

## Computational study on single-atom catalysts for the oxygen evolution and reduction reactions

김지수, 장규환, 유종석<sup>†</sup>

서울시립대학교

(jsyoo84@uos.ac.kr<sup>†</sup>)

환경에 대한 관심이 증가함에 따라 기존의 화석 연료를 이용한 전기 에너지 생산 방식을 대체하는 연료전지를 이용한 친환경적 전기 생산 사이클이 주목받고 있다. 친환경적인 발전 사이클은 신재생 에너지를 이용하여 물을 전기 분해하여 산소와 수소를 생산한 후 이렇게 생산된 산소와 수소를 이용하여 전기 에너지를 생산하는 방식으로 부산물이 없고, 간헐적으로 발생하는 신재생 에너지를 저장할 수 있다는 장점이 있다. 이러한 에너지 전환 시스템의 효율을 높이기 위해서는 물을 전기 분해하여 수소와 산소를 얻는 산소 발생 반응(Oxygen Evolution Reaction, OER)과 수소와 산소를 이용하여 에너지와 물을 얻는 산소 환원 반응(Oxygen Reduction Reaction, ORR)에 참여하는 촉매의 활성이 높아야 한다. 따라서 본 연구에서는 Density Functional Theory(DFT)를 활용하여, 이론적으로 촉매 표면에서의 반응 중간체의 흡착 에너지를 계산하여 촉매의 활성을 예측하고 이를 통해 높은 활성을 가지는 촉매를 설계하고자 한다. 본 연구에서는 DFT를 활용하여 그래핀 위에 담지된 형태의 단원자 촉매를 디자인하고 이 촉매들에 대하여 산소 발생 반응과 산소 환원 반응의 활성도를 평가하였다. 또한, 단원자 촉매의 금속원자 주변 환경을 변화시켜가며 반응의 활성도를 평가하고, 촉매들의 특징을 파악하는 연구를 진행하였다.