

## 두께에 따른연료전지 공기극 Pt(111) 촉매 반응성과 자성: 제일원리계산

권오룡\*, 홍순철

울산대학교, 물리학과, 울산시 남구 무거동 대학로 93, 680-749

현재 운송수단에서 화석연료기관을 대체 할 동력기관으로 연구 되고 있는 PEM 연료전지는 공기극(cathode)과 연료극(anode)에서 Pt 을 촉매로 사용한다. 하지만공기극에서 일어나는 O<sub>2</sub>환원반응은 하는 연료극에서 일어나는 H<sub>2</sub>의 산화반응에 비해 느려 공기극의 촉매 작용이 연료전지의 전체 효율을 결정한다. 또한 표면 피독 현상도 연료극에 비해 심하여 공기극의 촉매로 사용되는 Pt를 대체하거나 Pt 사용량을 줄이기 위한 연구가 요구되고 있다.

본 연구에서는 Pt박막의 두께에 따른 촉매 반응성을 제일원리 계산방법으로 연구하여 전자구조와 자성이 촉매반응성에 미치는 영향을 알아보았다. 제일원리 계산방법으로 VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)을 이용하여 Pt박막에서 가장 촉매반응성이 높은 것으로 알려진 Pt(111) 표면의1, 2, 3, 4, 5층 박막을 계로 설정하였다. 각 층간 거리는 힘과 총에너지 계산을 통해 완전히 이완시켰다. 모든 층수의 Pt(111) 박막에서 bridge 자리의 O<sub>2</sub>흡착이 가장 안정하였으며, O<sub>2</sub>분자가 해리 된 후 O 원자는 fcc자리에 흡착하는 것이 가장 안정한 것으로 계산되었다. 이를 바탕으로NUDGED ELASTIC BAND (NEB) 방법을 통하여 O<sub>2</sub>분자의 해리 경로를 계산하였다. 계산 결과 TSΔE는 1층, 2층, 3층, 4층의 Pt(111) 박막에서 TSΔE가 각각, 1.45 eV, 0.76 eV, 0.67 eV, 0.76 eV로 계산되었다. 촉매 반응성을 이론적으로 예측하는 방법으로 d-band center 이론으로 분석하는 것이 대표적인데 본 연구에서는 d-orbital을 m=0, m=1, m=2 그리고 d orbital 전체로 분석하였으며, NEB계산 결과와 비교하여 보면, m=0의 d-band center와 각 층 구조의 TSΔE가 밀접한 관련이 있음을 알 수 있었다.