

에너지 및 환경 분야에의 응용을 위한
계산화학기반의 물질설계

김기출[†]

건국대학교

(kich2018@konkuk.ac.kr[†])

화석연료의 사용에 따른 환경적인 문제와 고갈되어가는 화석연료를 대체하기 위한 신재생에너지의 개발에 대한 전세계적인 관심과 함께 친환경에너지 분야는 최근 가장 활발히 연구되는 분야 중의 하나이다. 특히, 생산된 신재생에너지를 저장하기 위한 기술은 배터리 및 수소저장 등의 다양한 형태로 연구 및 발전되어 왔으며, 이산화탄소를 비롯하여 환경 및 인체에 유해한 다양한 기체를 포집하기 위한 노력은 metal-organic framework 등의 기공물질 개발로 이어져 왔다. 본 발표에서는 이러한 에너지 저장 기술 및 유해기체 포집 기술의 성능 극대화를 위한 체계적인 물질 설계 방법에 대해 논의하고자 하며 이를 통해 성능 향상을 위해서 설계된 물질이 지녀야 할 특성을 설명하고자 한다. 효과적인 물질설계 및 성능 분석을 위해, 양자역학기반의 계산과학 기술 (밀도함수이론, 몬테카를로 법칙)을 도입하였으며, 이를 통해 근본적인 분석이 가능함을 알 수 있다. 본 발표를 통해 소개된 연구들은 체계적인 설계를 위한 기본 방향을 제시한다고 할 수 있다.