SW4 : 신기능 세라믹스 연구회 심포지엄

SW4-1 | Efficient Generation of RuO_2 Monolayers using a Two-Stage Intercalation Method

*KIM Se Yun[1], SHIN Weon Ho[2], KIM Hyun-Sik[3]
[1]Gyeongsang National University, [2]Kwangwoon University, [3]University of Seoul

Tetrabutylammonium ions (TBA+), a common choice for RuO_2 exfoliation into monolayers using ion exchange reactions, encounter a challenge in achieving high production yield due to the substantial size of their molecules. This limitation hampers the broader integration of RuO_2 monolayers into optoelectronic applications. To address this, we present an expedited and effective two-step exfoliation technique. This procedure initiates with the integration of small organic molecules (tetramethylammonium ions) into RuO_2, succeeded by the subsequent introduction of TBA+ as a secondary intercalant, resulting in the successful creation of RuO_2 monolayers. This dual-step intercalation method remarkably elevates the yield of RuO_2 monolayer exfoliation from a modest 9.9% to an impressive 60% within a span of 14 days. Through density functional theory calculations, it becomes evident that the activation energy required for the dual-step intercalation process is substantially lower compared to the energy needed for the direct intercalation of TBA+ ions into the RuO_2 structure. The confluence of experimental outcomes and theoretical insights underscores the facile and all-encompassing nature of the dual-step intercalation strategy, potentially expanding the application of metal oxide monolayers.

SW4-2 | 가중이동도 제어를 통한 Bi_2Te_3계 소재의 열전성능 증대 전략

김상일[1], *김성웅[2], *김현식[1], *이규형[3]
[1]서울시립대학교, [2]성균관대학교, [3]연세대학교

Thermoelectrics, which can generate electricity from a temperature difference, or vice versa, is a key technology for solid-state cooling and energy harvesting; however, its applications are constrained owing to low efficiency. Since the conversion efficiency of thermoelectric devices is directly obtained via a figure of merit of materials, zT, which is related to the electronic and thermal transport characteristics, the aim here is to elucidate physical parameters that should be considered to understand transport phenomena in semiconducting materials. It is found that the weighted mobility ratio of the majority and minority carrier bands is an important parameter that determines zT. For nanograined Bi–Sb–Te alloy, the unremarked role of this parameter on temperature-dependent electronic transport properties is demonstrated. This analysis shows that the control of the weighted mobility ratio is a promising way to enhance zT of narrow bandgap thermoelectric materials.

SW4-3 | 중온 발전용 skutterudite계 열전 소재 및 모듈화 기술

*남우현[1], 조중영[1]
[1]한국세라믹기술원

열전(thermoelectric) 현상은 열(온도차)에 의해 반도체 내부의 전자 또는 정공이 이동하는 전기에너지 변환 현상으로, 폐열을 전기에너지로 효과적으로 회수할 수 있는 기술이다. 열전소재의 성능을 나타내는 열전성능지수(ZT)는 온도의 함수로써 각 열전소재는 우수한 성능을 나타내는 온도 범위가 정해져 있기 때문에 사용 온도 대역에 따라 저온용(300~500 K), 중온용(500~900 K) 및 고온용(900 K 이상)으로 구분할 수 있다. 수송 및 산업 분야에 존재하는 폐열 중 50% 이상이 중온 영역에 해당하기 때문에, 에너지 고효율화 달성을 위해 중온 영역의 폐열을 효과적으로 회수할 수 있는 고성능 중온용 열전소재를 개발하는 것이 중요하다. 중온 영역에서 높은 열전성능을 보이는 skutterudite (SKD)계 소재는 단위격자 내에 두 개의 void를 포함하고 있어, 다른 원자들과는 독립적으로 진동하는 rattler라 불리는 이종 원자를 void에 채워 rattling 효과를 통해 격자 열전도도를 감소시킬 수 있다. 이를 통해 SKD계 소재는 Phonon-Glass Electron-Crystal의 실현을 통해 열전성능을 향상할 수 있다는 장점이 있다. SKD계 소재 중에서도 $CoSb_3$는 높은 캐리어 이동도를 가지고 있고 구성 원소 중에서 유해 및 희유원소를 포함하지 않아 중온용 열전소재로 적합하다. $CoSb_3$계 소재에서 rattling 효과의 극대화를 위해 rattler 종류 및 최적 filling fraction을 탐색하기 위한 다양한 연구가 진행된 바 있으며, rattling 효과와 더불어 나노구조의 도입을 통해 포논을 산란시켜 열전도도를 제어하는 연구도 진행되고 있다. 본 발표에서는 한국세라믹기술원의 $CoSb_3$계 소재 및 모듈화 관련 기술 개발 결과에 대해 소개하고자 한다.

SW4-4 | 신기능 세라믹스를 위한 디지털 트윈

*원종호[1]
[1]단국대학교

Dankook University's Nano Digital Twin Lab is researching microscopic tomography of nanomaterials and programming to create virtual 3D nano volumes to invent new materials for energy storage and conversion. Additionally, we run various simulations based on the generated virtual 3D nano volume and design optimal nano structures based on the results. Until now, nano-level structures have been defined through TEM or X-ray analysis. However, two-dimensional analysis through TEM cannot reflect the z-axis

difference, and X-ray analysis has limitations in resolution. This laboratory accurately analyzes areas ranging from angstroms to several nanometers through measurements using electrons and neutrons and 3D visualization and analysis of nanostructures through programming. These results are analyzed quantitatively/statistically to determine the variables that specific nanostructures have on the performance of application systems. In addition, we are conducting research to find optimal chemical structures, materials, and processes in future energy and environmental applications by repeatedly implementing the most advantageous nanostructure for each application system.