

문서번호 : 바켄 제 2021-1-12

2021.1.12

수 신 : Gaussian 소프트웨어 사용자

참 조 :

발 신 : (주) 바이텍켄스

제 목 : Gaussian 소프트웨어 교육건. (Advanced course)

1. 귀 사(교)의 일익 번창함을 기원합니다.
2. (주) 바이텍켄스는 화학, 제약 및 바이오분야에 관련된 전문 소프트웨어 및 데이터베이스를 국내공급 및 기술지원을 제공하고 있습니다. (<http://www.bitekchems.com>)
3. 금번 폐 사에서는 그 동안 판매 해오던 Gaussian 소프트웨어에 대하여 기본사용자교육 및 전문가를 모시고 OLED 분야 연구에 Gaussian 적용 교육을 실시하고자 합니다.  
관심 있는 분의 많은 참석 바랍니다.

----- 다 음 -----

1. 교육명 : Gaussian 을 이용한 OLED 연구적용 및 실습
  - Gaussian Software
  - GaussView Software
2. 일 시 : 2021 년 2 월 25 일
3. 장 소 : 바이텍켄스 교육실
4. 교육비 :
  - Gaussian SW 를 바이텍켄스에서 구입한 고객 (1 Copy 당 1 人 적용)
    - (1) 학 교 - ₩ 330,000(부가세포함)
    - (2) 기업/정부기관 - ₩ 770,000(부가세포함)
  - Gaussian SW 를 바이텍켄스에서 구입하지 않은 고객
    - (1) 학 교 - ₩ 550,000(부가세포함)
    - (2) 기업/정부기관 - ₩ 990,000(부가세포함)
5. 기타
  - 점심 제공
  - 주차비 제공
  - 개인 노트북 지참
  - 생활 방역 정부 지침 준수

- 별 첨 : 1) 교육일정  
2) 참가 신청 안내  
3) 교육비 결제 안내  
4) 김동욱 교수 약력 . 끝



## 1. 교육 일정

시간	일정	비고
10:00 - 10:30	Introduction	
10:30 - 11:30	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. GaussView Basics</li> <li>2. Building Molecules</li> <li>3. Opening, Displaying, and Saving Molecules and Views</li> <li>4. Computational Modeling</li> <li>5. Gaussian               <ol style="list-style-type: none"> <li>5-1 Method</li> <li>5-2 Basis set</li> <li>5-3 Job Type</li> </ol> </li> </ol>	Presentation (정진희 과장)
11:30 - 12:30	점심	
12:30 - 15:00	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. <b>Materials modeling overview</b></li> <li>2. <b>OLED molecule modeling I</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) <b>Structure optimization: Neutral, cation, anion</b></li> <li>2) <b>HOMO, LUMO, IP, EA</b></li> <li>3) <b>Substituent effect on the electronic structures</b></li> <li>4) <b>Hole/electron transport</b></li> </ol> </li> </ol>	Presentation (김동욱 교수)
	<ol style="list-style-type: none"> <li>3. <b>OLED molecule modeling II</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) <b>Fundamentals for molecules in the excited states</b></li> <li>2) <b>Structure optimization: S<sub>1</sub> vs T<sub>1</sub> states</b></li> <li>3) <b>HOMO/LUMO vs Natural transition orbital (NTO)</b></li> </ol> </li> </ol>	Presentation (김동욱 교수)
15:00 - 17:00	<b>Exercise</b> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) <b>OLED molecules: Host molecules</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Structure optimization</li> <li>- HOMO &amp; LUMO vs IP &amp; EA</li> <li>- transfer integral, reorganization energy</li> </ul> </li> <li>2) <b>OLED molecules: Guest emitters</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Structure optimization</li> <li>- NTO</li> </ul> </li> </ol>	Hands on Session

## 2. 참가 신청 안내

접수: info@bitekchems.com

이메일 본문에 아래의 7가지 사항을 기재하여 신청해주시기 바랍니다.

① 기관명(소속)	
② 성명(직책)	
③ 전화번호	
④ E-Mail 주소	
⑤ Gaussian 구매 여부	
⑥ 교육비 결제방법 (카드 or 입금)	
⑦ 교육비 결제금액	

\* 접수마감: 2월 16일(화) 오후 5시

\* 5인 미만 신청 시 교육이 취소될 수 있습니다.

\* 생활 방역 지침에 의해 참석자는 제한될 수 있으며 선착순 접수로 진행됩니다

## 3. 교육비 결제 안내

① 카드 결제는 신한 카드와 비씨카드로 가능합니다. (교육일 카드 지참)

② 계좌이체 시 전자세금계산서를 발행합니다.

전자세금계산서를 받으실 메일 주소와 사업자등록증을 참가 신청 메일에 첨부하여주시기 바랍니다.

별도 발행 요청일이 없는 경우 교육일에 발행될 예정입니다.

#### 4. 김동욱 교수 약력

### Curriculum vitae

Dongwook Kim

Associate Professor

Department of Chemistry, Kyonggi University

#### Education

1989.3-1996.2 Bachelor. Department of Chemistry, Yonsei University

1996.3-1998.2 Master. Department of Chemistry, KAIST (Theoretical/ computational/ Physical Chemistry) Advisor: Late Prof. Mu Shik Jhon

2000.3-2003.8 Ph. D. Department of Chemistry, POSTECH (Theoretical/ computational/ Physical Chemistry) Advisor: Prof. Kwang S. Kim

#### Career

1991.2-1993.8 Military Service at Republic of Korean Army

1999.2-2000.2 Researcher, Center for Superfunctional Molecules (CSM), Postech

2003.9-2004.11 Post doc. Center for Superfunctional Molecules (CSM), Postech

2005.4-2007.1 Post doc. Department of Chemistry, Northwestern Univ. Advisor: Prof. George C. Schatz (Editor-in-chief of J. Phys. Chem.)

2007.2-2010.2 Post doc./Research Scientist II (staff scientist) School of Chemistry and Biochemistry, Georgia Institute of Technology (GaTech) Advisor: Prof. Jean-Luc Brédas

2016.3-2016.12 Visiting Professor, PSE, Solar center, KAUST, Thuwal, KSA (with Prof. Jean-Luc Brédas)

2010.3-present Assistant/Associate Professor Department of Chemistry, Kyonggi University

#### Research interests

Non-covalent weak intermolecular interactions: cation- $\pi$ , anion- $\pi$ ,  $\pi$ - $\pi$  interactions, etc.

Theoretical characterization of light-emitting dopants including Thermally activated delayed fluorescence (TADF) emitter in OLEDs and design of new dopants

Aggregation effect of light-emitting dopants in OLEDs

Theoretical characterization of low-band gap polymers for efficient OPVs.

Theoretical investigation of various other physical phenomena in OLEDs and OPVs