

## Mechanistic Studies of Enhanced Oxygen Incorporation near the Grain Boundary on Yttria-Stabilized Zirconia

김경학, 권형욱, 한정우\*

서울시립대학교 화학공학과

(jwhan@uos.ac.kr\*)

Grain boundary (GB)는 결정에서 구조는 같지만 방향이 다른 결정의 경계를 말한다하는데, 이러한 경계면의 특이성으로 인해 순수결정과는 다른 특성을 가지게 되는 경우가 많이 있다. 특히, 고체산화물 연료전지(Solid Oxide Fuel Cell, SOFC)의 전해질로 쓰이는 이트리아 안정화 지르코니아(Yttria-stabilized zirconia, YSZ) 위에서 이러한 GB가 발견되는데 이러한 Grain boundary를 포함한 표면에서의 반응물의 흡착현상을 통해 활성을 예측하는 것은 표면 반응을 이해하고 활성도를 예측하는데 이어서 매우 중요한 인자이다. Computational approach를 통한 YSZ에서의 표면반응에 대한 계산은 시간 및 비용을 상당히 절약할 수 있고, 특히, 우리는 산소를 Grain boundary에 흡착시켜 봄으로써 YSZ에서의 표면활성 및 메커니즘을 예측하고자 하였다. 이러한 결과는 YSZ의 Grain boundary에서의 표면반응을 이해하는데 있어서 큰 도움이 될 것으로 예상된다.