

Engineering the local coordination environment in single-atom-catalyst for efficient oxygen evolution and oxygen reduction reaction

김지수, 이상경, 유종석[†]

서울시립대학교

(jsyoo84@gmail.com[†])

환경에 대한 관심이 증가함에 따라 친환경적인 발전 사이클이 주목받고 있다. 친환경적인 발전 사이클은 신재생 에너지를 사용하여 물을 전기 분해해 산소와 수소를 생산한 후 생산된 산소와 수소를 이용하여 필요할 때 전기 에너지를 생산하는 방식으로 부산물이 존재하지 않고, 간헐적으로 발생하는 신재생 에너지를 저장할 수 있다는 장점이 있다. 이러한 에너지 전환 시스템의 효율을 높이기 위해서는 산소 발생 반응과 산소 환원 반응에 참여하는 촉매의 활성이 높아야 한다. 따라서 본 연구에서는 해당 촉매로 단원자 촉매를 선정하여 촉매 활성도를 평가하는 연구를 진행하였다.

본 연구에서는 Density Functional Theory를 활용하여, 그래핀 위에 담지된 형태의 단원자 촉매를 디자인하고, 촉매 표면에서의 산소 발생 및 환원 반응 중간체의 흡착 에너지를 계산하여 촉매의 활성을 평가하였다. 또한, 단원자 촉매의 중심 금속 원자 주위 환경을 변화시켜가며 각 반응의 활성도를 분석하였다. 이렇게 다양한 촉매 구조에서의 결과를 바탕으로 촉매의 성능을 평가할 수 있는 핵심 기술자를 선정함으로써, 이후 새로운 단원자 촉매의 성능을 쉽게 예측하고 설계할 수 있을 것이다.