



문의 : 정연준 교수(02-880-4085, yjjung@snu.ac.kr)

연구책임자 : 정연준 교수(02-880-4085) / 교신저자

연구진 : 노찬우 연구원(02-880-4369) / 제1저자

서울대 화학부 정연준 교수팀

이온성 액체 슈퍼 커패시터의 작동원리 분자 수준 규명

-세계적 화학 학술지 Phys. Chem. Chem. Phys. 전면 표지 논문 선정-

□ 내용

- 최근 신재생에너지 관련 수요의 증가에 따라 전기에너지 저장장치의 개발이 중요해지고 있으며 이와 관련된 산업이 급성장하고 있다. 1990년대 중반부터 본격적으로 상용화되기 시작한 슈퍼 커패시터(super-capacitor)는 리튬-이온 배터리에 비해 출력 밀도가 높고 충·방전 속도가 빠르며 수명이 긴 장점을 가지고 있어 순간적인 고출력 에너지가 필요한 전자장치에서 활용되고 있다.
- 슈퍼 커패시터의 성능은 구동 전압에 크게 의존하기 때문에 넓은 전압 범위에서도 화학적으로 안정한 이온성 액체를 슈퍼 커패시터의 전해질로 활용하는 시도가 계속되고 있다. 그러나 전하를 띤 이온들로만 구성된 이온성 액체는 유기 전해질에 비해 전하밀도가 매우 높기 때문에 일반적인 슈퍼커패시터와는 다른 거동을 보인다.
- 서울대학교 화학부 정연준 교수 연구팀은 컴퓨터 시뮬레이션 방법 중 하나인 분자동역학 방법을 활용하여 그래핀 전극과 이온성 액체 전해질로 구성된 슈퍼 커패시터의 충·방전 현상의 물리화학적 원리를 분자 수준에서 규명하였다.
- 연구팀은 이온성 액체 슈퍼커패시터의 경우 기존에 알려진 바와 달리 충·방전 과정 중 반대전하 이온(counter-ion)들의 흡착보다는 공전하 이온(co-ion)들의 탈착이 매우 중요하다는 점을 밝혔으며 이를 “비움 효과

(vacating effect)” 라고 명명하였다.

- 또한 이온성 액체의 경우 전극 표면에 존재하는 이온뿐만 아니라 시스템 전체 이온들의 집합적인 움직임을 통해 매우 빠른 속도로 충·방전이 일어날 수 있다는 점을 이론적으로 밝혔다.
- 본 연구는 전기장 변화에 따른 이온성 액체슈퍼커패시터의 거동에 대한 분자 수준의 이해를 진일보시킨 결과이며, 향후 이온성 액체를 활용한 슈퍼커패시터 및 다양한 전기장치의 성능 향상에 큰 기여를 할 수 있을 것으로 기대한다.
- 본 연구는 왕립화학회(Royal Society of Chemistry)에서 발간하는 세계적인 학술지 PCCP (Physical Chemistry Chemical Physics)에 2019년 1월 24일 온라인 출판되었으며, 논문의 우수성과 독창성을 인정받아 PCCP 3월호 전면 표지 논문(front-cover article)으로 선정되었다.(PCCP 2019년 제 13호, 3월 27일 출판)
- 본 연구는 삼성미래기술육성재단에서 시행하는 삼성미래기술육성사업의 지원으로 수행되었다.
- 출판 논문 : Understanding the charging dynamics of an ionic liquid electric double layer capacitor via molecular dynamics simulations, Chanwoo Noh and YounJoon Jung, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019 DOI: 10.1039/c8cp07200k (2019년 1월 24일 온라인 출판, 2019년 3월 27일 저널 표지 출판 예정)

- [붙임] 1. 연구결과 2. 용어설명 3. 그림설명
4. 연구진 이력사항

연구 결과

Understanding the charging dynamics of an ionic liquid electric double layer capacitor *via* molecular dynamics simulations

Chanwoo Noh (노찬우) and YounJoon Jung (정연준)

(Phys. Chem. Chem. Phys., DOI: 10.1039/c8cp07200k)

본 연구에서는 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 그래핀 전극과 이온성 액체 전해질로 구성된 슈퍼 커패시터의 충·방전 메커니즘을 밝혀냈다. 특히 슈퍼 커패시터 내의 이온층 구조의 변화에 주목하여, 이온층의 급격한 변화가 전기 용량과 밀접한 관계를 갖는다는 점을 밝혔다. 또한 충·방전 중 변화하는 전극의 충전 전하량은 이온성 액체 분자의 수직 이동거리와 일치함을 관측하였다. 이로부터 전극 전하에 대한 각 이온들의 기여도를 분석함으로써 기존 지식과 달리 슈퍼 커패시터의 충전 과정은 반대전하 이온들의 흡착보다는 공전하 이온들의 탈착에 크게 의존한다는 점을 밝혔다. 또한, 표면 이온뿐 아니라 시스템 전체에 존재하는 이온들의 집합적인 움직임에 의해 충·방전이 진행된다는 점을 보였다. 본 연구는 우수한 성능의 슈퍼 커패시터 설계에 중요한 역할을 할 것으로 기대한다.

1. 연구의 필요성

- 슈퍼커패시터는 매우 우수한 출력 밀도와 수명이 긴 전기에너지 저장장치이기 때문에 고출력이 필요한 전자장치나 전력의 수급이 일정하지 못한 신재생에너지 발전장치에 활용되고 있다. 슈퍼 커패시터의 성능을 향상시키기 위해서는 구동전압을 높여야하기 때문에 넓은 전압 범위에서 화학적으로 안정한 이온성 액체를 전해질로 활용하는 시도가 이루어지고 있다.
- 그러나 이온성 액체는 일반적인 유기 전해질에 비해 전극 표면에서의 구조 및 동역학적 성질이 규명되지 않았다. 이온성 액체로 구성된 슈퍼 커패시터를 효과적으로 설계하기 위해서는 충·방전 과정 중 이온성 액체의

동역학적인 거동에 대한 연구가 필요하다.

2. 연구의 내용

- 연구팀은 분자동역학 시뮬레이션 방법을 활용하여 그래핀 전극과 이온성 액체 전해질로 구성된 슈퍼 커패시터의 충·방전 과정을 분자 수준에서 연구하였다.
- 이온성 액체의 이온들은 전극 표면으로부터 단일층이 아닌 다중층 구조를 형성한다. 전극이 충전되어 일정량 이상의 전하가 충전이 되면 양이온과 음이온이 서로 번갈아 존재하는 층 구조로 변화한다. 충전 과정 중에 이온들은 단순히 병진 운동이 아닌 회전 운동을 통해 효율적으로 층 구조를 재배열함을 규명하였다. 또한, 전극 근처의 층 구조가 급격히 변하는 조건이 슈퍼 커패시터의 전기 용량이 극대화되는 조건과 일치함을 밝혔다.
- 충전 과정동안 전극의 전하는 충전시간에 대해 단순한 지수법칙을 따르지 않고 “동역학적 불균일성”으로 알려진 매우 복잡한 양상을 보여준다. 또한, 슈퍼커패시터의 충전 속도는 충전전압에 영향을 받으며 충전 속도가 가장 느린 조건 역시 전극 근처의 층 구조가 급격히 변하는 조건과 일치한다. 즉, 이를 통해 이온층의 재배열이 슈퍼 커패시터의 충·방전 성능을 결정하는 중요한 요소임을 밝힐 수 있었다.
- 전극의 충전 전하량은 이온들의 전극에 대한 수직방향 이동거리와 비례한다. 이러한 성질을 이용하여 각 이온 분자들의 충전에 대한 기여도를 계산하였다. 그 결과, 전극의 전하와 같은 전하를 띠는 공전하 이온의 탈착 움직임이 반대 전하를 띠는 반대전하 이온의 흡착 움직임에 비해 충전에 크게 기여한다는 것을 보일 수 있었고 이를 “비움 효과(vacating effect)”라 명명하였다. 또한, 충전 과정동안 전극 표면의 이온뿐만 아니라 시스템 전체의 이온들이 집합적으로 움직이기 때문에 각 이온들은 평균적으로 이온의 크기보다 작은 1~2 옴스트롬의 짧은 거리만을 움직여도 충전이 완료된다. 따라서, 이론적으로는 수 나노초(nano-second) 이내의 짧은 시간 안에 충전이 가능함을 제시하였다.

3. 연구의 성과 및 의의

- 기존 많은 연구에서는 주로 전극 표면에서의 이온성 액체의 구조적인 성질에 초점을 맞추어 연구가 진행되어 왔으나, 본 연구팀은 이러한 한계를 극복하고자 슈퍼 커패시터의 충·방전 과정을 분자동역학 시뮬레이션을 통해 실시간 및 분자 수준에서 관측, 분석하였다.
- 이온성 액체의 움직임이 단순히 슈퍼 커패시터의 출력 성능에만 영향을 미치는 것이 아니라 전기 용량에도 큰 기여를 한다는 점을 밝혔다. 따라서 슈퍼 커패시터의 성능을 높이기 위해서는 높은 이동성을 가진 이온성 액체를 전해질로 사용해야한다는 사실을 교명하였다.
- 이온성 액체 슈퍼커패시터의 충·방전 과정은 특정 이온의 확산 운동에 의존하는 것이 아니라 시스템 전체의 이온 구조들의 재배열에 기인한다는 메커니즘을 규명하였다. 이를 통해 이온성 액체를 활용한 슈퍼 커패시터 및 전자기기의 성능 향상에 기여할 수 있다.

용 어 설 명

1. 슈퍼 커패시터

- 슈퍼 커패시터는 일반적인 커패시터에 비해 월등한 전기 용량을 가진 커패시터로서 전기 에너지를 저장하는 장치이다. 화학반응 없이 전해질의 물리적인 구조 변화를 통해 전기에너지를 저장하기 때문에 리튬-이온 전지에 비해 높은 출력 밀도를 가지며 수명이 훨씬 길다는 장점을 가진다.

2. 이온성 액체

- 이온성 액체는 양이온과 음이온으로만 구성된 물질로서 상온에서 액체로 존재한다. 일반적으로 비대칭적이고 크기가 큰 양이온과 비교적 크기가 작은 음이온의 조합으로 구성된다. 기존의 유기용매들에 비해 넓은 전압 범위에서 화학적으로 안정할 뿐만 아니라 증기압력이 낮고 독성이 낮기 때문에 전해질, 친환경 용매 등 다양하게 활용되고 있다.

3. 분자동역학

- 분자동역학은 매 시각마다 원자 사이에 가해지는 포텐셜 에너지를 계산하여 분자의 움직임을 재현하는 컴퓨터 시뮬레이션 방법론이다. 시간의 경과에 따라 분자의 움직임을 재현할 수 있기 때문에 분자들의 정적 성질뿐만 아니라 동적 성질 또한 연구가 가능하다.

4. 동역학적 불균일성

- 분자의 움직임이 모든 공간에서 균등하지 않고, 특정한 공간 및 시간에 따라 이질적인 작은 영역으로 구성되어 있다는 특성을 의미한다. 즉, 빠른 분자들과 느린 분자들의 분포가 시간 및 공간에 따라서 구분되어 있으며 시공간에 따른 “동역학적 스케일링” 법칙을 따른다. 과냉각 액체나 이온성 액체와 같이 느린 동역학을 보이는 물질에서 많이 관찰된다.

5. 공전하 이온

- 전극의 전하와 같은 전하를 가진 이온

6. 반대전하 이온

- 전극의 전하와 반대 전하를 가진 이온

7. 옴스트롬

- 100억(10^{10})분의 1 미터

8. 나노초

- 10억(10^9)분의 1 초

그림 설명



PCCP 저널 2019년 제 13호(3월 27일 출판 예정) 전면 표지로 선정된 논문으로서 그래핀 전극과 이온성 액체 전해질로 구성된 슈퍼커패시터의 개념을 표현한다.

연구자 이력사항

<교신저자>

1. 인적사항

- 성 명 : 정 연 준
- 소 속 : 서울대학교 화학부 교수
- 전 화 : 02-880-4085
- E-mail : yjjung@snu.ac.kr



2. 학력

- 1990 - 1994 서울대학교 학사
- 1994 - 1997 서울대학교 석사
- 1997 - 2002 Massachusetts Institute of Technology(MIT) 박사

3. 경력사항

- 2002 - 2005 캘리포니아 버클리 대학교 밀러 펠로우
- 2005 - 2006 노스웨스턴 대학교 박사후 연구원
- 2006 - 현재 서울대학교 화학부 교수
- 2012 캘리포니아 버클리 대학교 방문 교수

4. 기타 정보

- 2002 캘리포니아 버클리 대학교 밀러 펠로우쉽
- 2010 서울대학교 자연과학대학 교육부문 우수교수 선정
- 2011 왕립 화학회 Faraday Meeting 연사 초청
- 2012 Faraday Discussions Most-read article 선정
- 2016 삼성미래기술육성사업 미래기술연구과제 선정
- 2019 대한화학회 신국조 학술상 (2019년 4월 수상 예정)

연구자 이력사항

<제 1 저자>

1. 인적사항

- 성 명 : 노 찬 우
- 소 속 : 서울대학교 화학부
계산나노바이오화학 연구실
- 전 화 : 02-880-4369
- E-mail : eric8617@snu.ac.kr



2. 학력

- 2007 - 2011 서울대학교 화학부 학사
- 2011 - 2019 서울대학교 화학부 박사

3. 기타 정보

- 제5회 계산화학 EDISON SW 활용 경진대회 최우수상 (2016)
- Korea Supercomputing Conference 2016 우수 포스터상 (2016)