

Site-site interaction in the TM-N<sub>4</sub> catalyst and their effect on ORR activity허진서, 임형규<sup>†</sup>

강원대학교

(hklim@kangwon.ac.kr<sup>†</sup>)

인류는 화석 연료의 고갈과 환경 문제를 해결하기 위해 다양한 친환경 에너지를 개발해 왔다. 최근 각광 받고 있는 에너지원 중 하나는 수소 에너지이며, 대표적으로 수소를 전기화학 반응을 통해 전기에너지로 변환할 수 있는 연료전지 시스템이 상용화 단계에 있다. 현재 연료전지 cathode 촉매 소재로 백금을 이용하고 있으며, 용출 및 고비용 문제로 더 효율적인 대체 촉매 연구가 다각도로 진행되고 있다. 후보군으로 TM-N<sub>4</sub> (TM: transition metal) 형태의 촉매가 제안되었으며, 백금 촉매 동등 이상의 활성을 구현하기 위해 다양한 원천 연구가 수행되고 있다. 본 연구에서는 밀도범함수 방법론을 기반으로 TM-N<sub>4</sub> 촉매의 coverage가 높은 경우에 활성점간의 전자구조적 상호작용과 이에 따른 산소환원반응 (ORR)의 활성 변화에 대해 고찰하였다. Fe와 Co가 단독 또는 혼재하는 가상의 di-TM-N<sub>4</sub> 촉매 모델에 대해, 두 TM 간의 거리와 흡착된 중간 반응물에 따라 다른 TM에 미치는 전자구조적인 영향과 ORR 반응의 경향성을 분석하였다. 본 연구 결과를 통해 TM-N<sub>4</sub> 기반 촉매의 이론적인 설계 방향을 제시할 수 있을 것이다.