

새로운 분자모사-머신러닝 전략: 다양한 흡착제의 온도별 실험 메탄 흡착등온선 예측

김서율, 오광현, 신민우, 배윤상[†]

연세대학교

(mowbae@yonsei.ac.kr[†])

최근에 대용량 분자모사 결과에 머신러닝을 적용하여 기체 저장 및 분리를 위한 최적의 흡착제를 찾기 위한 연구들이 보고되었다. 이 연구들에서 개발된 알고리즘은 분자모사보다 훨씬 빠르게 흡착 성능을 예측해주지만, 흡착제의 결정구조로부터 흡착 성능을 예측해준다는 기능적 측면에서 분자모사와 큰 차이가 없었다. 더군다나 이전 연구들에서 머신러닝에 사용된 구조인자들의 대부분은 실험으로 측정 불가능한 것이어서 defect 등 구조적 불완전성을 함유한 구조나 무정형의 구조 등에는 적용이 불가능했다. 본 연구에서는 기존 연구의 한계를 극복할 수 있는 새로운 분자모사-머신러닝 전략을 제시하였다. 그 예시로서 한 온도에서의 메탄 흡착등온선으로부터 다양한 온도에서의 메탄 흡착등온선을 정확히 예측해줄 수 있는 알고리즘을 개발하였고, defect 등 구조적 불완전성을 함유한 구조나 무정형의 구조를 지닌 흡착제의 실험 흡착등온선에도 성공적으로 적용 가능함을 확인하였다.

Acknowledgments

This work was supported by the National Research Foundation of Korea under Grant (NRF-2019R1A2C2002313).