

소듐 이온 배터리 양극 재료로서 Fluoranil
유도체의 산화환원 특성 연구를 위한 계산화학
기반 연구

정구현, 김기철[†]
건국대학교

(kich2018@konkuk.ac.kr[†])

화석 연료를 사용함에 따라 발생하는 대기오염에 대한 염려가 점점 더 증가하고 있다. 이로 인해 세계적으로 전기차에 대한 수요가 증가하면서, 지속 가능한 에너지 공급을 위한 리튬 이온 배터리가 폭발적인 관심을 끌게 되었다. 하지만, 리튬 이온 배터리의 높은 충전 용량과 에너지 밀도에도 불구하고, 리튬 이온 배터리는 폭발하기 쉬운 특성과 배터리 가격의 1/4를 차지하는 리튬의 가격 때문에 다양한 분야에 적용되는 것에는 한계가 있다. 최근에 이러한 한계를 극복하기 위하여, 지구상에 풍부한 소듐을 이용하는 소듐 이온 배터리가 특별한 관심을 끌게 되었다. 본 연구에서는 계산화학방법론을 이용하여 유기물질인 fluoranil 기반의 다양한 유도체에 대한 전기화학적 산화환원특성을 연구하였으며, 이를 통해 소듐 이온 배터리 양극 재료로서의 가능성 및 효율적인 설계의 방향을 제시하였다.