

문서번호 : 바켄 제 2022-10-1

수 신 : Gaussian 소프트웨어 사용자

참 조 :

발 신 : (주) 바이텍켄스

제 목 : Gaussian 소프트웨어 교육 건. (Advanced course)

1. 귀 사(교)의 일익 번창함을 기원합니다.
2. (주) 바이텍켄스는 화학, 제약 및 바이오 분야에 관련된 전문 소프트웨어 및 데이터베이스를 국내 공급 및 기술 지원을 제공하고 있습니다. (<http://www.bitekchems.com>)
3. 금번 폐사에서는 그 동안 판매 해오던 Gaussian 소프트웨어에 대하여 기본 사용자 교육 및 전문가를 모시고 OLED 분야 연구에 Gaussian 적용 교육을 실시하고자 합니다.
관심 있는 분의 많은 참석 바랍니다.

----- 다 음 -----

1. 교육명 : Gaussian 교육 및 실습
 - Gaussian Software
 - GaussView Software
2. 일 시 : 2022년 10월 28일
3. 장 소 : 바이텍켄스 교육실
4. 교육비 :
 - Gaussian SW 를 바이텍켄스에서 구입한 고객 (1 Copy 당 1인 적용)
 - (1) 학 교 - ₩ 440,000(부가세포함)
 - (2) 기업/정부기관 - ₩ 880,000(부가세포함)
 - Gaussian SW 를 바이텍켄스에서 구입하지 않은 고객
 - (1) 학 교 - ₩ 770,000(부가세포함)
 - (2) 기업/정부기관 - ₩ 1,500,000(부가세포함)
5. 기타
 - 점심 제공
 - 주차 지원
 - 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"> 1. GaussView Basics 2. Building Molecules 3. Opening, Displaying, and Saving Molecules and Views 4. Computational Modeling 5. Gaussian <ol style="list-style-type: none"> 5-1 Method 5-2 Basis set 5-3 Job Type | Presentation (정진희 차장) |
| 11:30 - 12:30 | 점심 | |
| 12:30 - 15:00 | <ol style="list-style-type: none"> 1. Materials modeling overview 2. OLED molecule modeling I <ol style="list-style-type: none"> 1) Structure optimization: Neutral, cation, anion 2) HOMO, LUMO, IP, EA 3) Substituent effect on the electronic structures 4) Hole/electron transport | Presentation (김동욱 교수) |
| | <ol style="list-style-type: none"> 3. OLED molecule modeling II <ol style="list-style-type: none"> 1) Fundamentals for molecules in the excited states 2) Structure optimization: S₁ vs T₁ states 3) HOMO/LUMO vs Natural transition orbital (NTO) 4) bond dissociation (BD) energy, reaction activation energy barrier (E_a) for BD | Presentation (김동욱 교수) |
| 15:00 - 17:00 | Exercise <ol style="list-style-type: none"> 1) OLED molecules: Host molecules <ul style="list-style-type: none"> - Structure optimization - HOMO & LUMO vs IP & EA - transfer integral, reorganization energy 2) OLED molecules: Guest emitters <ul style="list-style-type: none"> - Structure optimization - NTO - BD/E_a for BD | 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 결제방법(카드 or 입금) | |
| ⑦ 결제금액 | |

* 접수마감: 10월 20일(목) 오후 5시

* 5인 미만 신청 시 교육이 취소될 수 있습니다.

3. 교육비 결제 안내

1) 카드 결제는 피시스를 활용하며 결제 링크를 교육일 전에 전달드립니다.

2) 계좌이체 시 전자세금계산서를 발행합니다.

전자세금계산서를 받으실 메일 주소와 사업자등록증을 참가 신청 메일에 첨부하여주시기 바랍니다.

별도 발행 요청일이 없는 경우 교육일 하루 전에 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- π , anion- π , π - π 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