산화물 촉매 작용의 DFT(Density Functional Theory)적 이해: SOFC 응용

함형철[1,2,*], 임동희[1,3], 이상헌[1], 김군식[1,4], 윤성필[1],
한종희[1], 남석우[1]
[1]KIST 연료전지연구센터; [2]UST 청정화학공학과; [3]충북대;
[4]연세대
(hchahm@kist.re.kr*)

SOFC(solid oxide fuel cell)는 차세대 에너지 변환 장치로 최근 주목을 많이 받아 오고 있다. 그러나 상용화를 위해서 넘어야 할 장벽이 많이 있다. 그 중에서 고효율 연료극 촉매 개발은 시급한 과제 중의 하나이다. 현재 SOFC 연료극으로 널리 사용되고 있는 재료는 Ni이다. 그러나 Ni 촉매의 커다란 단점의 하나는 연료(CH_4, H_2 등)에 포함되어 있는 황 화합물에 의한 촉매 피독이다. 이의 해결방안의 하나로 CeO_2와 같은 산화물을 사용하여 Ni 촉매 표면을 개질하는 것이다. 또 다른 접근 방법은 황 화합물에 대한 저항성이 큰 물질인 $SrTiO_3$과 같은 perovskite계열의 산화물을 연료극 촉매로 사용하는 것이다. 효율적인 연료극 촉매를 개발하기 위해서는 촉매 활성 및 피독을 지배하는 원리를 이해하는 것이 필수적이다. 그러나 직접 분석의 어려움 때문에 산화물 촉매 작용의 이해 정도는 매우 낮다. First-principles density functional theory(DFT)에 기반한 계산과학적 접근은 산화물 촉매 활성 및 구조 등 같은 정보를 정량적으로 제공 할 수 있어 산화물 촉매 작용을 이해하는 데 강력하고 유연한 방법이 될 수 있다. 본 발표에서는 DFT를 사용하여 산화물 촉매(CeO_2, $SrTiO_3$등)에서 촉매 반응 및 불순물에 대한 피독을 지배하는 원리를 다룰 것이다.