

## Pt<sub>3</sub>M (M=Co, Fe) 합금의 O<sub>2</sub> 분해 촉매성과 자성에 대한 제일원리계산

권오룡\*, 홍순철  
울산대학교 물리학과

현재 PEM 연료전지는 공기극(cathode)과 연료극(anode)에서 Pt촉매가 사용된다. 이는 Pt가 국소적으로 매장 이 되어 있기 때문에 높은 가격 또는 자원의 무기화가 예상된다. 특히 O<sub>2</sub> 환원반응을 하는 공기극(cathode) 촉매에서 연료극(anode) 촉매보다 느린 반응과 표면 피독현상이 나타나기 때문에 이를 대체하기 위한 많은 연구가 진행되고 있다. 본 연구에서는 공기극(cathode)에서 Pt를 대체할 수 있는 Pt<sub>3</sub>M (M=Co, Fe)합금에 대하여 연구하였다.

제일원리 계산방법은 VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)을 이용하였으며 Pt에 대표적인 강자성물질인 Co, Fe이 합금에 첨가가 됨에 따라 어떠한 자성상태가 안정한지를 총에너지 계산을 통하여 확인하였으며, 그리고 표면에서 원자들의 전자구조계산을 통하여서 합금의 자성구조가 O<sub>2</sub>흡착에 어떠한 영향을 미치는지 분석하였다. 그리고 VASP계산의 NEB(NUDGED ELASTIC BAND) 방법을 통하여 합금표면에 흡착된 O<sub>2</sub>분자가 해리될 때 가지는 경로와 각각의 에너지를 분석하였다.