

# “수소 이온 활용해 배터리 소재의 물성 조절하는 새로운 원리 제시”

## GIST-경희대-조지아공대,

### 배터리 양극재 성능·수명 향상 신기술 개발

- GIST 신소재공학부 엄광섭·이주형, 경희대 이정태 교수 공동연구팀, 금속 산화물 수소화 반응의 작동 원리 규명하여 금속 산화물의 재료적 특성 조절하는 새로운 기술 개발
- 수소화-몰리브데넘 산화물 양극 소재로 기존 리튬 이온 이차전지용 상용 양극 대비 고용량(1.4~2배 ↑)·고속 충전(약 20분)·수명 향상(1천회 충·방전 이후에도 초기 용량 76% 유지) 구현
- 국제학술지 《Nature Communications》 게재



▲ (왼쪽부터) 엄광섭 교수(GIST), 이주형 교수(GIST), 이정태 교수(경희대), 권준화 박사, 소순성 박사

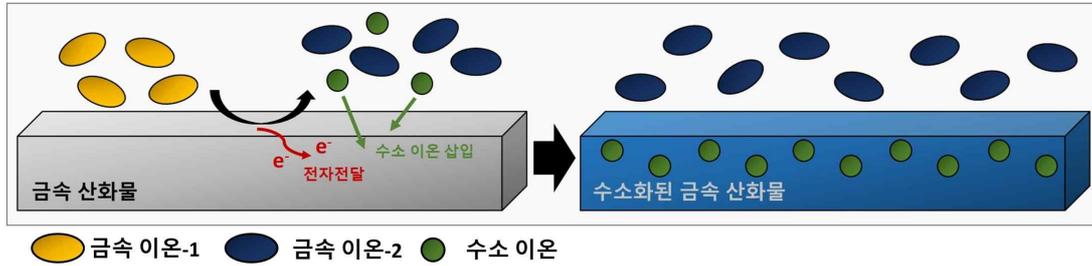
최근 에너지와 같은 다양한 분야에서 수소 이온을 활용한 소재의 물성 변형을 통해 배터리 등 에너지 저장 성능을 높이는 연구가 주목받고 있다.

그동안 수소화 반응의 작동 원리에 대한 기초연구의 부재로 수소화 정도를 정교하게 조절하는 데 기술적 한계가 있었으나 국내 연구진이 금속 산화물의 재료적 특성을 조절할 수 있는 기술을 개발하여 에너지 저장 및 전환 시스템 등 다양한 재료과학 분야에 활용될 것으로 기대된다.

광주과학기술원(GIST, 총장 임기철)은 신소재공학부 엄광섭 교수와 이주형 교수, 경희대학교 이정태 교수 공동연구팀이 수소 이온을 활용하여 에너지 저장에 적합한 특성으로 소재의 물리화학적 특성을 변형할 수 있는 금속 산화물 수소화\* 기술을 개발했다고 밝혔다.

\* 금속 산화물 수소화: 금속 산화물 내부에 수소 이온과 전자가 삽입(도핑)되는 반응을 의미한다. 표준환원전위가 상대적으로 작은 금속 혹은 금속이온으로부터 전자를 공급받고 산성 전해질 용액으로부터 수소이온을 공급받아 금속 산화물의 환원 반응이 일어난다. (예.  $MO + xH^+ + xe^- \rightarrow H_xMO$ , MO: 금속산화물)

금속 이온을 활용한 금속 산화물 수소화 기술



▲ **금속 이온을 활용한 산화물 수소화 합성 기술 모식도:** 금속 산화물과 금속이온-1 계면에서 갈바닉 부식 반응이 발생함. 금속 산화물이 환원되면서(전자를 받으면서) 전해질에 존재하는 수소 이온이 금속 산화물 내부로 삽입됨. 동시에 금속이온-1은 산화되어(전자를 주어) 금속이온-2 형태로 전해질 내에 존재함.

연구팀이 개발한 합성법은 금속 산화물과 산성 용액에 녹아 있는 금속이온의 표준 환원전위\*의 차이를 통해 **금속 산화물의 결정성 내부로 도핑되는 수소의 양을 매우 정교하게 조절할 수 있을 뿐만 아니라 금속 산화물의 결정상을 조절 및 변형이 가능한 기술이다.**

연구팀은 **금속 산화물 수소화 반응의 작동 원리가 부식 반응의 한 종류인 전기화학적 갈바닉 반응\*에 기초한다는 것을 실험적으로 규명하였다.**

\* **표준환원전위:** 표준 수소 전극과 환원이 일어나는 반쪽 전지를 결합시켜 만든 전지에서 측정한 전위를 말하며, 표준환원전위는 표준상태(25도, 1기압, 1몰)에서 환원 반응이 일어날 때 측정된 전위의 값이다. 이를 통해서 표준 상태에서 특정 전기 화학 반응의 산화-환원 정도를 알 수 있다.

\* **갈바닉 반응:** 서로 다른 표준환원전위(표준상태-25도, 1기압, 1몰에서 환원 반응이 일어날 때 측정된 전위의 값)를 가진 두 금속이 전해질 안에서 접촉하고 있을 때, 표준환원전위의 전위차에 의해 전자와 이온이 이동하는 현상이다. 표준환원전위가 큰 금속은 환원되고, 표준환원전위가 작은 금속은 산화된다.

연구팀은 재료 기초분석을 통해 금속 산화물 내부에 수소 이온이 있으면 **금속 산화물의 구조적·전기화학적 특성이 조절된다는 점에 주목하였다.** 수소화-몰리브데넘\* 산화물을 실제 리튬이온 배터리의 양극재로 활용하여 **높은 에너지 용량을 저장할 수 있는 배터리 양극재 소재 설계에** 나섰다.

현재 상용 단계에 있는 리튬 이온 배터리 양극 소재는 코발트, 니켈, 철, 망간 등을 사용하고 있으나 이들의 **에너지 용량은 약 140~200 mA/g로 이미 한계에 도달한 상황이다.**

이에 따라 고에너지 용량을 저장할 수 있는 **몰리브데넘 산화물(이론 용량: 279 mA/g)**이 많은 주목을 받고 있지만, 배터리 충/방전 중 발생하는 결정 구조의 붕괴 현상에 따른 내구성 문제와 낮은 이온전도성으로 인한 느린 충/방전 속도로 인해 상용화에 어려움이 있다.

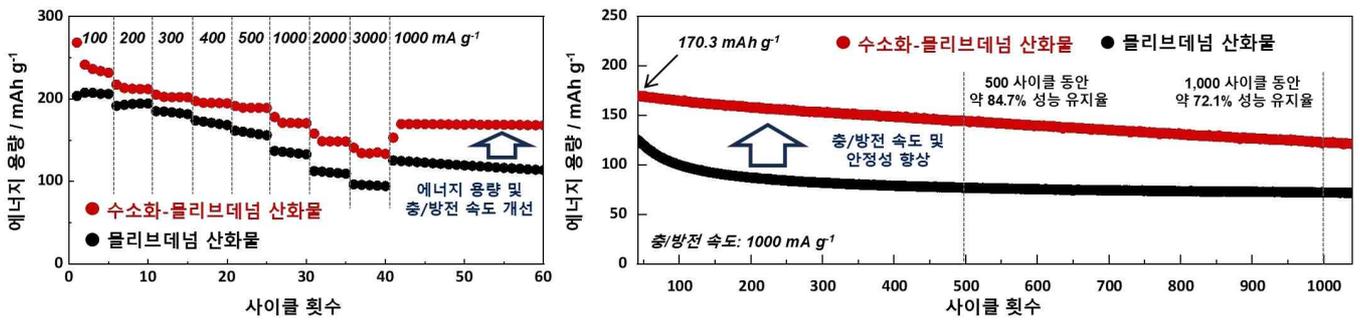
\* **몰리브데넘:** 원자번호 42번으로 주기율표 상 6족에 속하는 전이금속이다. 야금학, 2차원 반도체, 태양전지, 배터리, 화학촉매 등으로 사용된다.

연구팀이 개발한 수소화-몰리브데넘 산화물 양극 소재는 **상용 소재 대비 약 1.4~2 배에 해당하는 280 mA/g의 높은 에너지를 저장할 수 있고, 약 20분 이내에 170 mA/g의 에너지를 빠르게 저장 및 사용할 수 있다.**

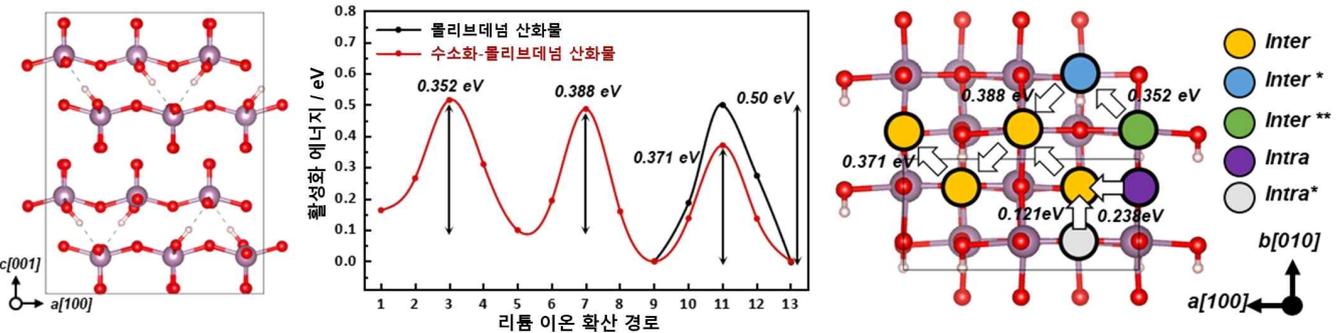
또한, 수소화-몰리브데넘 산화물 양극재는 기존 몰리브데넘 산화물이 가지고 있는 고질적 문제인 구조 붕괴 현상이 억제되어 **1,000회 충/방전 이후에도 초기 용량의 약 76%를 유지할 만큼 수명이 향상되었다.**

연구팀은 전기화학 및 분광학 기초실험을 통해 도핑된 수소 이온이 몰리브데넘 산화물의 충/방전 시 발생하는 결정 구조의 붕괴 반응을 제한하여 **배터리 사이클 안정성이 크게 개선되었음을** 확인하였다.

산화물 수소화 합성법을 통해 제작한 수소화-몰리브데넘 산화물의 전기화학적 특성 분석



범밀도 함수 이론 계산을 통한 수소화-몰리브데넘 산화물의 구조적·전기화학적 특성 분석



▲ (위) 산화물 수소화 합성법을 통해 제작한 수소화-몰리브데넘 산화물의 전기화학적 특성 분석: 몰리브데넘 산화물에 수소 이온을 삽입하는 경우 에너지 저장용량 및 충/방전 속도가 개선되고, 구조적 안정성 향상에 의해 배터리 수명이 비약적으로 개선됨 (아래) 범밀도 함수 이론 계산을 통한 수소화-몰리브데넘 산화물의 구조적·전기화학적 특성 분석: 몰리브데넘 산화물 내부에 수소 이온이 존재하는 경우 산화물 내부에서 리튬 이온의 확산 에너지 장벽이 낮아짐을 확인함. 이를 통해 수소화-몰리브데넘 산화물의 충/방전 속도 개선의 원인을 규명함.

또한, 계산화학 및 전기화학 분석을 통해 수소 이온이 몰리브데넘 산화물의 대칭적 결정 구조를 뒤흔어 결정 내 리튬 이온이 원활하게 확산할 수 있는 경로가 발생함으로써 빠른 충/방전이 가능해진다는 사실도 규명하였다.

연구팀은 이러한 결과를 바탕으로 **외부의 에너지 공급 없이 금속 산화물 내에 수소 이온을 삽입할 수 있는 방법론을 새롭게 고안**하였고, 수소 이온을 활용하여 재료의 물성 특성을 조절할 수 있다는 사실을 확인함으로써 **이번 연구 성과의 산업적 활용 가능성 및 실효성 또한 검증**하였다.

엄광섭 교수는 “이번 연구는 **금속 산화물 수소화 반응의 작동 원리를 규명**했다는 점에 학술적 의의가 있다”고 설명하며, “특히, **수소 이온을 활용하여 재료가 가진 고유한 물성을 매우 용이하게 조절**함으로써 향후 에너지 소재 개발에 새로운 장을 마련할 것으로 기대된다”고 덧붙였다.

GIST 신소재공학부 엄광섭·이주형 교수, 경희대학교 이정태 교수가 공동 지도 하에 권준화 박사와 소순성 박사가 수행하고, 미국 조지아공대(Georgia Institute of Technology) 톰 풀러(Tom Fuller) 교수가 감수한 이번 연구는 한국연구재단 중견연구자 지원사업의 지원을 받아 수행되었으며, 연구 결과는 국제학술지 《네이처 커뮤니케이션즈(Nature communications)》에 2024년 12월 5일 온라인 게재되었다.

## 논문의 주요 정보

### 1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Nature communications (IF=14.7)
- 논문명 : Galvanic hydrogenation reaction in metal oxide  
※ DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-024-54999-0>
- 저자 정보 : GIST·KIST 권준화 박사(공동제1저자), GIST 소순성 박사(공동제1저자), KHU 이정태 교수(공동교신저자), GIST 이주형 교수(공동교신저자), GIST 엄광섭 교수(공동교신저자)