

에너지 저장 및 전환을 위한 불균일 촉매 물질의  
이론적 이해 및 설계

유종석<sup>†</sup>

서울시립대학교

(jsyoo0927@gmail.com<sup>†</sup>)

최근 들어 컴퓨터 성능의 급속적인 발전과 함께 계산과학의 응용범위는 단순계에서 복잡계까지 빠르게 확장하고 있다. 이에 본인은 밀도범함수이론과 미시반응속도모델링 기법들을 활용하여 다양한 촉매 물질들의 활성 추세를 이론적으로 해석하고, 또 이를 바탕으로 새로운 촉매 물질을 예측하는 연구에 대해 발표하고자 한다. 구체적으로는 수소 저장을 위한 포름산과 이산화탄소간의 상호 전환 반응 및 물에서부터 수소를 생산하기 위한 전기화학적 산소 생성 반응을 예시로 본인의 방법론을 설명하고자 한다.