

G I S T	지스트(광주과학기술원) 보도자료	
	http://www.gist.ac.kr	
보도 일시	2019년 11월 13일(수) 조건(온라인 11. 12.(화) 낮)부터 보도해 주시기 바랍니다.	
보도자료 담당	홍보팀 김효정 팀장	062-715-2061 / 010-3644-0356
	홍보팀 이나영 선임행정원	062-715-2062 / 010-2008-2809
자료 문의	신소재공학부 최창혁 교수	062-715-2317

**최창혁 교수 공동연구팀,
수소생산을 위한 전극소재 설계 핵심기술 규명
- 염기 수전해용 백금 기반 코어-셸 모델 촉매 설계 -**

- GIST(지스트, 총장 김기선) 최창혁 교수(신소재공학부), 최상일 교수(경북대학교 화학과), 임형규 교수(강원대학교 화학생명공학부) 공동 연구팀이 물을 분해해 수소를 얻는 과정에 대한 이론적 원리를 규명하였다.
 - 수소와 산소의 반응으로 물과 전기를 생산하는 연료전지와 반대 되는 개념으로, 물에서 수소를 생산하는 수전해(水電解, water electrolysis)는 차세대 청정에너지 가운데 하나로 꼽히는 수소를 얻을 수 있는 기술로 실용화를 위한 연구가 활발하다.
- 하지만 에너지원으로 쓸 만큼 충분한 양의 수소를 얻기 위해서는 수전해의 느린 반응속도와 이에 따른 높은 전력소모를 개선하는 것이 숙제로 남아 있다.
 - 물분해를 돕는 촉매의 활성을 높이려는 연구가 활발하나 촉매가 용액에서 작동하는 원리조차 완전히 이해하지 못하는 실정으로 새로운 촉매소재 설계에 어려움이 있었다.
- 연구팀은 마치 달걀 노른자와 흰자처럼 팔라듐 또는 팔라듐 수소화물을 백금 원자층으로 감싼 팔라듐-백금 또는 팔라듐 수소화물-백금 코어

셸(core-shell) 구조의 촉매를 고안하고, 백금 원자층이 두꺼워질수록 촉매의 성능이 높아지는 것을 알아냈다.

- 단일층부터 다섯개층에 이르기까지 백금원자를 정밀하게 코팅 하면서 표면 백금의 원자거리가 수소생산량에 영향을 미치는 것을 알아냈다. 코어셸 구조의 촉매를 표면 백금의 원자거리가 제어된 새로운 촉매 모델로 활용하고, 이를 통해 수소생산반응이 백금의 원자거리에 영향을 받는 것을 알아낸 것이다.
- 또한 내부의 팔라듐으로 인해 표면 백금의 전자구조가 변경, 수소 생산 반응에 영향을 미치는 것도 확인할 수 있었다. 팔라듐 수소화물보다 팔라듐을 코어로 사용하였을 때 더 높은 반응 성능을 나타내는 결과를 얻었다.

□ 수소 대량생산을 위한 수전해 촉매의 설계 및 제조에 대한 새로운 아이디어를 제공함으로써 고효율·저비용 수소 대량생산과 관련 연구개발에 활기를 불어 넣을 것으로 기대된다.

□ 지스트 최창혁 교수는 “이번 연구의 가장 큰 성과는 효율적 수소 생산을 위한 전극소재의 핵심 개발 전략을 수립한 것” 이라면서, “추후 이번 연구를 바탕으로 수소경제의 핵심이 될 고성능 수소 발생 촉매를 지속적으로 연구 개발할 계획” 이라고 밝혔다.

- 이번 연구성과는 과학기술정보통신부·한국연구재단 기초연구사업, 미래소재디스커버리사업, 나노·소재원천기술개발사업 및 KIST기관고유사업의 지원으로 수행된 이번 연구의 성과는 ‘미국화학회지(Journal of the American Chemical Society)’ 에 10월 17일 게재되었다.

※ 논문명 : Theoretical and Experimental Understanding of Hydrogen Evolution Reaction Kinetics in Alkaline Electrolytes with Pt-Based Core-Shell Nanocrystals

1 주요내용 설명

< 논문명, 저자정보 >

논문명	Theoretical and Experimental Understanding of Hydrogen Evolution Reaction Kinetics in Alkaline Electrolytes with Pt-Based Core-Shell Nanocrystals
저자	최상일 교수(교신저자/경북대학교), 최창혁 교수(교신저자/GIST), 임형규 교수(교신저자/강원대학교), 김정현(제1저자/경북대학교), 김해솔 (제1 저자/GIST) 외 5명

< 연구의 주요내용 >

1. 연구의 필요성

- 염기 수전해는 높은 촉매 안정성과 더불어 대량의 수소를 생산할 수 있어 전 세계적으로 주목 받고 있는 기술이다. 하지만 느린 촉매반응 속도와 높은 전력 소모량으로 인해 상용화에 어려움을 겪고 있다.
- 염기 수전해의 단점을 보완하기 위해 많은 연구팀에서 고효율의 전극촉매소재를 개발하는 연구가 진행되고 있다. 이를 위해 촉매의 형상과 조성 등을 제어하여 최적화된 금속-수소 간 결합에너지(ΔG_H)를 갖는 신소재 개발에 노력을 쏟고 있다.
- 염기 수전해의 촉매 성능을 설명하기 위해 ΔG_H 값이 존재하지만, 현재까지의 연구로는 불명확한 촉매 효과와 촉매 계면의 방해요소들로 인해 촉매 기작을 명확히 설명할 수 없었다.
- 이에 따라 촉매 효과를 특정하고 이를 설명하는 모델 촉매를 개발하는 것은 촉매 분야에서 오랫동안 이어져 온 과제로 많은 연구자들이 이를 실현시키기 위해 연구하고 있다.

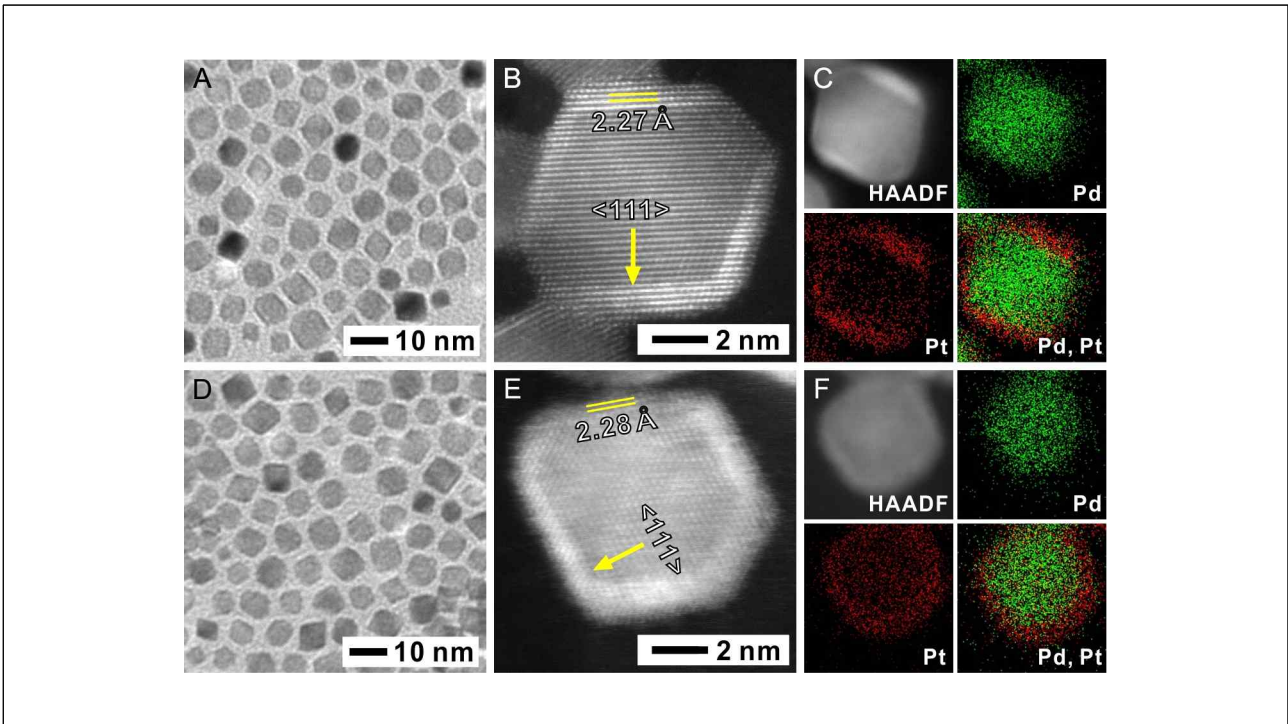
2. 연구내용

- 연구팀은 염기 수전해에서의 촉매 작동원리를 확인하기 위해 팔라듐과 팔라듐 수소화물 나노입자를 각각 내부물질로 합성하고, 그 표면을 백금 1~5 원자층으로 제어한 코어-셸 모델 촉매를 합성하였다.
- 전기화학적 수소 생산 반응성을 측정한 결과, 모델 촉매는 백금 원자층이 두꺼울수록 촉매 성능이 증가하였으며, 팔라듐 수소화물 보다 팔라듐을 내부물질로 사용하였을 때 더 높은 성능을 보였다. 위의 경향성은 DFT 방법으로 계산된 기존의 촉매 성능 예측 모델인 ΔG_H 값과 잘 일치함을 확인했다.
- 그러나 내부물질로 팔라듐을 사용한 백금 촉매와 순수 백금 촉매의 성능 비교는 기존 ΔG_H 결과와 일치하지 않았다. 이는 ΔG_H 모델이 염기 수전해 조건에서 적용하기 어렵다는 것을 의미한다.
- 본 연구에서는 수소 생산 반응에서의 촉매 성능을 ΔG_H 값뿐만 아니라, 촉매 계면에 존재하는 물 분자와의 상호작용 정도(ΔG_{H_2O})를 함께 고려하여 새로운 촉매특성 결정 이론을 정립할 수 있었다.

3. 연구성과/기대효과

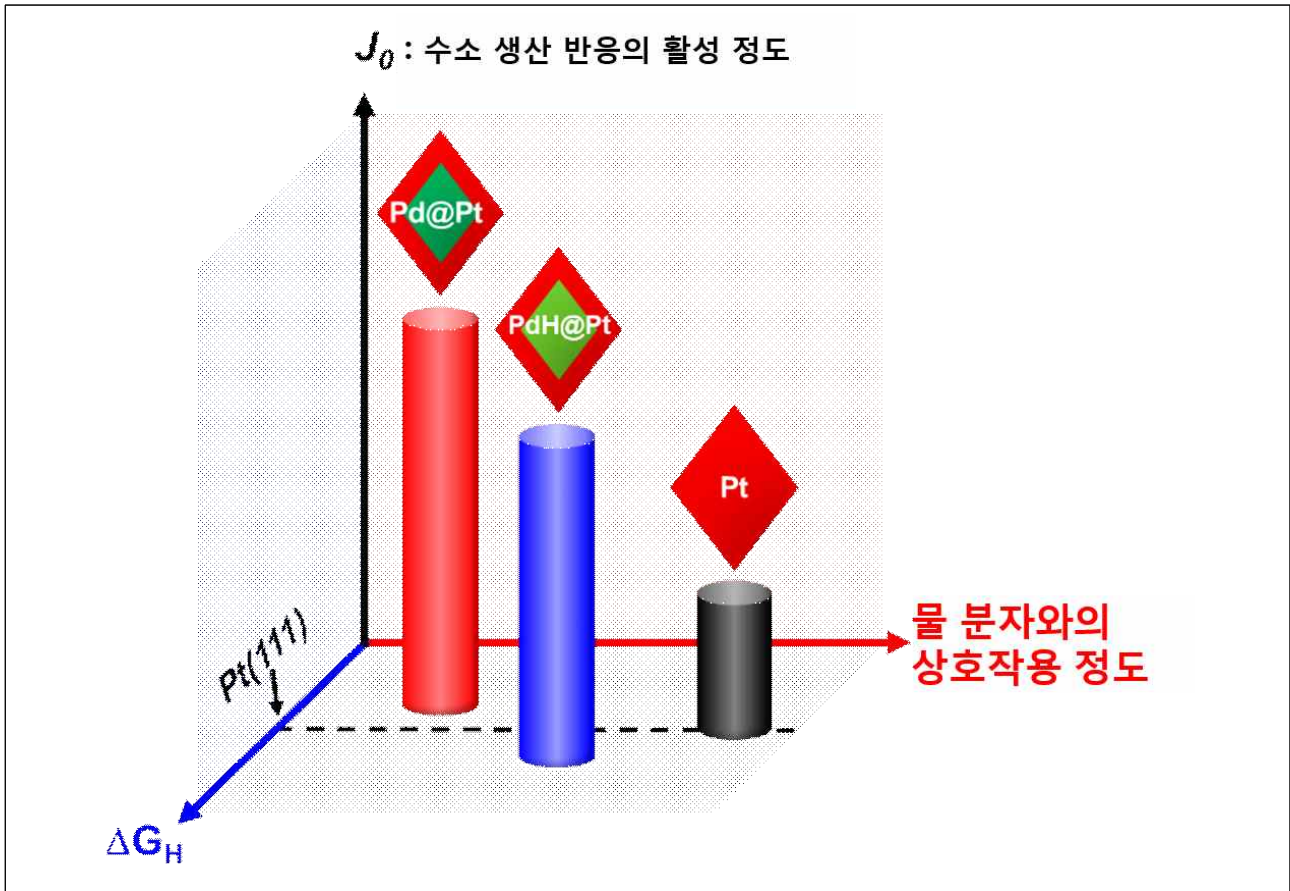
- 이 연구는 팔라듐-백금 코어-셸 모델 촉매를 이용해 촉매 분야에서 지속적으로 관심을 가져온 주제인 염기 수전해에서의 촉매 작동원리를 규명했다는 점에서 큰 의의가 있다. 이러한 연구결과는 수소 생산 반응을 위한 고효성의 전극촉매 소재를 설계하는 새로운 아이디어를 제시할 수 있을 것으로 기대된다.
- 특히 고효성의 촉매 개발을 중시하는 기존 촉매 연구와는 달리 촉매의 작동 원리를 규명하는 핵심 연구이다.
- 이번 연구결과를 필두로 산성 수전해조와 염기 수전해조 모두에서 사용 할 수 있는 촉매, 귀금속을 사용하지 않는 저비용 고효성 촉매 등의 추가적인 연구 패러다임을 제시할 수 있을 것으로 보인다.

2 그림 설명



(그림 1) 합성된 모델 촉매들의 전자현미경 사진

(A) 팔라듐-백금과 (D) 팔라듐 수소화물-백금 코어-셸 모델 촉매의 저배율 전자현미경 이미지. (B, C) 팔라듐-백금과 (E, F) 팔라듐 수소화물-백금 코어-셸 모델 촉매의 고분해능 전자현미경 (HAADF-STEM) 이미지와 원소 분포도.



(그림 2) 팔라듐-백금 코어-셸 모델 촉매의 염기 수전해조에서의 촉매 활성도와 요인에 대한 모식도

모델 촉매의 수소 생산 반응에 대한 활성 평가 결과, 팔라듐 수소화물 보다 팔라듐을 내부물질로 사용하였을 때 더 높은 성능을 보였다. 또한 물 분자와의 상호작용 정도를 고려했을때, 기존의 ΔG_H 값으로 설명되지 않았던 팔라듐-백금 코어-셸 나노입자의 높은 성능 효과를 설명할 수 있게 되었다.