

제일원리 열역학 계산을 통한 나노소재 촉매 및
광촉매 성능과 생산경제성의 개선

최희채[†]

(주)버추얼랩

(heechae@simulation.re.kr[†])

제일원리 계산은 물질의 상대적인 에너지 값과 전자 준위를 정확하게 예측할 수 있는 Powerful한 도구이다. 이러한 특징점을 가진 제일원리 계산이 고전적인 핵성장 이론모델이나 결합제어에 관한 열역학 모델에 접목되면 산업 현장이나 나노촉매소재 연구자들의 고민인 품질 제어 (Quality control) 문제를 해결하고 원하는 전기화학적 물성을 효과적으로 유도할 수 있을 것이라는 전제하에 본연구들이 진행되었다. 이 연구들은 Anatase TiO₂, ZnS, NiCo₂S₄, Graphene oxide, Brookite TiO₂ 등 여러 소재들의 광촉매 및 전기촉매 성능이 공정 및 생산 환경에 따라 수시로 변하며 제어가 힘들다는 연구자들의 고충을 맞닥뜨리게 되면서 이를 해결하기위해서 시행되었다. 그 결과, 제일원리 계산과 열역학 모델의 결합은 공정상으로 경제적인 방법으로 품질을 제어하고 향상시킬수 있다는 것을 발견할 수 있었다. 또한, 이 연구 발표에서는 제일원리 계산을 간단한 열역학 모델과 이중접합 핵생성 모델에 적용하여, 고성능 광촉매 효율을 갖는 복잡한 이중접합 구조를 단일용액과정으로 합성을 성공적으로 유도한 사례도 소개한다.