

H₂O₂ 직접 합성 촉매로서 우수한 활성을 지닌 PtAu 고용체 합금 나노입자

이홍우^{1,2}, 한근호², 이관영^{2,†}, 한상수¹

¹한국과학기술연구원 계산과학연구센터; ²고려대학교 화공생명공학과

과산화수소(H₂O₂) 직접 합성 촉매로써 좋은 수율을 보여온 Pd이 중점적으로 사용되어 왔으나, 우수한 활성으로 H₂O와 같은 부산물을 쉽게 형성하는 문제가 있었고, 결국 낮은 선택도로 이어졌다. 따라서, 주로 화학 반응성이 적다고 알려진 Au를 Pd 입자에 도입하고자 하는 연구 흐름으로 촉매가 개발되어져 왔다. 그러면서, Bimetallic 촉매 후보군에서 열역학적으로 서로 섞이기 힘든 조합 들은 쉽게 배제되어 왔다. 본 연구에서는, 수소를 잘 해리시키는 것으로 알려진 Pt와 표면에 Inactive 한 특성을 부여해 줄 수 있는 Au를 서로 Solid-solution alloying 시켜 H₂O₂ 합성 촉매 활성을 향상시켜보고자 하였다.

본래 Ambient 한 조건에서는 열역학적으로 잘 섞이지 않던 두 금속을 간단한 환원 방법을 통해, FCC 구조를 갖는 Miscible PtAu 나노 입자를 성공적으로 합성하였으며, TiO₂에 성공적으로 Supported 되었음을 확인하였다. 개발된 입자의 촉매 성능을 평가하였으며, Au의 함량을 점점 증가시켰더니 우수한 선택도를 가짐과 동시에 오히려 더 높은 생산성을 보이는 것으로 나타났다. 우수한 촉매 활성을 가질 수 있었던 H₂O₂ 합성 메커니즘을 DFT 계산을 통해 입증하였다.