 파악하고 그 특성을 계산할 수 있는 전산모사기술인 분자 모델링을 대상으로 하여, 대표적인 신재생에너지 기술 중 하나인 연료전지에서 어떻게 활용되고 있는지를 소개하고자 한다.