

★ 2018년 11월 22일(목) 조간(온라인 11. 21.(수) 12:00)부터 보도해주시기 바랍니다.

보도자료



한국연구재단
National Research Foundation of Korea

<홍보실> 실장 김한기, 담당 장효정 ☎ 042-869-6116

<자료문의> 광주과학기술원(GIST) 신소재공학부 최창혁 교수(062-715-2317)

연탄가스로 백금 촉매 활성을 끌어올린다 - 균일촉매의 화학현상을 불균일촉매에서 구현 성공 -

- 연탄가스인 일산화탄소 기체로 고체 백금 촉매의 활성을 향상시킬 수 있게 되었다. GIST(지스트, 총장 문승현) 최창혁 교수, 김형준 교수(한국과학기술원) 공동연구팀이 '균일촉매'뿐 아니라 '불균일촉매'에서도 일산화탄소로 백금 촉매의 활성을 향상시키는 기술을 개발했다고 한국연구재단(이사장 노정혜)이 밝혔다.
- 백금 촉매는 자동차 배기가스의 유해 물질 제거, 수소연료전지의 수소 생산 등 다양한 화학반응에서 활용된다. 백금 촉매의 공정단가를 경제적으로 낮추기 위해서는 백금 촉매 성능의 향상이 필수적이다.
 - 독성 물질인 일산화탄소는 백금 표면에 강하게 흡착해 촉매로서의 활성을 저해한다고 알려져 있다. 그러나 흥미롭게도 일산화탄소와 백금 촉매의 상이 같은 '균일촉매'의 경우에는 오히려 일산화탄소가 백금 촉매의 촉진제로서 작용하기도 한다.
 - 이같은 균일촉매에서의 화학현상을, 일산화탄소와 백금 촉매의 상이 서로 다른 '불균일촉매'에도 접목하여 백금 촉매의 성능을 끌어올리려는 노력이 계속되었지만 쉽지 않았다.

- 연구팀은 불균일 백금 촉매가 일산화탄소의 존재 하에서 활성화되는 현상을 규명해 학계에 보고했다. 전기화학적 수소 생산 반응에서 일산화탄소가 존재하면 백금 촉매의 활성이 2배 가까이 증진되었다.
 - 이 현상은 단일 원자 백금이 황 원자로 둘러싸인 형태의 촉매일 때 관측된다. 분광분석법으로 관측한 결과, 일산화탄소에 의해 단일 원자 백금과 황 원자의 결합이 일부 끊어지고 일산화탄소와의 결합이 새로 생겼다. 균일촉매와 같이 불균일촉매에서 중심 금속과 리간드와의 상호작용이 발생한 것이다.
- 최창혁 교수는 “균일계 촉매에서 보이는 화학적 현상을 불균일계 촉매에서도 구현할 수 있는 시스템을 발견했다”라고 연구의 의의를 설명하며, “나아가 오랜 꿈으로 여겨졌던 균일계·불균일계 촉매의 틈을 연결하고, 각 장점만을 구현한 새로운 형태의 촉매 개발을 연구할 계획이다”라고 밝혔다.
- 이 연구 성과는 과학기술정보통신부·한국연구재단 미래소재디스커버리사업, 기초연구사업(중견연구), 한국과학기술연구원 기관고유사업의 지원으로 수행되었으며, 화학 분야의 최고 권위 학술지인 미국화학회지(Journal of the American Chemical Society)에 11월 1일자 논문으로 게재되었다.

1 주요내용 설명

□ 논문명, 저자정보

논문명	Carbon Monoxide as a Promoter of Atomically Dispersed Platinum Catalyst in Electrochemical Hydrogen Evolution Reaction
저자	최창혁 교수(교신저자, GIST), 김형준 교수(교신저자, KAIST) 외 10 명

□ 연구의 주요내용

1. 연구의 필요성

- 산업 촉매는 넓은 범위에서 균일계·불균일계 촉매로 나눌 수 있다. 촉매의 상이 반응물과 같으면 균일계 촉매, 이와 반대로 다를 경우 불균일계 촉매로 분류하는데 각각의 촉매들이 지니는 장단점은 상호보완적이라는 특징이 있다.
- 균일계 촉매의 일반적인 형태는 단일 원자 금속이 중심에 존재하고 주위에 다른 원자들 (리간드)이 결합하고 있는 형태이다. 중심 금속으로는 백금, 팔라듐, 이리듐, 철, 코발트 등의 금속들이 사용되며 리간드로는 다양한 원자 또는 원자단이 이용될 수 있는데 이들의 조합을 달리하면 촉매의 활성을 조절 할 수 있다는 장점이 있다. 그렇지만 반응물과 촉매의 상이 같기 때문에 촉매 재활용을 위한 회수공정에 많은 비용과 시간이 필요하다.
- 이와 다르게 불균일계 촉매는 고체상의 담지체에 금속을 담지한 형태이며 반응물과 상이 다르기 때문에 촉매의 회수가 용이하다. 그렇지만 대개의 불균일계 촉매에서는 금속이 수 나노미터에서부터 마이크로미터 크기의 입자로 존재하기 때문에 균일계 촉매에서처럼 중심 금속과 리간드를 달리하여 촉매의 활성을 조절하는 효과는 상대적으로 미미하다.
- 이에 따라 균일계·불균일계 촉매의 장점들을 취하여 진보된 촉매 시스템을 구현하는 것은 촉매 분야에서 오랫동안 이어져 온 과제로 많은 연구자들이 이를 실현시키기 위해 연구하고 있다.

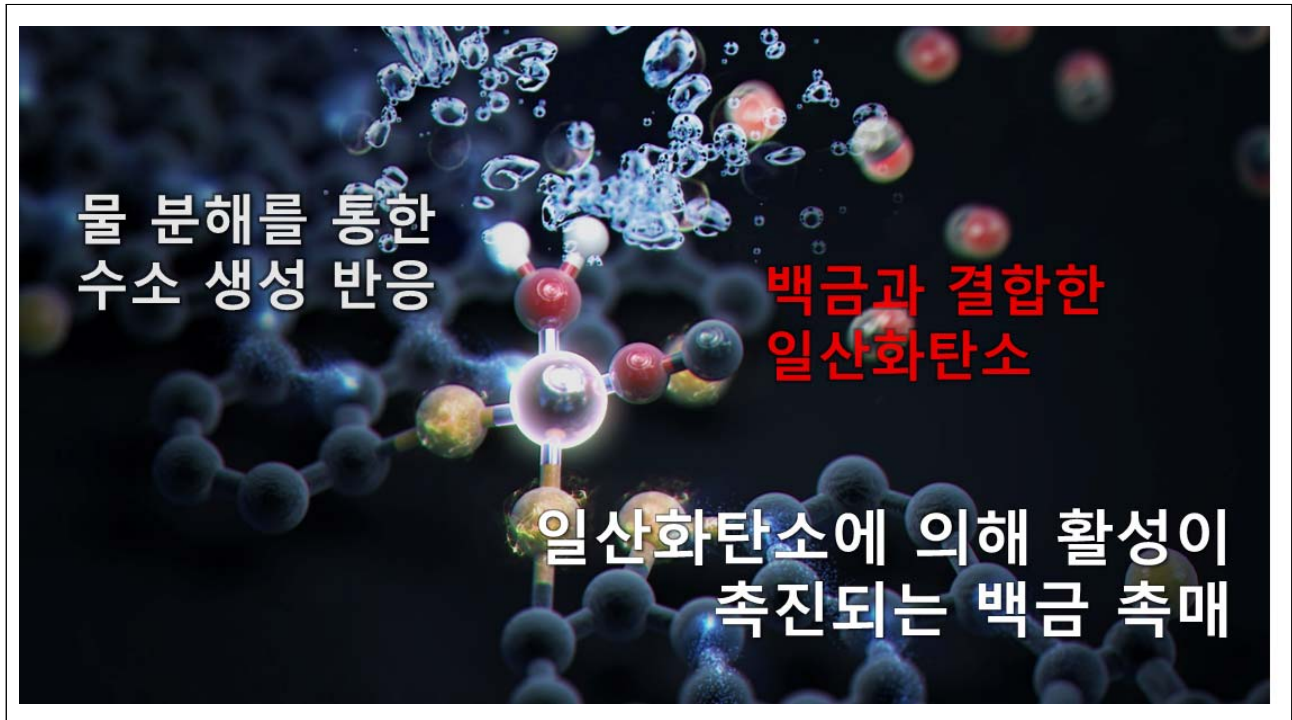
2. 연구내용

- 연구팀은 불균일계 촉매에서 리간드 교체에 의한 활성의 촉진 효과를 확인하기 위해 단일 원자 백금이 담지체의 황과 배워진 촉매를 준비하였고, 대조군으로 백금 입자가 존재하는 일반적인 백금 촉매를 준비하였다. 그리고 전기화학적 수소 생성 반응을 모델 반응으로 리간드에 따른 촉매 성능의 변화를 관찰하였다.
- 단일 원자 백금 촉매는 강한 독성 가스인 일산화탄소가 존재할 때, 촉매의 성능인 전류밀도가 -2.2 mA/cm^2 에서 -3.7 mA/cm^2 으로 증가하였다. 이는 일반적인 백금 촉매와는 완전하게 반대되는 현상으로, 일반적인 백금 촉매는 일산화탄소에 피독되어 촉매 활성이 급격히 감소되었다.
- 분광학적 분석으로 일산화탄소에 의해 일어나는 변화를 관측해 보았을 때, 초기에 단일 원자 백금과 배워하고 있던 황과의 결합 일부가 끊어지고 일산화탄소와 새로운 결합을 형성하였다. 또한 일산화탄소에 의해 개질된 단일 원자 백금은 전기적 특성이 개질되기 전에 비하여 더 산화된 상태로 존재하였다. 이는 균일계 촉매의 특성과 연관될 수 있었다.
- 계산화학 기법을 통하여 일산화탄소에 의해 개질된 단일 원자 백금은 전기화학적 수소 생성 반응의 중간 과정인 물 분자의 해리에 대한 활성화 에너지*를 감소시켜 촉매 반응이 촉진되는 것을 알 수 있었다.* 활성화 에너지(Activation energy) : 반응을 일으키기 위하여 필요한 최소한의 에너지

3. 연구성과/기대효과

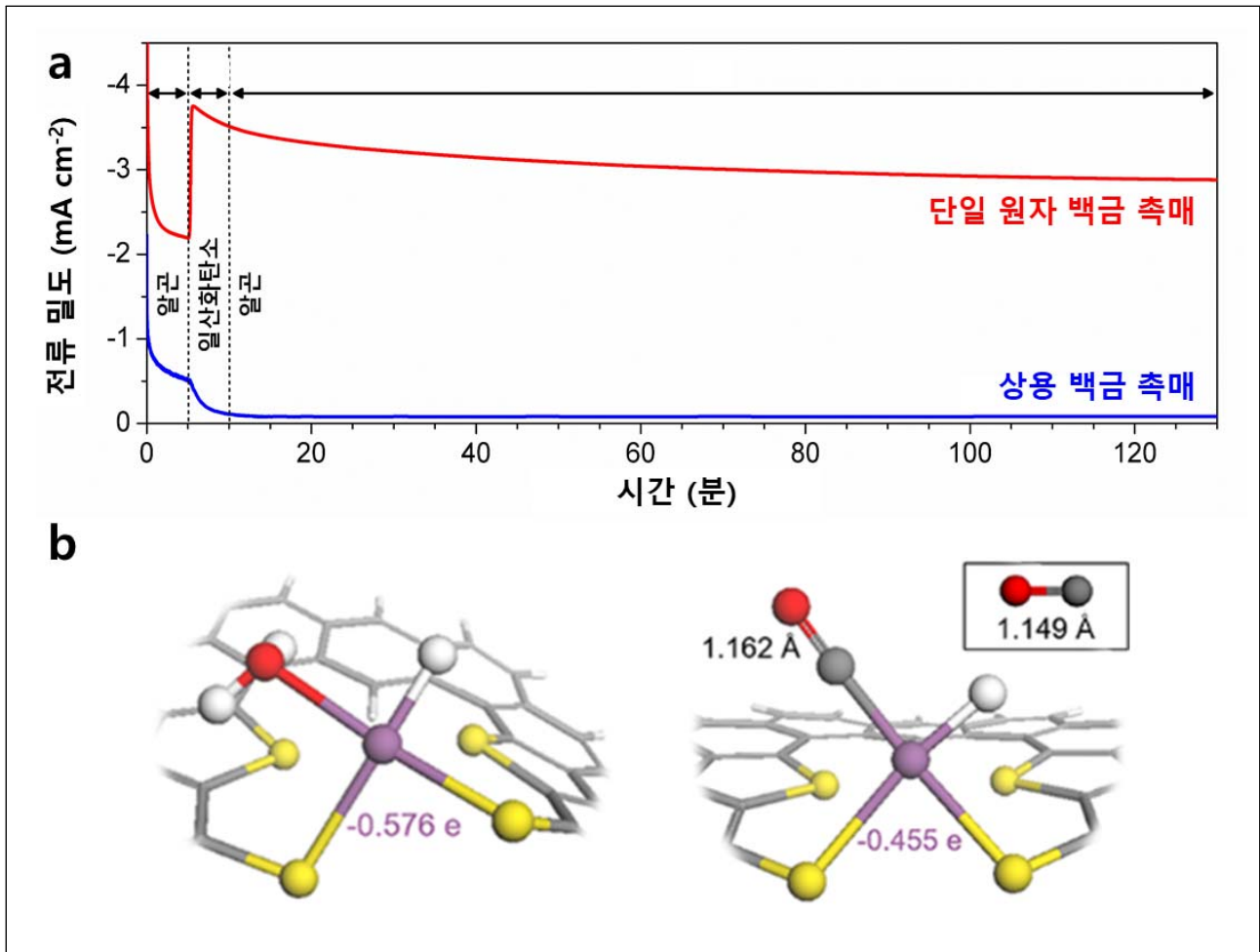
- 이 연구는 촉매 분야에서 오랫동안 관심을 가져온 주제인 균일계 촉매에서 나타나는 화학적 거동을 불균일계 촉매에서도 구현 가능한 단점을 발견했다는 점에서 큰 의의가 있다. 이러한 연구 결과는 균일계·불균일계 촉매 시스템 사이의 연결고리를 제시할 수 있을 것으로 기대된다.
- 특히 일산화탄소는 백금 촉매를 피독시킨다는 통념과 다르게 단일 원자 백금에서는 촉진 효과를 유발할 수 있다는 점에서 학계에 제시할 가능성과 영감은 지대할 것으로 예상된다.
- 이번 연구 결과를 필두로 하여 리간드 교체 효과를 나타낼 수 있는 금속 촉매의 설계, 리간드의 종류에 따라 나타나는 촉진 혹은 저해 효과의 기작 등의 추가적인 연구 패러다임을 제시할 수 있을 것으로 보인다.

2 그림 설명



(그림1) 일산화탄소에 의해 활성이 촉진되는 백금 촉매 시스템 모식도

대부분의 백금 촉매는 일산화탄소가 존재할 경우 심각한 활성의 감소를 나타낸다. 그렇지만 황에 배워진 단일 원자 백금 촉매는 일산화탄소가 있을 때 기존의 황과의 결합이 일부 끊어지고 일산화탄소와 새로운 결합을 형성하고, 개질된 단일 원자 백금 촉매는 전기화학적 수소 생성 반응에서 기존의 단일 원자 백금 촉매보다 더 높은 활성을 보인다.



(그림2) (a) 단일 원자 백금 촉매와 상용 백금 촉매의 전기화학적 수소 생성 반응성 그래프 (b) 단일 원자 백금 촉매와 일산화탄소로 개질된 단일 원자 백금 촉매의 구조

상용 백금 촉매는 반응 중에 일산화탄소(CO)가 유입되면 활성이 거의 0으로 감소하지만, 단일 원자 백금 촉매는 일산화탄소가 있을 때 오히려 활성이 2배 가량 증가하였다. 그리고 일산화탄소가 없는 상황에서도 증진된 활성이 유지된다. 계산화학 분석 결과, 일산화탄소로 개질되기 전의 백금(b, 좌) 보다 개질된 후의 백금 (b, 우) 이 수소 생성 반응에 더 유리한 화학적 상태를 지니는 것을 알 수 있었다.