

GIST-켄텍, 백금 뛰어넘는 차세대 연료전지 촉매 개발

'혼합상 물질' 시너지 효과로 성능·내구성 동시에 잡아

- GIST 임현섭 교수·켄텍 홍종욱 교수 공동연구팀, 팔라듐 셀레나이드(Pd-Se) 기반 혼합상 나노구조체 활용, 정밀한 결정상 제어 및 상호작용 규명 통해 기존 백금 촉매 능가하는 전기화학 성능·내구성 입증
- "미래 친환경 에너지 기술의 핵심 소재 활용 기대" 국제학술지 《Chemical Engineering Journal》 게재



▲ (왼쪽부터) GIST 화학과 임현섭 교수, GIST 화학과 홍석원 교수, 한국에너지공과대학교(KENTECH) 홍종욱 교수, GIST 화학과 김현주 박사과정생

광주과학기술원(GIST, 총장 임기철)은 화학과 임현섭 교수와 한국에너지공과대학교(KENTECH) 홍종욱 교수 공동연구팀이 팔라듐 셀레나이드(Pd-Se)* 기반의 혼합상 나노구조체를 이용해, 산소환원반응(ORR)*에서 기존 상용 백금 촉매(Pt/C)보다 우수한 전기화학 성능과 내구성을 가진 차세대 연료전지용 촉매를 개발했다고 밝혔다.

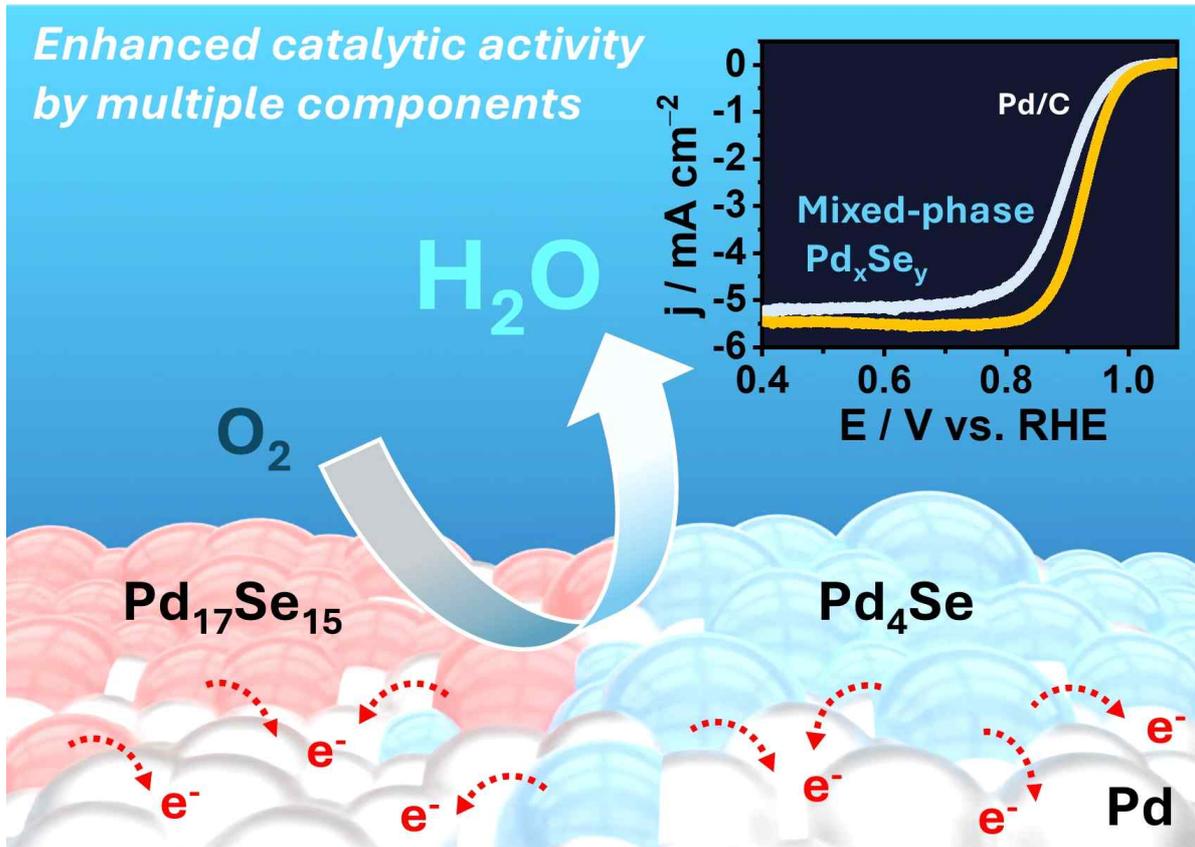
이번 연구는 서로 다른 결정상들이 함께 존재할 때, 즉 혼합상 물질에서 발생하는 시너지 효과에 주목한 것으로, 기존 백금 기반 전기촉매를 대체할 수 있는 고성능·고내구성 촉매 설계의 새로운 방향을 제시했다는 점에서 의미가 크다. 향후 연료전지와 같은 고급 에너지 변환 기술에 적용될 수 있는 혼합상 물질의 효과적인 설계 전략에 중요한 기여를 할 것으로 기대된다.

* 팔라듐 셀레나이드(Pd-Se): 팔라듐(Pd)과 셀레늄(Se)이 결합한 화합물로, 다양한 결정 구조를 통해 전기화학 반응에 적합한 특성을 가진다. 특히 연료전지의 산소환원반응(ORR)에서 높은 촉매 활성을 보여 백금(Pt)을 대체할 차세대 촉매로 주목받고 있으며, 여러 결정상이 함께 존재하는 혼합상 구조는 시너지 효과를 통해 성능과 내구성을 동시에 향상시킨다.

* 산소 환원 반응(Oxygen reduction reaction, ORR): 연료전지, 금속-공기 배터리 등에서 산소 분자를 물로 환원시켜 전기를 발생시키는 필수 반응이다. 하지만 반응 속도가 느리고 많은 에너지가 필요해, 고성능 촉매 개발이 필수적이다.

그동안 Pd-Se 촉매는 대부분 단일 결정상 중심으로 연구되었기 때문에, 서로 다른 Pd-Se 결정상 간의 상호작용이 촉매 성능 향상에 기여할 수 있다는 사실은 거의 알려지지 않았다.

이에 연구팀은 혼합상 구조가 전자 이동 경로를 개선하고, 반응 활성 부위를 효과적으로 형성하는 데 유리하게 작용한다는 점을 새롭게 밝혀냈다.



▲ 팔라듐 셀레나이드(Pd-Se) 다상 구조 촉매 개발. Pd₁₇Se₁₅, Pd₄Se 등의 결정상이 혼재된 혼합상 촉매의 결정상 간 시너지 효과로 상용 Pt/C 대비 향상된 산소 환원 반응 성능 및 내구성 확보가 가능하다.

연구의 핵심은 복잡한 공정 없이 단일 유기금속 전구체를 설계해, 이를 정밀하게 열처리함으로써 다양한 Pd-Se 결정상(PdSe₂, Pd₁₇Se₁₅, Pd₄Se 등)이 공존하는 '혼합상 나노구조체*'를 합성한 데 있다.

서로 다른 결정상 간 계면에서의 전자 구조 상호작용에 의해 나타나는 시너지 효과를 통해 산소환원반응의 반응 속도는 빨라지고, 에너지 손실은 줄어드는 효과가 나타났으며, 결과적으로 여러 결정상이 공존하는 혼합상 물질에서 단일상 기반의 기존 Pd/C나 Pt/C 촉매보다 뛰어난 반응 효율과 내구성을 확인했다.

* 혼합상 나노구조체: 서로 다른 결정 구조가 하나의 나노소재 안에 함께 존재해, 각 상이 전기화학 반응의 다른 단계를 맡으며 성능을 높이는 구조. 계면에서의 전자 이동과 반응 조절 효과가 커서 촉매 성능 향상에 매우 효과적이다.

특히 주목할 점은, 서로 다른 Pd-Se 결정상이 산소환원반응의 각기 다른 반응 단계에서 각각의 강점을 발휘함으로써 전체 반응 효율을 높이고 에너지 손실을 최소화할 수 있다는 사실을 이론적 계산과 실험을 통해 입증했다는 것이다.

1000°C 에서 합성된 Pd-Se 촉매는 산소환원반응의 반응 전압(half-wave potential)이 0.931V에 달해, 상용화된 백금 기반 촉매(Pt/C)보다 높은 수치를 기록했다.

이는 동일 조건에서 산소가 더 적은 에너지로 환원될 수 있다는 의미이며, Pd-Se 촉매의 우수한 전기화학적 활성을 보여주는 대표적인 지표다.

또한, 내구성 테스트 2만 회 후에도 반응 전압의 변화가 단 7mV에 불과해 장시간 사용 환경에서도 안정성이 뛰어난 것을 확인했다.

연구팀은 밀도범함수 이론(Density Functional Theory, DFT)을 기반으로 각 Pd-Se 결정상의 전자 구조를 계산해, 이들이 산소환원반응 과정의 다양한 중간 단계를 각각 최적화하여 촉매 성능을 향상시킨다는 점을 밝혀냈다.

이를 통해 구체적으로, 세 가지 Pd-Se 물질은 산소환원반응(ORR) 과정에서 각기 다른 역할을 하며 상호 보완적 관계임을 확인했다. ▲Pd는 산소 분자의 초기 흡착을 돕고, ▲Pd₁₇Se₁₅는 반응 초기의 중간체를 안정화하여 반응이 끊기지 않도록 도우며 ▲Pd₄Se는 후속 단계의 중간체를 안정적으로 흡착하여 전체 반응 속도를 높이는 역할을 수행하는 것으로 나타났다.

임현섭 교수는 “이번 연구는 서로 다른 Pd-Se 결정상이 조화를 이루며 전기화학 반응의 각 단계를 최적화할 수 있다는 사실을 실험과 이론 양면에서 입증한 사례”라며, “이 기술은 고성능 연료전지, 메탈에어 배터리, 수전해 시스템 등 차세대 친환경 에너지 분야의 핵심 기술로 활용될 수 있는 가능성이 매우 크다”고 밝혔다.

GIST 화학과 임현섭 교수와 홍석원 교수, 한국에너지공과대학교(KENTECH) 홍종욱 교수가 지도하고 GIST 화학과 김현주 박사과정생이 수행한 이번 연구는 한국연구재단(NRF)과 한국전력공사(KEPCO)의 연구개발 프로그램의 지원을 받았다. 연구 결과는 국제학술지 《케미컬 엔지니어링 저널(Chemical Engineering Journal)》에 2025년 4월 1일 온라인 게재됐다.

논문의 주요 정보

1. 논문명, 저자정보

- 저널명: Chemical Engineering Journal (IF: 13.4 / 2025년 기준)
- 논문명: Exploring the efficient catalytic activity of mixed-phase palladium selenides in oxygen reduction reaction
- 저자 정보: 김현주 (제1저자, GIST, IBS양자변환연구단), 유수아 (공동저자, GIST), 김승현 (공동저자, GIST), Hafidatul Wahidah (공동저자, 울산대학교), 안종국 (공동저자, IBS양자변환연구단), 안채현(공동저자, GIST), 김소영(공동저자, RIST), 홍종욱(교신저자, 한국에너지공과대학교), 홍석원(교신저자, GIST), 임현섭 (교신저자, GIST, IBS 양자변환연구단)