

수소발생반응에 대한 Pyrites 표면 촉매 성능 예측: 밀도 범함수 이론 계산

Identification of a Universal Relation between a Thermodynamic Variable and Catalytic Activities of Pyrites toward Hydrogen Evolution Reaction: Density Functional Theory Calculations

강준희^{a,*}, 황지민^a, 한병찬^a^a연세대학교 화공생명공학과(E-mail: j.kang@yonsei.ac.kr)

초 록: High functional catalyst to efficiently produce clean and earth-abundant renewable fuels plays a key role in securing energy sustainability and environmental protection of our society. Hydrogen has been considered as one of the most promising energy carrier as represented by focused research works on developing catalysts for the hydrogen evolution reaction (HER) from the water hydrolysis over the last several decades. So far, however, the major catalysts are expensive transition metals. Here using first principles density functional theory (DFT) calculations we screen various pyrites for HER by identifying fundamental descriptor governing the catalytic activity. We enable to capture a strong linearity between experimentally measured exchange current density in HER and calculated adsorption energy of hydrogen atom in the pyrites. The correlation implies that there is an underlying design principle tuning the catalytic activity of HER.

폴리머 기관상 나노 구조 형성을 통한 광특성 제어 연구

Fabrication of nano texturing on the polymer surface for transmittance property

변은연^{a,*}, 이승훈^a, 김도근^a^a재료연구소 표면기술연구본부(E-mail: dogeunkim@kims.re.kr)

초 록: 폴리머 필름에 표면처리 및 코팅, 필름의 다층화, 원료 소재의 하이브리드화 등을 통해서 기능성을 부여한 기능성 고분자 필름은 디스플레이, 반도체, 자동차, 에너지, 포장재 등 다양한 분야에 응용되고 있다. 기능성 고분자 필름의 산업화를 위해 대면적 연속 공정기술 개발이 필요하며, 본 연구에서는 roll to roll 시스템을 이용하여 폴리머 기관상 나노 구조 형성을 위한 공정연구를 수행하였다. 재료연구소 자체 개발 선형이온소스는 0.25 keV에서 1 keV까지 에너지 조절이 용이하며, 이온빔 조사를 통해서 PET, PMMA, PDMS 등 다양한 폴리머 기관의 표면에 나노 구조화 공정을 개발하였다. 표면 나노 구조 형성을 통해서 폴리머 필름의 투과도와 Haze 제어가 가능하며, 공정 기술을 통해 저반사 및 고굴절 특성의 기능성 필름을 제작하였다. 이러한 나노 구조화 필름은 플렉서블 디스플레이의 광추출효율 향상을 위한 광추출층, 저반사 디스플레이 패널 필름 등에 적용 가능한 기술이다.