

상호작용 매개체의 활용을 통한 메조다공성 MoxC 합성 및 Mo-valence의 조절을 통한 수소 생성반응 최적화

김지원, 김성빈, 정유성, 이진우[†]
한국과학기술원
(jwlee1@kaist.ac.kr[†])

몰리브덴 탄화물 (MoxC)의 경우, 활성점의 낮은 밀도 및 비이상적인 수소 결합 에너지로 인해 수소 생성반응(HER)에 사용되기에 한계를 가지고 있음. 몰리브덴 탄화물의 HER 성능을 향상시키기 위한 전략으로 다공성 구조를 도입 및 최외각 전자구조를 조절하는 합성 전략을 제시하고자 함. 합성과정에서는 상호작용 매개체라는 새로운 개념을 활용해 PEO-b-PS 고분자 주형과 몰리브덴 전구체간의 상호작용을 조절함으로써, 더 우수한 기공성을 가질 수 있도록 함. 또한 최종 1100도의 열처리 이전, 열처리 조건을 조절함으로써 Mo active site 주변의 환경을 체계적으로 조절함으로써 Mo의 최외각 전자구조를 조절하는 전략을 개발함. 이론계산을 통해 수소 결합 에너지가 이러한 최외각 전자구조와 밀접한 관련이 있으며, 적절한 최외각 전자구조 상태에서 최적의 성능을 가진다는 것을 확인할 수 있었음. 결과적으로 합성된 최외각 전자구조가 조절된 다공성 MoxC 는 산, 염기 조건에서 우수한 HER 성능을 나타내었으며, 염기조건에서 상용 백금촉매를 능가할 수 있음을 확인하였음. 또한 Mo의 최외각 전자구조를 나타낼 수 있는 3가지 실험적 지표를 제시하고, 이 지표가 HER 성능과 volcano-type correlation을 가진다는 것을 보여주었음.