

Mechanistic study of the oxygen evolution reaction (OER) at the surface of $\text{PrBa}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{1.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_{5+x}$ for the anode of protonic ceramic electrolysis cell based on density functional theory (DFT) calculations

장규환, 지호일¹, 유종석[†]

서울시립대학교; ¹KIST

(jsyoo84@uos.ac.kr[†])

환경 오염에 대한 규제가 강해짐에 따라 기존의 화석연료를 대체할 친환경적인 에너지원으로 수소 에너지에 대한 관심이 증가하고 있다. 현재 수소 생산량의 95% 이상은 화석 연료를 개질하는 과정에서 나오는 부생수소를 이용하는 방식으로 생산되기 때문에, 완전히 친환경적인 수소 에너지의 사용을 위해 물의 전기 분해를 이용하여 수소를 생산하는 수전해 전지가 주목받고 있다. 다양한 수전해 전지 중 프로톤 세라믹 수전해 전지 (protonic ceramic electrolysis cell, PCEC)는 높은 온도 조건에서 진행되어 귀금속 촉매를 사용하지 않고도 좋은 수전해 성능을 보였다. PCEC의 성능은 산화 전극의 이온전도도 및 oxygen evolution (OER) 활성에 크게 영향을 받는다고 알려져 있다. 하지만 현재 산화 전극 표면에서 이온이 형성되는 반응 및 OER 메커니즘에 대한 이해는 부족한 상황이다. 따라서 본 연구에서는 density functional theory (DFT)를 이용하여 PCEC의 산화 전극으로 좋은 성능을 보인 $\text{PrBa}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{1.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_{5+x}$ 의 표면에서 물의 분해에 의한 프로톤과 산소 이온의 형성 반응, 그리고 산소 이온의 참여를 포함하는 OER 메커니즘을 규명하고자 한다.