	지스트(광주과학기술원) 보도자료 http://www.gist.ac.kr	
보도시기	배포 즉시 보도 부탁드립니다.	
배포일	2021.02.02.(화)	
보도자료 담당	홍보팀 조동선 팀장	062-715-2061
	홍보팀 이나영 선임행정원	062-715-2062
자료 문의	융합기술학제학부 김도형 박사과정생	062-715-5404

지스트, 고온 고분자막 연료전지의 성능 개선 방법 찾았다

- 고분자 기능기에 따른 전해질막 내의 인산 유출 현상 규명으로 고온 고분자막 연료전지 성능 개선 방향 제시

□ 지스트(광주과학기술원, 총장 김기선) 신소재공학부 이재석 교수와 이주형 교수, 에너지융합대학원의 박찬호 교수 공동연구팀이 고분자 전해질막 내의 기능기*가 인산**의 유출에 영향을 미치는 것을 확인하고 이를 통해 고온 고분자막 연료전지의 성능 개선 방법을 제시하였다.

* 기능기(functional group): 공통된 화학적 특성을 가진 한 무리의 유기화합물에서 각 특성의 원인이 되는 공통된 원자단 결합형식

** 인산(Phosphoric acid): 인(P)과 4개의 산소(O), 3개의 수소(H) 원자로 이루어진 화합물로 산성을 띄며 고온 고분자막 연료전지에서 수소이온을 이동시켜준다.

◦ 연구팀은 전해질막 내의 기능기를 최적화하여 인산의 유출을 최소화할 뿐만 아니라 인산 유출 현상을 계산과학으로 규명하였다. 향후 고효율 차세대 건물용 연료전지 개발에 활용될 것으로 기대된다.

□ 120도 이상의 온도에서 작동되는 고온 고분자막 연료전지는 폐열을 온수와 난방으로 이용할 수 있다는 장점이 있어 차세대 건물형 연료전지 시스템으로 주목받고 있다. 이 연료전지는 전해질막 내의 인산을 통해

수소이온을 이동시키지만 연료전지가 작동되는 과정에서 전해질막에서 전극으로 인산 유출이 일어나 연료전지의 성능이 떨어지는 현상이 발생한다.

□ 연구팀은 인산의 유출 현상 규명을 위해 서로 다른 세 가지 아졸 화합물*이 도입된 고분자 전해질막을 제조하여 비교하였다. 아졸 화합물은 인산과 비교하여 상대적으로 염기성이므로 산염기 상호작용을 통해 전해질 막 내부에 인산을 함유할 수 있게 한다. 또한, 수소와 메틸기**로 각각 치환된 아졸 화합물의 질소치환기와 염기도가 전해질막의 인산 유출에 미치는 영향을 연구하였다.

* **아졸 화합물(Azole Compound)**: 5원자 고리에서 탄소원자가 아닌 다른 원자를 포함하고 적어도 한 개 이상의 질소 원자를 포함한 화합물

** **메틸기(Methyl Group)**: 메탄(CH_4)의 1개의 수소원자가 제거되어 아졸 화합물의 기능기에 결합한 화합물

◦ 인산을 함유한 전해질막을 수분에 노출시켰을 때 인산 유출이 작았던 메틸이미다졸* 전해질막(6.9%의 유출량)을 연료전지에 적용한 결과, 가장 우수한 성능(0.197 W/cm^2)을 확인하였다. 이와 함께 이산 푸리에 변환**을 통해 전해질막 내에서 인산, 아졸 화합물, 그리고 물분자 간의 결합력을 계산하여 실험 결과와 일치함을 확인함으로써 전해질막의 인산 유출 현상을 이론적으로 규명하였다.

* **메틸이미다졸(Methyl Imidazole)**: 5원자 고리에서 탄소원자가 아닌 다른 원자를 포함하고 적어도 한 개 이상의 질소 원자를 포함한 화합물

** **이산 푸리에 변환(Discrete Fourier Transform)**: 이산적인 입력 신호에 대한 푸리에 변환으로, 이를 통해 화학적 작용 및 결합을 이론적으로 계산

◦ 인산 전해질을 통한 수소이온 전도는 인산과 인산 사이를 수소이온이 뛰어넘는 그로투스 경로*로 일어난다. 이때 고분자 전해질막의 아졸 화합물에 메틸기가 존재할 경우 산성 상태의 수소가 줄어들기 때문에 그로투스 경로의 효율과 수소이온 전도도가 떨어지지만, 수분 흡수가 적어서 인산 유출도 적어 수소 연료전지 성능은 더 향상되는 것을 확

인하였다.

* **그로투스(Grotthuss) 경로**: 과잉의 수소이온 또는 수소이온 결함이 이웃 분자에 있는 경우 수소이온이 공유 결합 형성과 절단을 반복하며 수소 결합 네트워크를 통해 확산되는 과정

□ 이재석 교수는 “이번 연구는 소재, 단위전지, 계산과학의 융합 연구를 통해 차세대 건물용 연료전지로 각광받고 있는 고온 고분자막 연료전지의 직접적인 성능 개선 방법을 도출하였다”면서 “향후 가정 내 연료전지 보급이 확대됨에 따라 분산발전과 함께 폐열을 활용한 난방 및 온수 사용으로 친환경 수소 경제 활성화를 촉진시키는데 기여할 것으로 기대한다”고 말했다.

□ 지스트 이재석, 박찬호, 이주형 교수가 주도하고 장요셉 박사, 박사과정 김도형, 강별 학생이 참여한 이번 연구는 지스트 노벨 그럽스 연구센터, 한국에너지기술평가원, 한국연구재단의 지원을 받아 수행되었으며, 연구결과는 소재과학분야의 저명 학술지인 “ACS 응용물질 및 계면(ACS Applied Materials & Interfaces)”에 2021년 1월 3일(일)자 온라인으로 게재되었다. 〈끝〉

논문의 주요 내용

1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : ACS Applied Materials & Interfaces(Impact Factor : 8.758 (2019))
  소재과학 분야의 세계적 권위를 가진 국제학술지로 상위 10.35%저널
- 논문명 : Impact of N-Substituent and pK_a of Azole Rings on Fuel Cell Performance and Phosphoric Acid Loss
- 저자 정보 : 장요셉(제1저자, 지스트 박사), 김도형(제1저자, 지스트 박사과정), 강별(제1저자, 지스트 박사과정), 이주형(교신저자, 지스트 교수), 박찬호(교신저자, 지스트 교수), 이재석(교신저자, 지스트 교수)

그 림 설 명

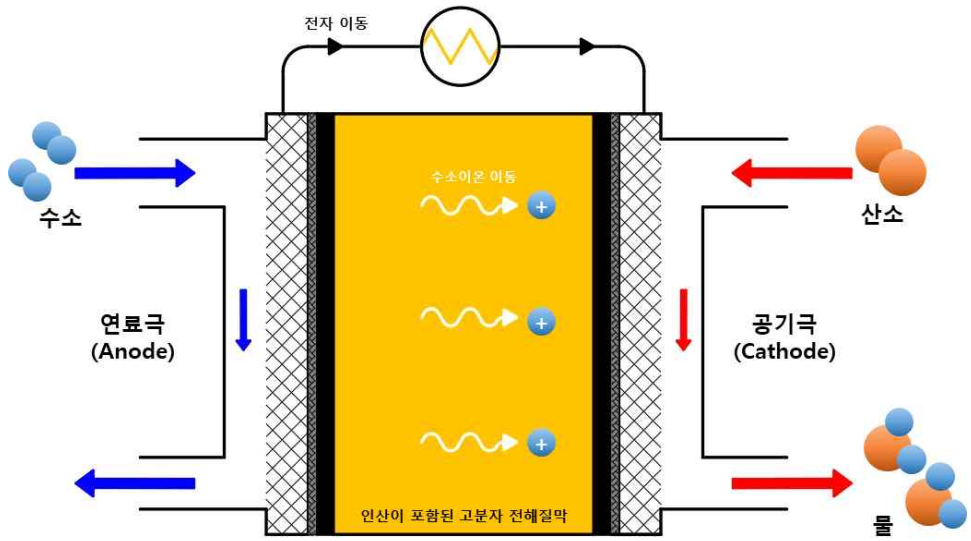

그림 1. 고온 고분자 전해질막 연료전지의 작동 원리

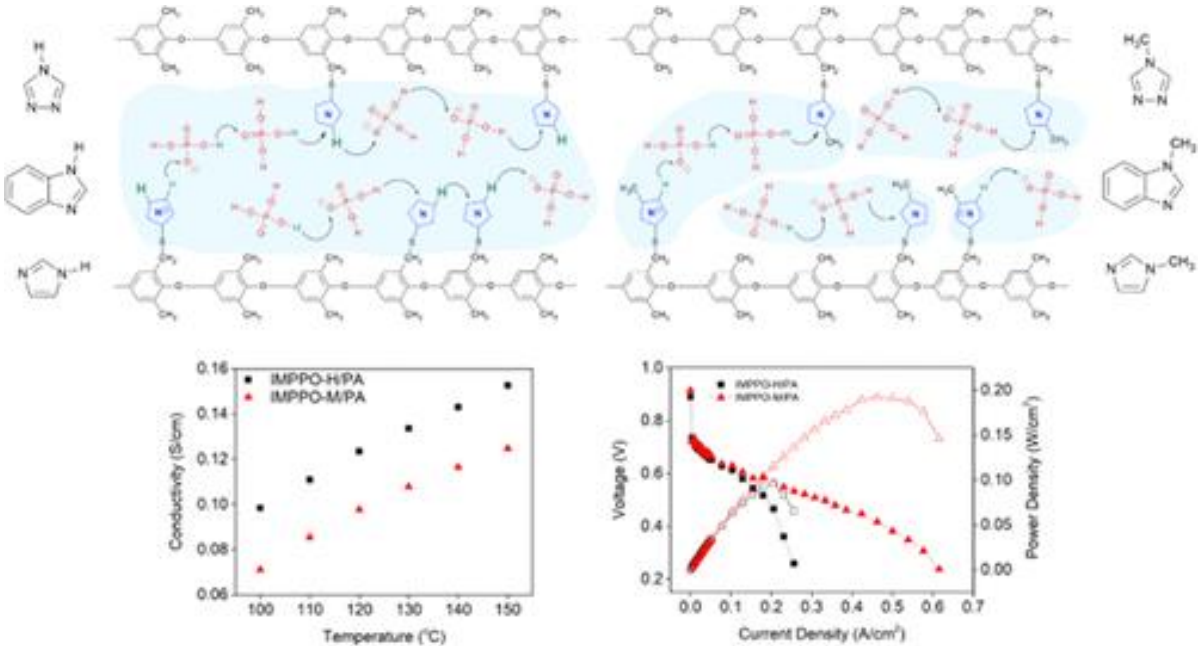

그림 2. 메틸기 유무에 따른 수소이온 전도 과정과 전해질 막의 이온전도도, 단위전지의 성능 비교