



# GIST(광주과학기술원) 보도자료

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

보도 일시	2019. 4. 24.(수) 조건(온라인 4. 23.(화) 12:00 이후 보도)	
보도자료 담당	대외협력팀 김미연 팀장	062-715-2020 / 010-5302-3620
	대외협력팀 이나영 행정원	062-715-2024 / 010-2008-2809
자료 문의	신소재공학부 김봉중 교수	062-715-2341

## 고온에서도 서로 뭉쳐지지 않는

### 금속 나노 촉매 입자의 자발 생성 원리 규명

- 금속 나노 입자의 크기, 밀도, 분포를 산화물 기판 위에서 제어할 수 있는 원리를 실시간 투과전자현미경 기법을 이용하여 규명... 연료전지 등 재생에너지와 가스 센서 등 기능성 촉매 소자의 내구성과 활성 증대 기대
- GIST 김봉중 교수 공동연구팀, 연구결과 화학분야 최고 권위지인 미국화학회지 *Journal of the American Chemical Society*에 논문 게재

□ GIST(지스트, 총장 김기선) 신소재공학부 김봉중 교수(교신저자)와 카이스트 신소재공학부 정우철 교수(공동교신저자) 공동연구팀이 산화물 기판에서 고온 환원 분위기를 형성시켰을 때 용리\*되는 금속 촉매 입자의 생성 원리를 투과전자현미경\*\* 내에서 실시간 관찰을 통해 세계 최초로 규명하였다.

\*용리(ex-solution): 고온 환원 분위기(섭씨 700-800도 이상, 수소분위기)를 주었을 때, 특정 산화물 기판 또는 지지체(주로 페로브스카이트 구조의 산화물질, 예:  $ABO_3$ )에서 특정 금속성분이 분리되어 기판 표면으로 나오는 현상. 주로 B 원자 사이트에 치환된 귀금속 또는 고활성 금속이 기판 표면으로 나와 입자형태를 이룸

\*\*투과전자현미경(transmission electron microscope): 고전압의 전자 빔(beam)을 쏘아 얇은 물질을 투과하게 함으로써 수십만 배 이상 확대해 관찰할 수 있는 현미경

◦ 또한 원자 해상도에서 입자성장을 관찰하여, 촉매의 특성을 결정짓는 입자의 크기, 밀도, 분포 등을 온도와 결정립\*의 크기 및 분포를 조절하여 제어하는데 성공하였다.

\*결정립(grain): 결정질 재료에서 원자배열이 같은 영역

□ 산화물 지지체를 이용한 금속 촉매 입자의 용출 현상은 촉매 입자가 지지체

표면에 박혀있게 되어 고온에서도 조대화\*가 일어나지 않아, 고온 촉매 반응 (예: 가스센서 등)과 재생 에너지(예: 가스개질, 연료전지 등) 응용에 있어서 매우 중요하게 여겨져 왔다. 그러나 기존의 연구는 용출된 후의 샘플 분석에 의존하였기 때문에 입자의 크기, 밀도, 분포를 제어 할 수 있는 원리를 이해할 수 없었다. 이로 인해 촉매의 활성과 내구성을 극대화 하는 것이 불가능하였다.

\*조대화(Coarsening): 화학적 잠재 에너지가 크고 입자 크기가 작은 나노 촉매 입자에서 화학적 잠재 에너지가 작고 입자 크기가 큰 나노 촉매 입자로 원자가 이동하면서 촉매 입자의 크기와 밀도가 순 간적으로 변하는 현상

□ 본 연구에서는 원자해상도와 빠른 이미징 획득이(예: 1초에 30 프레임) 가능한 실시간 투과전자현미경 기법을 통해  $\text{SrTi}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{O}_{3-6}$  다결정 기판에서 코발트(Co) 금속 원소의 용출현상의 운동학을 이해하여 성장 메커니즘을 규명하고 이를 모델링했다.

○ 이를 통해, 먼저 입자의 크기는 오직 온도에 의해 조절이 가능하다는 것을 밝혔다. 또한 용출된 금속 입자들을 모두 결정립계\*에서만 생성시켜 용출온도를 섭씨 500도까지 낮추었고, 결정립의 크기와 분포를 조절하여 입자의 밀도와 분포를 최적화시킬 수 있었다. 나아가 열역학적 모델을 만들어 입자 성장의 반응제어단계\*\*를 알아내었고, 코발트 공공(Vacancy, 원자가 빠진 결정격자의 위치)생성과 용출 엔탈피\*\*\*, 그리고 입자 성장을 위한 활성화 에너지\*\*\*\*를 정량화하였다.

\*결정립계(Grain boundary): 다른 결정립이 만나서 형성되는 영역으로 원자 결합에 불일치가 생겨 높은 자유에너지를 갖음

\*\*반응제어단계(Rate limiting step): 반응속도를 결정짓는 단계로 높은 에너지 장벽으로 인해 가장 반응 속도가 느림

\*\*\*엔탈피(Enthalpy): 열역학적 계에서 뺄 수 있는 에너지로, 내부 에너지와 계가 부피를 차지함으로써 얻어 올 수 있는 에너지의 합으로 정의됨

\*\*\*\*활성화 에너지(Activation energy): 특정 화학 반응이 진행되기 위해 필요한 최소한의 에너지

○ 추가적으로 일산화탄소(CO) 환원반응 실험을 통해 산화물 기판에 형성된 촉매의 반응사이트가 금속과 산화물 기판의 경계임을 알아내고, 이를 제일 원리계산을 통해 검증하였다.

□ 김봉중 교수는 “이번 연구성과는 금속촉매의 용출 현상을 정량적으로 규명하

고, 결정립을 용출 현상의 새로운 시스템으로 활용한 최초의 결과로써, 향후 전기자동차, 가스센서, 가스개질 등의 분야에 획기적인 개선을 가져올 수 있을 것으로 기대한다”고 말했다.

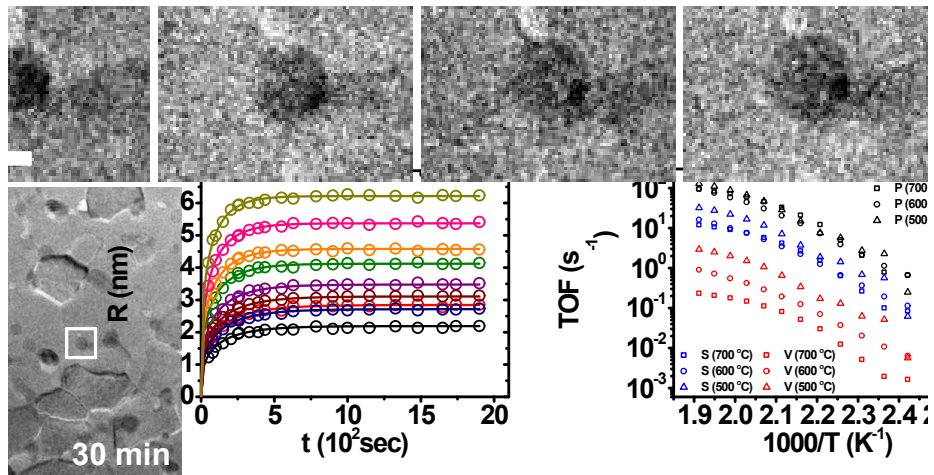
- GIST 신소재공학부 김봉중 교수(교신저자)와 카이스트 정우철 교수(공동 교신저자)가 주도하고 GIST 신소재공학부 조용륜 연구원과 MIT 구본재 연구원이 참여한 이번 연구는, 삼성미래기술육성과제의 지원을 받아 수행되었으며, 이번 연구성과는 화학분야 최고 권위지인 미국화학회지 Journal of the American Chemical Society에 2019년 4월 2일자 온라인으로 게재되었다. <끝>

## 논문의 주요 내용

### 1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Journal of the American Chemical Society  
(2018 JCR Impact Factor: 14.357)
- 논문명 : Growth kinetics of individual Co particles ex-solved on  $\text{SrTi}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{O}_{3-d}$  polycrystalline perovskite thin films
- 저자 정보 : 조용륜(GIST 박사과정, 제1저자), 구본재(MIT 박사후과정, 제1저자), 서민지(GIST 박사과정, 공동저자), 김준규(KAIST 박사과정, 공동저자), 이시원(KAIST 박사과정, 공동저자), 김경학(POSTECH 박사과정, 공동저자), 한정우(POSTECH, 공동저자), 정우철 교수(KAIST, 공동교신저자), 김봉중 교수(GIST, 교신저자)

# 그림 설명



[그림1] 코발트 입자 용출현상의 실시간 관찰 분석 및 CO 환원 반응 결과.

- (1) 섭씨 800도에서 일어나는  $\text{SrTi}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{O}_{3-\delta}$  다결정 기판에서의 Co 용출 반응 실시간 이미지들
- (2) Co 입자크기의 시간에 따른 변화
- (3) 온도에 따른 CO 환원 반응에 대한 turnover frequency 변화