

SM-P024

Investigation of Charge Transfer between Graphene and Oxide Substrates

Kyung-Ah Min, Suklyun Hong*

Department of Physics and Graphene Research Institute, Sejong University

Graphene, which is a 2-dimensional carbon material, has been attracting much interest due to its unique properties and potential applications. So far, many interesting experimental and theoretical works have been done concerning the electronic properties of graphene on various substrates. Especially, there are many experimental reports about doping in graphene which is caused by interaction between graphene and its supporting substrates. Here, we report the study of charge transfer between graphene and oxide substrates using density functional theory (DFT) calculations. In this study, we have investigated the charge transfer related with graphene considering various oxide substrates such as SiO₂(0001) and MgO(111). Details in charge transfer between graphene and oxides are analyzed in terms of charge density difference, band structure and work function.

Acknowledgements

This research was supported by Nano · Material Technology Development Program (2012M3A7B4049888) and EDISON Program (2012M3C1A6035305) through the National Research Foundation of Korea (NRF) funded by the Ministry of Science, ICT and Future Planning (MSIP).

Keywords: Charge transfer, Graphene, Oxide substrates, DFT

SM-P025

Multi-scale Simulation Approach on Lithiation of Silicon Electrodes

정 현^{1,2}, 주재용¹, 조준형², 이광렬¹, 한상수¹

¹한국과학기술연구원(KIST) 계산과학연구단, ²한양대학교 물리학과

최근 친환경 에너지에 대한 관심이 증폭되면서 리튬이차전지에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 특히 음극(anode) 물질의 경우 기존의 흑연(graphite)보다 이론적 용량이 약 10배 이상 높은 실리콘(Silicon)에 대한 관심이 매우 높다. 하지만 Si의 경우 리튬 충전/방전 시 400% 이상의 부피팽창으로 몇 번의 충전/방전 사이클(cycle)에 전극이 파괴되는 문제점을 지니고 있다. 이를 극복하기 위해 Si 나노선이 고려되고 있다. 우수한 전극특성을 갖는 Si 소재를 개발하기 위해서는 원자단위에서 Si 나노선의 리튬 충전 메커니즘을 살펴보는 것이 매우 중요하다. 하지만 기존의 시뮬레이션 기법으로는 Si 나노선의 볼륨팽창에 관한 메커니즘과 리튬 충전과정에서의 상변화(결정질에서 비정질) 과정을 설명하기는 기술적으로 매우 힘들다. 고전적인 분자동역학 방법의 경우 실제 나노스케일을 고려할 수 있지만, empirical potential로는 원자들간의 화학반응을 제대로 묘사할 수 없다. 한편 양자역학에 기반을 둔 제일원리방법의 경우 계산의 복잡성으로 현재의 컴퓨터 환경에서는 나노스케일에서 원자들의 동역학적인 거동을 연구하기 매우 힘들다. 우리는 이러한 문제를 해결하기 위해 실제 나노스케일에서 원자간 화학반응을 예측할 수 있는 Si-Li 시스템의 Reactive force field를 개발하였고, 분자동역학 계산방법을 이용하여 Si 나노선의 Li 충전 메커니즘을 규명하였다.

Keywords: 리튬이차전지, Si 나노선, 분자동역학, Reactive Force Field