



GIST(광주과학기술원) 보도자료

<http://www.gist.ac.kr>

보도 일시

배포 즉시 보도 부탁드립니다.

보도자료

대외협력팀 김미연 팀장

062-715-2020 / 010-5302-3620

담당

대외협력팀 이나영 행정원

062-715-2024 / 010-2008-2809

자료 문의

물리·광과학과 문봉진 교수

062-715-2882 / 010-4508-5474

GIST, 합금 촉매의 화학반응 실시간 관찰 성공

- 합금 촉매의 반응성 향상과 관련된 원리 밝혀

- GIST(총장 문승현) 물리·광과학과 문봉진 교수 연구팀이 KAIST 연구팀과의 공동 연구를 통해 합금 촉매 표면에서 벌어지는 화학 반응 과정을 실시간으로 관찰, 합금 촉매의 반응성 향상과 직결된 반응 원리를 규명했다.
 - 연구팀의 관찰 결과는 차세대 고성능 촉매 설계에 활용할 수 있는 반응성 향상 원리의 기반이 될 것으로 기대된다.
- 문봉진 교수 연구팀이 KAIST(총장 신성철) EEWS 대학원 박정영, 정유성 교수 연구팀과 공동으로 수행한 이번 연구 결과는 종합 과학 분야 국제 학술지 ‘사이언스 어드밴시스(Science Advances)’ 7월 13일자 온라인 판에 게재됐다. (논문명 : Adsorbate-driven reactive interfacial Pt-NiO_{1-x} nanostructure formation on the Pt₃Ni(111) alloy surface, 백금-니켈 합금 표면위의 촉매 활성도가 높은 금속-산화물 경계 나노구조물 형성의 실시간 관찰)
- 합금 촉매는 단일 금속 또는 금속 산화물 촉매에 비해 뛰어난 성능을 보여 연료전지반응이나 탄소계열 공업화학반응 등에 이용되고 있다. 하지만 합금 촉매 반응의 결과에 대한 근본적인 원리는 자세히 밝혀지지 않아 촉매 연구 과정에서 발생하는 예상치 못한 결과를 설명하기 어려웠다.

- 연구팀은 문제 해결을 위해 기존의 표면 직접 관찰 기기의 한계점을 크게 개선한 ‘상압 주사 터널링 전자 현미경’과 ‘상압 X-선 광전자분광기’를 활용해 백금-니켈 합금 촉매 표면의 역동적인 변화 과정을 관찰했다.
 - 이를 통해 실제 반응 환경에서 백금-니켈 합금 촉매의 반응성 향상 이유가 금속-산화물 계면 나노구조의 표면 형성으로부터 시작됨을 밝혀냈다.
 - 또한 일산화탄소 산화반응 과정에서 백금 혹은 니켈 산화물 단일 촉매에 비해 금속-산화물 계면 나노구조가 갖는 비교적 낮은 활성화 에너지는 촉매 반응 원리 상 반응성 향상에 보다 유리한 화학 반응 경로를 제시할 수 있음을 확인했다. 이 결과는 밀도범함수 이론을 바탕으로 한 양자역학 모델링 계산 결과를 통해 입증됐다.
- 상압 표면 분석을 주도한 GIST 문봉진 교수는 “이 연구는 외부의 분자들과 쉘 새 없이 반응하면서 움직이는 마치 살아서 숨쉬고 있는 원자의 움직임과 반응성을 동시에 측정한 완벽한 표면물리연구이다”고 말했다.
- KAIST 박정영 교수는 “초고진공 환경을 기반으로 한 기존의 표면 과학이 풀지 못한 실제 반응 환경에서의 합금 촉매 반응 과정을 직접 관찰한 첫 연구사례이다”고 말했다.
 - 이론적 원리 규명 연구를 주도한 KAIST 정유성 교수는 “직접 관찰과 양자 계산을 통해 합금 촉매의 주된 활성 자리가 계면임을 규명한 연구로, 다양한 합금 촉매의 설계 및 최적화에 중요한 단서가 될 것이다”고 말했다.
- 이번 연구는 기초과학연구원 및 한국연구재단, GIST(광주과학기술원) 등의 지원을 받아 수행됐다.

붙임 : 연구개요, 용어설명, 그림설명

연구 개요

- 본 연구에서는 백금-니켈 합금촉매를 이용하여, 실제 화학 반응 환경하에서 형성되는 금속-산화물 계면 나노구조가 촉매 반응성 향상에 결정적 영향을 줄 수 있음을 최초로 직접 관찰하였다.
- KAIST 박정영 교수 연구팀은 상압 주사 터널링 전자 현미경을 이용하여 실제 촉매 반응 환경에서 벌어지는 백금-니켈 합금 촉매 표면의 역동적인 변화 과정을 관찰하였고, GIST 물리·광과학과 문봉진 교수 연구팀과의 공동 연구를 통해 촉매 반응 중 형성되는 금속-산화물 계면 나노구조가 선택적인 반응물 흡착 유도를 통한 촉매 반응성 향상에 기여할 수 있음을 발견하였다. 또한, 실험적으로 이루어진 해당 협동 연구 결과를 KAIST 정유성 교수 연구팀이 이론적으로도 해석해냄으로써 금속-산화물 계면 나노구조물 형성과 촉매 반응성과의 근원적 연결 고리를 규명하였다.
- 연구진의 결과는 합금 촉매가 갖는 뛰어난 촉매 반응성의 원리를 설명하는 실제 반응 경로를 최초로 발견하였고, 기존의 표면 과학 분야에서 발견 혹은 설명이 불가능했던 실제 화학 반응 환경하에서의 물질 표면 변화를 관찰해냄으로써 계면에서 벌어지는 반응물과 촉매 표면간의 보다 상세한 상호작용뿐만 아니라 보다 뛰어난 성능의 차세대 촉매 설계 전략을 제시하였다는 점에서 의의가 크다.

용 어 설 명

1. 백금-니켈 합금 촉매 (Pt-Ni bimetallic alloy catalyst)

상대적으로 가격이 비싼 백금 촉매에 일정 비율의 니켈을 섞어 제조한 합금으로써, 백금 원소의 비율을 낮춰 가격적인 문제를 해소함과 동시에 반응성 향상을 함께 꾀할 수 있는 공업 촉매 물질.

2. 초고진공 (Ultra-high vacuum)

우주 환경과 유사한 범위의 압력인 10^{-10} Torr를 유지할 수 있는 공간을 통칭하며, 마치 텅 비어 있는 환경과 같으므로 전자와 같은 미세 입자의 이동에 거의 영향을 주지 않아 표면 분석 장비 내부에 장착된 전자에너지 분석기 등에 유리한 환경을 제공한다.

3. 상압 환경 (Ambient pressure)

초고진공 환경과는 크게 다르게 우리 인류가 실제 숨 쉬며 살아가는 환경을 통칭하며, 이 때 기체 혹은 액체상을 갖는 특정 반응물 혹은 입자가 고체상 물질과 끊임없이 상호작용한다.

4. 금속-산화물 계면 나노구조 (Metal-oxide interfacial nanostructure)

단일 금속 혹은 산화물과는 달리 이들 구성물이 물리적으로 함께 교묘히 섞임으로써 형성하는 수 나노미터 (10^{-9} m) 단위를 갖는 구조물을 의미한다. 이 때 각 구성물 간의 경계면에는 수 개에 원자 크기에 불과한 옹스트롬 (10^{-10} m) 단위의 매우 작은 공간이 존재하며, 이는 활발한 전자교환을 바탕으로 한 물리·화학적으로 보다 유리한 활성화 자리 역할을 한다.

5. 촉매전자학 (Catalytronics)

촉매반응 중에 발생하는 핫전자와 촉매 반응의 관계를 규명하여 이를 통한 고효율의 촉매 제작과 촉매의 전기적 제어를 목표로 하는 분야.

그림 설명

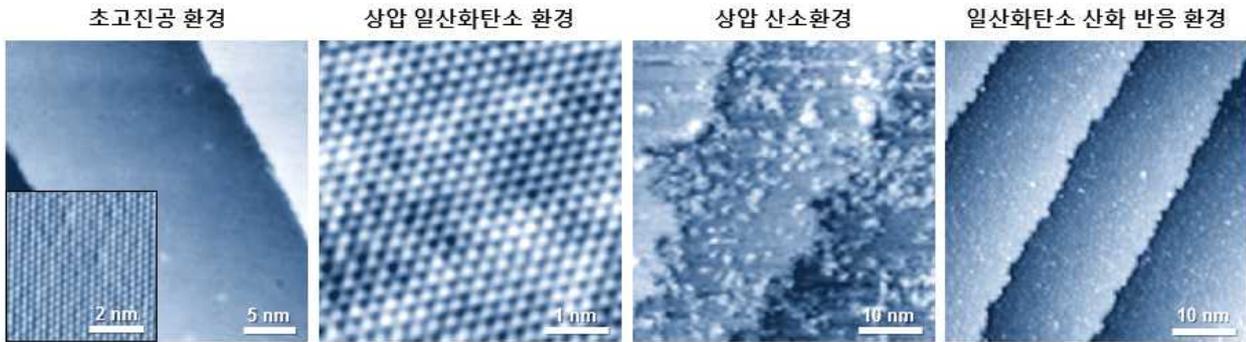


그림 1. 주사 터널링 전자 현미경을 이용한 백금-니켈 촉매 표면의 초고진공, 상압 일산화탄소, 상압 산소, 일산화탄소 산화 반응 환경에서의 실시간 표면 직접 관찰 이미지

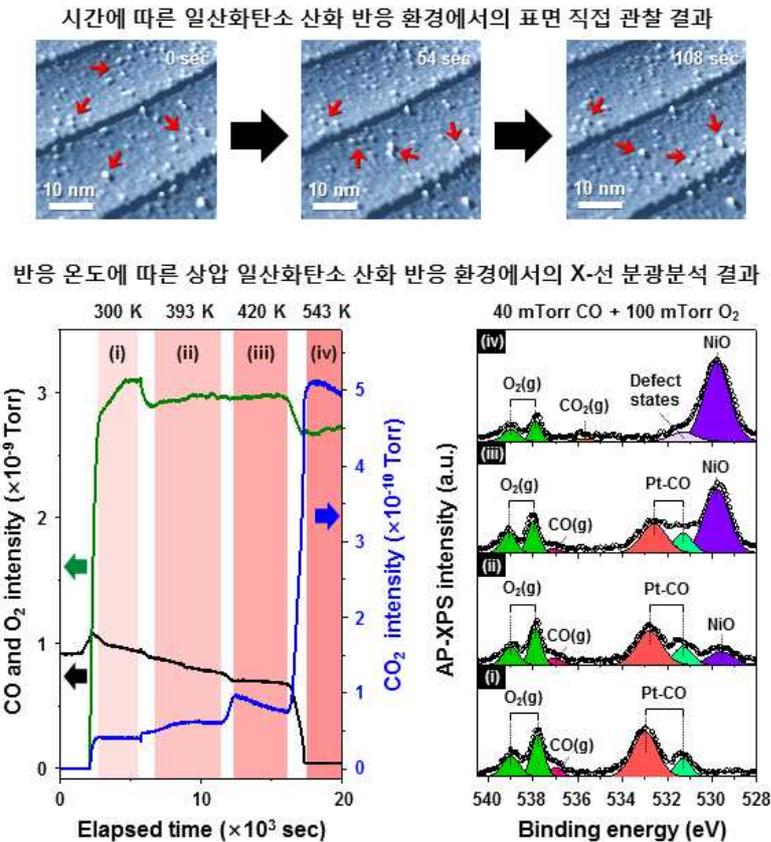


그림 2. 상압 일산화탄소 산화 반응 환경에서의 시간에 따른 표면 직접 관찰 이미지들과 온도의 변화에 따른 상압 광전자분광 분석 결과

금속-산화물 계면 나노구조 형성에 따른 일산화탄소 산화반응 경로

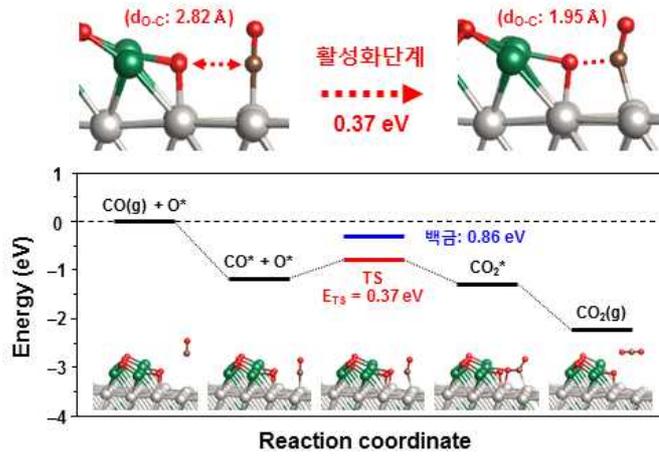


그림 3. 밀도범함수 양자모델 계산을 이용한 백금-니켈 촉매 표면에 형성된 금속-산화물 계면 나노구조에서의 일산화탄소 산화 반응 경로에 따른 표면 에너지 변화