

에너지 저장 응용을 위한 유기물질의 DFT 기반  
평가김기철<sup>†</sup>

건국대학교

(kich2018@konkuk.ac.kr<sup>†</sup>)

화석연료의 고갈 및 환경적 피해로 인해 관심을 갖게 된 대체에너지의 비연속적 생산특성으로 인해 이의 지속적인 사용을 위해서는 에너지저장 기술의 발전이 필수적이다. 특히, 소형전자기기 및 친환경 자동차용 이차전지의 성능 향상은 최근의 주요 연구 과제로서 많은 관심을 받아 왔다. 특히, 리튬 및 소듐 이온 기반의 이차전지의 성능 향상을 위해서는 양극재료의 최적화가 필수적라고 할 수 있다. 이를 위해, 지금까지는 양극재료로 사용되는 주요 물질 구조의 부분적 개질에 근거한 성능 향상 및 최적화를 추구하였다. 하지만, 획기적인 성능 향상을 위해서는 이러한 부분적 개질 방법에서 탈피하여 성능 향상에 필수적인 요소가 근본적으로 포함되도록 양극재료의 구조 자체를 새롭게 설계하는 것이 근본적으로 지향되어야 할 방향이라고 할 수 있다. 본 연구에서는, 리튬이온전지의 양극재료로서 최근에 각광받고 있는 다양한 유기분자의 체계적인 설계를 다루고 있으며, 설계된 분자들의 산화환원 특성 및 성능인자에 대한 계산화학 기반의 포괄적인 연구를 통해서 획기적인 성능 향상을 위한 유기 분자 설계 방향을 제시하고자 한다. 궁극적으로는, 설계된 분자 및 물질에 대한 계산화학 기반의 성능 및 특성 계산을 통해서 우수한 성능을 지니는 분자 및 물질 후보군을 규명하고자 한다.