

SB-9

## 백금 기반 2중 나노입자에 대한 원자단위 시뮬레이션

남호석<sup>†</sup>, 윤가영<sup>1</sup>, 김기범<sup>1</sup>, 조아영<sup>1</sup>, 이승철<sup>2</sup>, 오정수<sup>3</sup>, 최정혜<sup>2</sup>

국민대학교 신소재공학부, <sup>1</sup>국민대학교, <sup>2</sup>한국과학기술연구원, <sup>3</sup>한국과학기술연구원  
(hsnam@kookmin.ac.kr<sup>†</sup>)

나노입자는 벌크에 비해 월등히 큰 비표면적(surface-to-volume ratio)과 작은 사이즈에서 오는 양자효과로 인해 촉매나 나노 전자 소자 등 여러 분야에서 응용되고 있다. 특히 백금 나노입자는 수소나 메탄올의 산화, 산소환원 반응의 독보적인 촉매로서 연료전지의 산화극과 환원극의 촉매로 널리 활용되고 있다. 본 연구에서는 높은 가격의 백금의 사용량을 줄일 수 있는 합금 나노입자 촉매에 대한 연구의 일환으로 Pd, Au, Cu, Ag 등의 원소를 활용한 합금 나노입자에 대한 구조 및 열역학적 안정성에 대한 연구를 수행하였다. 다양한 합금에 대한 원자간 포텐셜을 개발하였고, 이를 기반으로 몬테카를로 및 분자동력학 시뮬레이션을 수행하여 Pd-Pt, Cu-Pt, Ag-Pt, Au-Pt 이원계 합금 나노입자의 다양한 원자 구조 및 형상에 따른 결합에너지와 열역학적 특성에 대하여 분석하였다.

**Keywords:** Nanoparticle, Molecular dynamics simulation

SB-10

## Functional Layer-by-Layer Assembled Multilayers Based on Nucleophilic Substitution reaction

조진한<sup>†</sup>

고려대학교 화공생명공학과  
(jinhan71@korea.ac.kr<sup>†</sup>)

Ultrathin polyelectrolyte (PE) multilayer films prepared by the versatile layer-by layer (LbL) assembly method have been utilized for the preparation of light-emitting diodes, electrochromic, membrane, and drug delivery system, as well as for selective area patterning and particle surface modification because the various materials with specific properties can be inserted into the film with nano-level thickness irrespective of the size or the shape of substrate. Since the introduction of the LbL technique in 1991 by Decher and Hong, various hydrophilic materials can be inserted within LbL films through complementary interactions (i.e., electrostatic, hydrogen-bonding or covalent interaction). In this study, it is demonstrated that LbL SA multilayer films based on nucleophilic substitution reaction can allow the preparation of the highly efficient magnetic and/or optical films and nonvolatile memory devices

**Keywords:** 자기조립, 자성나노입자, 양자점