



GIST(광주과학기술원) 보도자료

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

보도 일시	배포 즉시 보도 부탁드립니다.	
보도자료 담당	대외협력팀 김미연 팀장	062-715-2020 / 010-5302-3620
	대외협력팀 이나영 행정원	062-715-2024 / 010-2008-2809
자료 문의	지구·환경공학부 이재영 교수	062-715-2440 / 010-9141-1894

수소경제 핵심, 연료전지 실용촉매 개발

- 실험과 계산이론의 정확한 부합을 통해 학문적, 산업적 파장이 큰 연구성과..
철기반 비귀금속 촉매의 내구성 극대화
- GIST 이재영 교수·KAIST 김형준 교수 공동연구팀, 물리화학 분야 세계적 학술지
“Journal of Physical Chemistry Letters” 에 논문 게재

- GIST(지스트, 총장 김기선) Ertl 탄소비움연구센터 이재영 교수(지구·환경공학부)와 한국과학기술원(KAIST) 화학과 김형준 교수 공동연구팀이 값싼 비귀금속 기반의 고효율 연료전지 실용촉매 개발에 성공했다.
 - 연료전지 공기극 반응인 산소환원반응 성능을 결정짓는 정확한 요인을 각각 실험과 계산화학으로 관찰하였고, 이를 토대로 고성능, 고내구성의 저가 비귀금속 철기반 산소환원반응 촉매를 개발했다. 이번 연구성과는 수소경제 구현을 위한 고성능 연료전지 개발에 있어 새로운 가능성을 제시한 것으로 평가된다.
- 공기극 산소환원반응은 느린 반응 속도와 함께 높은 과전압이 요구되어 연료전지 효율 향상에 걸림돌로 작용하고 있다. 현재는 백금이 가장 적합한 촉매로서 평가받고 있으나 고가이면서 제한된 자원으로 수소전기차 가격경쟁력의 제한요인이다. 이로 인해 가격 경쟁력이 높은 비귀금속 기반의 우수한 성능과 내구성을 보유한 촉매 제조 관련 연구가 주목받고 있다.

- 비귀금속 촉매 개발에서 가장 중요한 점은 산소환원반응 성능을 결정하는 변수를 찾고 이에 기반한 최적의 촉매를 설계하는 것이다. 변수를 찾아내기 위해서는 전기화학적 실험과 최신계산이론에 근거한 뒷받침이 필요하다.
- 연구팀은 전기방사법*을 통해 다양한 비귀금속(니켈, 코발트, 철, 은)이 담지된 탄소나노섬유 촉매를 제조한 뒤, 이를 활용해 수용액 상에서 산소의 환원반응 성능을 비교하였다. 밀도범함수** 이론에 기반하여 제조된 촉매의 구조 및 일함수 등을 계산하였고, 촉매 성능과 상관관계를 갖는 변수 발견을 시도하였다.
 - * 전기방사법: 연속적인 유기/무기 나노섬유가 높은 전기장 하에서 연신이 되어 접지된 드럼 기판 위에 형성되는 방법
 - ** 밀도범함수: 물질, 분자 내부에 전자가 들어있는 모양과 그 에너지를 양자역학으로 계산하기 위한 이론
- 촉매의 성능은 탄소나노섬유에 담지된 비귀금속의 일함수에 의해 결정되었다. 비귀금속의 낮은 일함수는 근처 탄소층에 전자를 많이 전달하게 되며 이로 인해 산소가 탄소층의 표면에서 더 높은 빈도로 환원할 수 있게 됨을 밝혔다. 결과적으로 철기반의 탄소나노섬유가 최적의 일함수를 가지고, 산소환원반응에 대한 가장 높은 성능을 나타냈다.
- 또한, 연료전지의 수명을 증대시키기 위해 촉매의 내구성도 중요한 요인이다. 즉, 높은 성능과 높은 내구성을 모두 만족하는 비귀금속 산소환원반응 촉매를 디자인하는 것이 중요하다. 공동연구팀은 철기반의 탄소나노섬유의 내구성을 극대화시키기 위해서 10%의 코발트를 포함시켜 우수한 가속내구성 평가결과를 확인하였다.
- GIST 이재영 교수 및 KAIST 김형준 교수는 “이번 연구는 활성이 있는 것으로 보고되고 있는 철기반 비귀금속 촉매의 내구성 문제를 실험과 계산으로 해결한 것”이라며 “알카라인 수소기반연료전지의 상용화를 앞당길 수 있을 것으로 기대된다”고 연구의 의의를 설명했다.

- GIST 이재영 교수와 KAIST 김형준 교수가 주도하고 KAIST 하윤후 박사과정생(공동 1저자)과 GIST 강신우 석사과정생(공동 1저자)이 주도적으로 참여한 이번 연구는 한국연구재단이 지원하는 기후변화대응사업의 지원으로 수행되었으며, 물리화학 분야 세계적 학술지인 Journal of Physical Chemistry Letters 5월 22일자 온라인 판에 게재되었다.

논문의 주요 내용

1. 논문명, 저자정보

- 논문명 : Experimental and Density Functional Theory Corroborated Optimization of Durable Metal Embedded Carbon Nanofiber for Oxygen Electrocatalysis
- 저자 정보 : 하윤후(제1저자, KAIST), 강신우(제1저자, GIST), 함가현(공동저자, GIST), 이재영(교신저자, GIST) , 김형준(교신저자, KAIST)

용 어 설 명

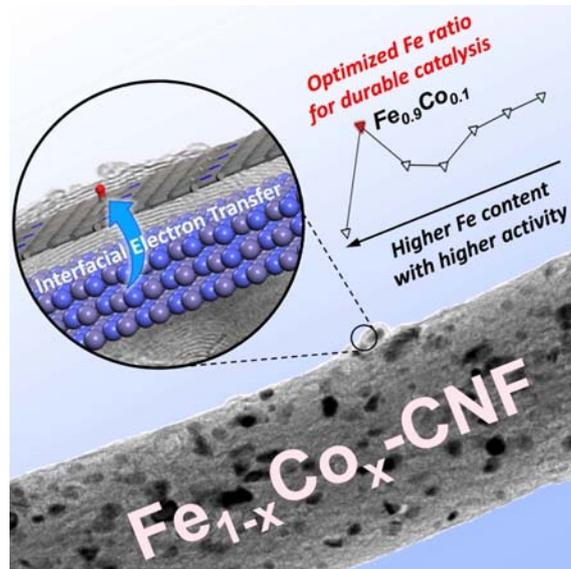
1. Journal of Physical Chemistry Letters

- 물리화학 분야의 세계적 권위를 가진 국제학술지 (2017년 기준 영향력 지수 8.709) PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL (3/37): 8.1%, 상위 10% 이내 저널

2. 전기화학적 산소환원반응

- 대기 중에 21% 존재하는 산소를 수산화 이온으로 환원시키는 기술로, 알칼리 연료전지의 환원극에서 발생한다. 이 반응은 연료전지 전체시스템의 속도결정단계에 해당하기 때문에 이를 개선시키는 전기화학 촉매 연구는 매우 중요하다.

그림 설명



(그림 1) 금속담지 탄소나노섬유는 얇은 탄소층이 금속을 감싸고 있는 구조를 가지고 있다. 금속과 탄소층의 서로 다른 일함수로 인해 금속의 전자가 탄소층으로 전달되게 되고, 높아진 탄소층의 전자밀도가 산소환원 반응에 필요한 전자를 공급하게 되어 결과적으로 금속의 일함수가 산소환원 반응의 변수로서 작용하게 된다. 비귀 금속 중, 철이 성능의 정점에 있으나 코발트와의 합금을 통해서 고성능, 고내구성을 함께 보유하고 있는 산소 환원반응 촉매를 합성할 수 있다. 이 연구는 담지 금속의 일함수에 따라 탄소층에 전달하는 전자의 양을 조절할 수 있음을 시사하며, 안정한 탄소층을 가진 비귀금속 촉매 설계에 있어 최적의 방향을 제시한다.