

Prof. Minkyu Kim



2020. Yeungnam Univ., Professor
 2018. Ohio State Univ., Post-Doc
 2014. Ohio State Univ., Ph.D
 2012. Univ. of Seoul., MS
 2006. Seoultech., BS

Office: 화공관 220호

Lab: 화공관 204호

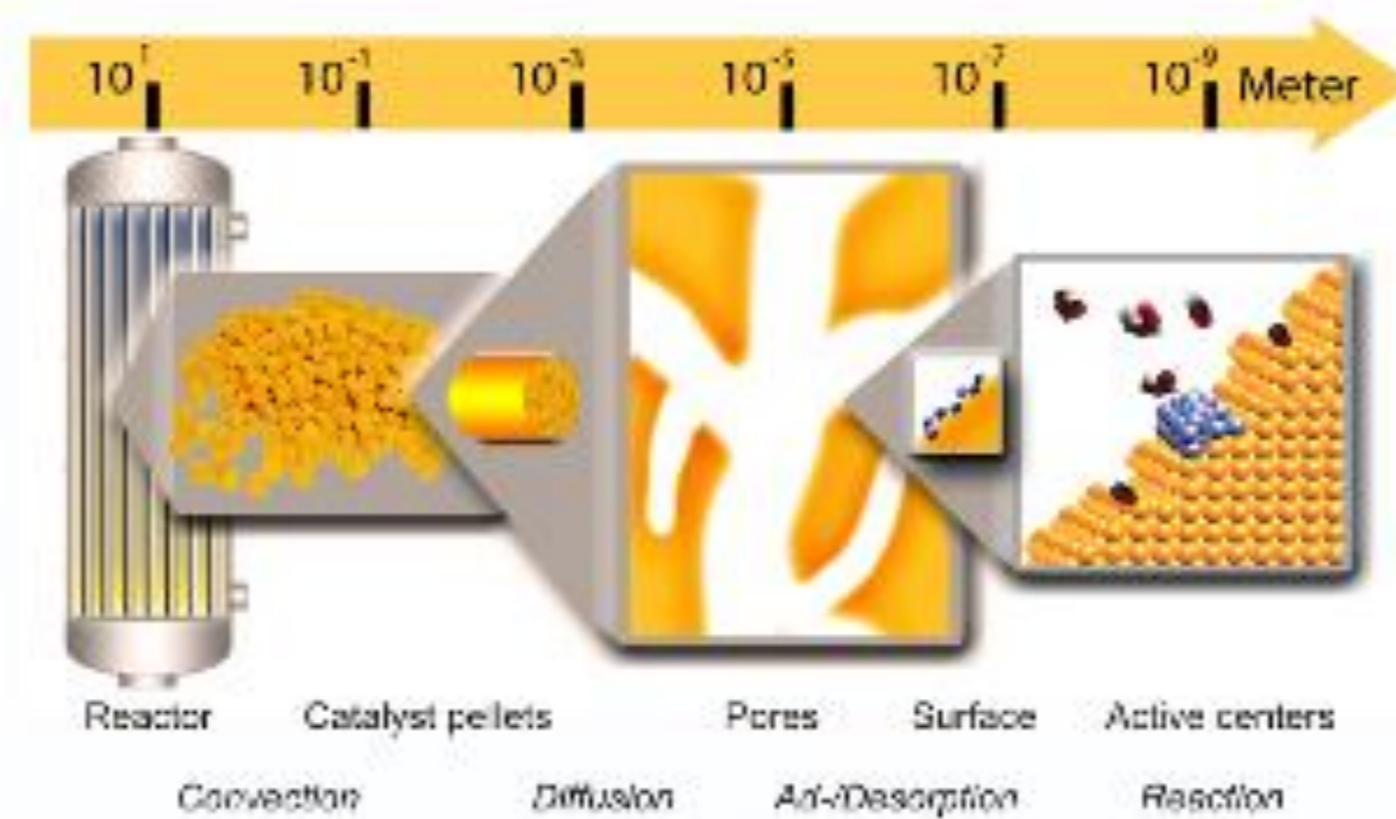
Tel: 053-810-2532

Email: mk_kim@ynu.ac.kr

Research Area

- 천연가스 효율적 활용
- 전기화학적 CO₂ 환원
- 광전기화학적 CO₂ 환원

Modeling Catalysts

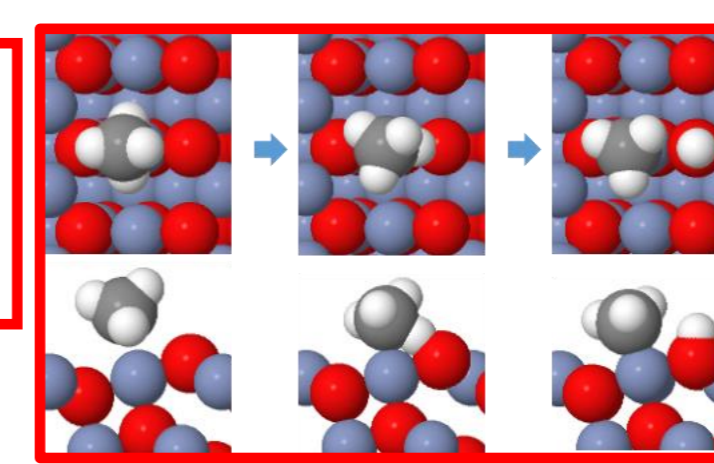


촉매 모델링은 시간 및 크기의 다중 스케일 기반으로 수행되어야 한다.

Things to Learn

- ▶ 촉매 활성점의 이론적 (근원적) 이해
- ▶ 미시적 관점의 통찰 및 이해를 통한 실제 촉매 반응성 예측
- ▶ 실험연구팀과 공동연구를 통한 이론과 실제와의 연관성 확인

Computational Catalysis
Atomic-level information on surface mechanisms



"Real-world" catalysts
Complex materials (polycrystals)
P ~ 1 atm



Experiments in ultrahigh vacuum (UHV)
Single crystal surfaces
P ~ 10⁻¹⁰ atm

Modeling Approaches

촉매 상 안정성 분석

촉매 입자 결정 단면들 자유에너지 평가

$$G = \frac{1}{A} \left[G_{bulk} - \sum_i N_i \mu_i \right]$$

G is minimum @ equilibrium

열역학적으로 안정한 구조 규명

자유에너지 비교분석

촉매 반응성 분석

촉매 표면 Density Functional Theory (DFT) 계산

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

정상상태 시뮬레이션

$$\dot{\rho}_u(t) = \sum_v w_{uv} \rho_v(t) - w_{vu} \rho_u(t)$$

반응 메커니즘 규명

키네틱 데이터 수집

촉매 스크리닝

물성 데이터 베이스

Periodic Table of the Elements

d band 이론 기반의 해석학적 모델

$$E_b = \int \frac{n_{d\pi} |V_{\pi}|^2}{\epsilon_{2\pi^*} - \epsilon} d\epsilon$$

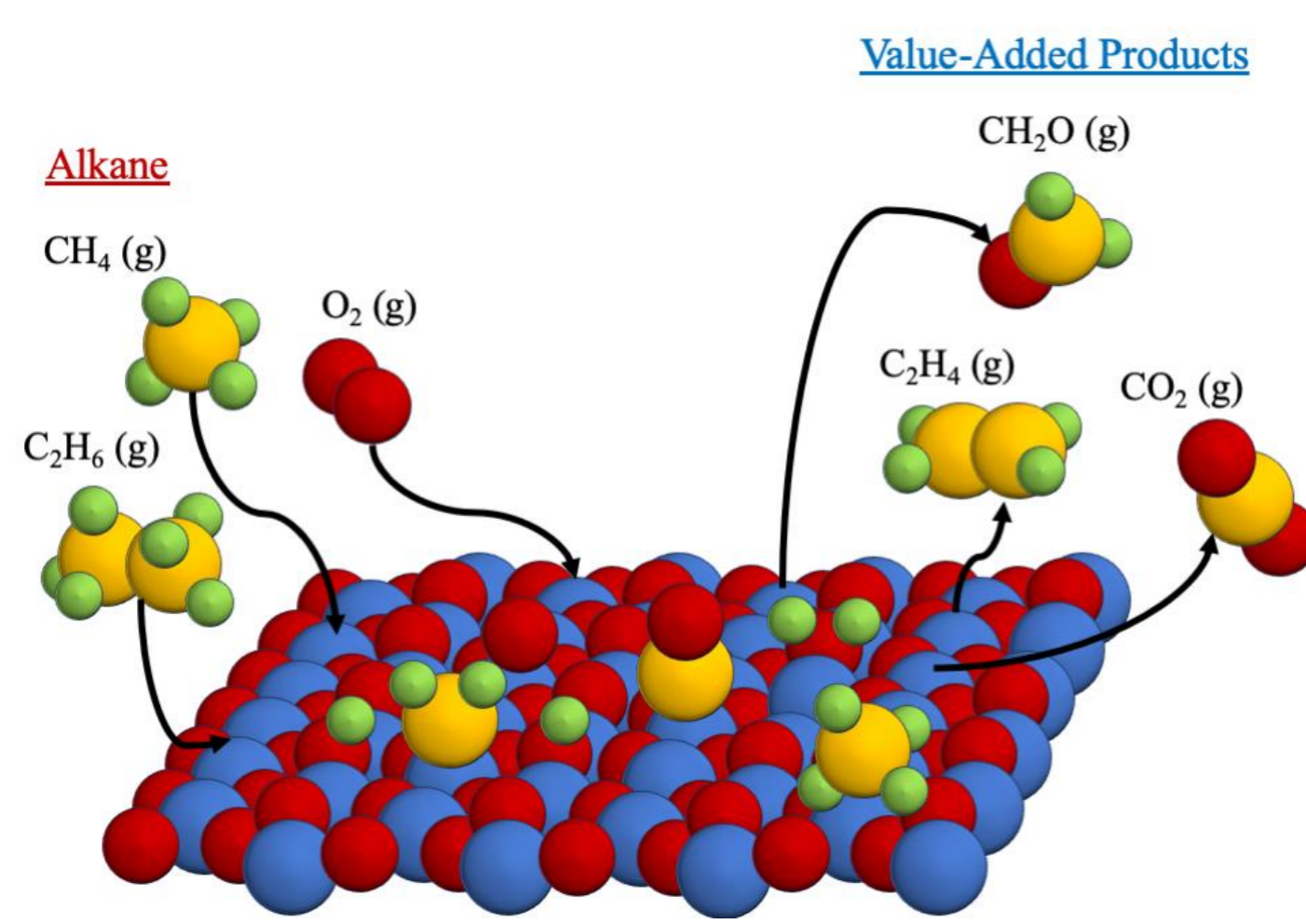
머신러닝 적용

고 반응성, 고 선택도 촉매 예측

모델 검증

Research Projects

1. Selective Conversion of Alkanes



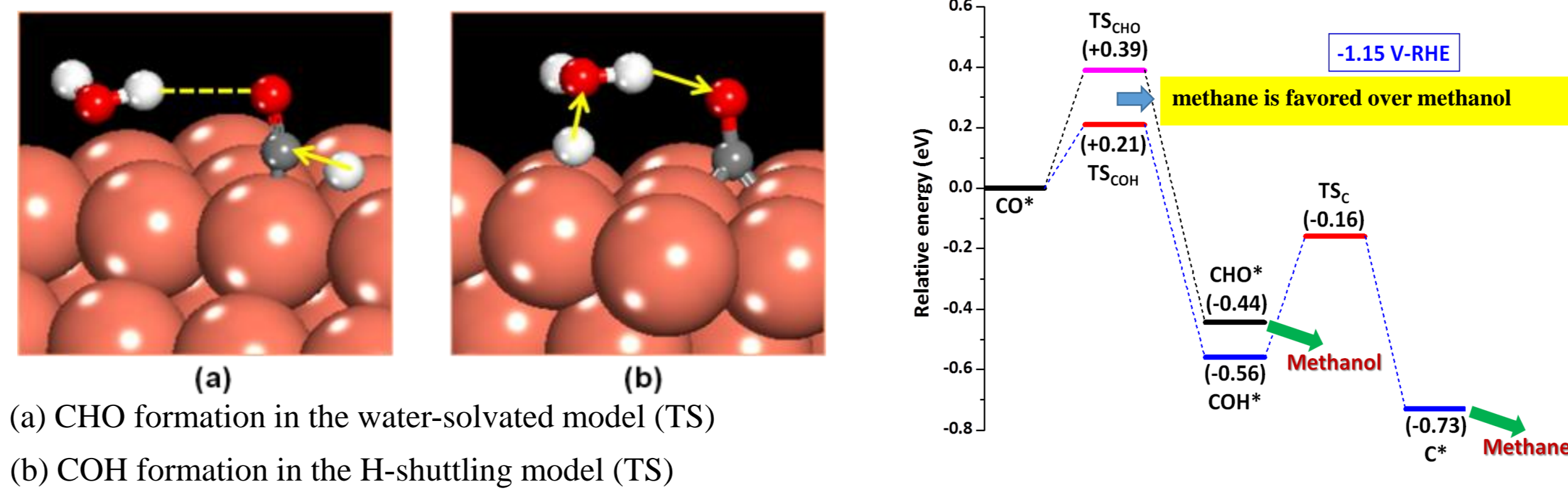
Motivation:

Due to the large increase in light alkanes from shale gas, conversion to higher value chemicals becomes important

Goals:

Efficiently convert small alkanes to high value chemicals such as ethylene and alcohols
 → "holy grail" of catalysis research

2. Electrocatalysis



Motivation:

Promising for CO₂ reduction through green energy but requires catalyst with better selectivity and stability

Goals:

Investigating surface-dependent reaction kinetics
 Mapping of the surface Pourbaix diagram (stability)

Collaborators



공동연구를 진행하는 해외 대학들에 유학의 기회가 주어집니다 !!