

인공지능으로 그린수소 생산 위한 수전해 '철-니켈' 촉매 최적 비율 제시

- 비귀금속 촉매(철:니켈)의 최적 비율 8.7:91.3 도출, 그린수소 생산효율 향상 기대
- 이재영 교수팀(지구.환경공학부), Journal of Materials Chemistry A 논문 게재



▲ (왼쪽부터) 이재영 교수, 박지현 박사, 강신우 연구원

국내 연구진이 '딥러닝 알고리즘(Deep Learning Algorithm)'을 통해 그린수소 생산에 필요한 수전해 촉매의 비귀금속(철-니켈) 최적 조합 비율을 계산하는 데 성공했다.

친환경 그린수소의 생산 효율을 높여 수소연료전지 엔진이 탑재된 트럭, 트레일러, 기차 등 대량 수송기관의 보급에 도움을 줄 수 있을 것으로 기대된다.

온실가스 배출 없이 물을 전기 분해해 수소(그린수소)를 생산하기 위한 방법으로 주목받고 있는 수전해는 이론 전위(1.23V)*보다 높은 전압을 인가해주어야 수소가 발생한다.

이론 전위보다 높은 전압(과전압)은 결국 많은 에너지를 소모하게 되므로, 그린수소를 생산하기 위해서는 과전압을 낮추는 것이 핵심 기술이다.

* 이론 전위: 물이 전기 분해되기 위한 이론상 전위값

이때, 산소극(+극)은 수소극(-극)보다 5~10배 정도 높은 과전압을 가지고 있기 때문에 결국 이 산소극 촉매의 과전압을 낮추는 것이 효율적인 그린수소 생산의 핵심 기술이라고 할 수 있다.

이리듬계 귀금속 촉매는 산소극의 과전압을 낮추는 데 효과적이지만 가격이 매우 비싸 실용화에 걸림돌이 되고 있다.

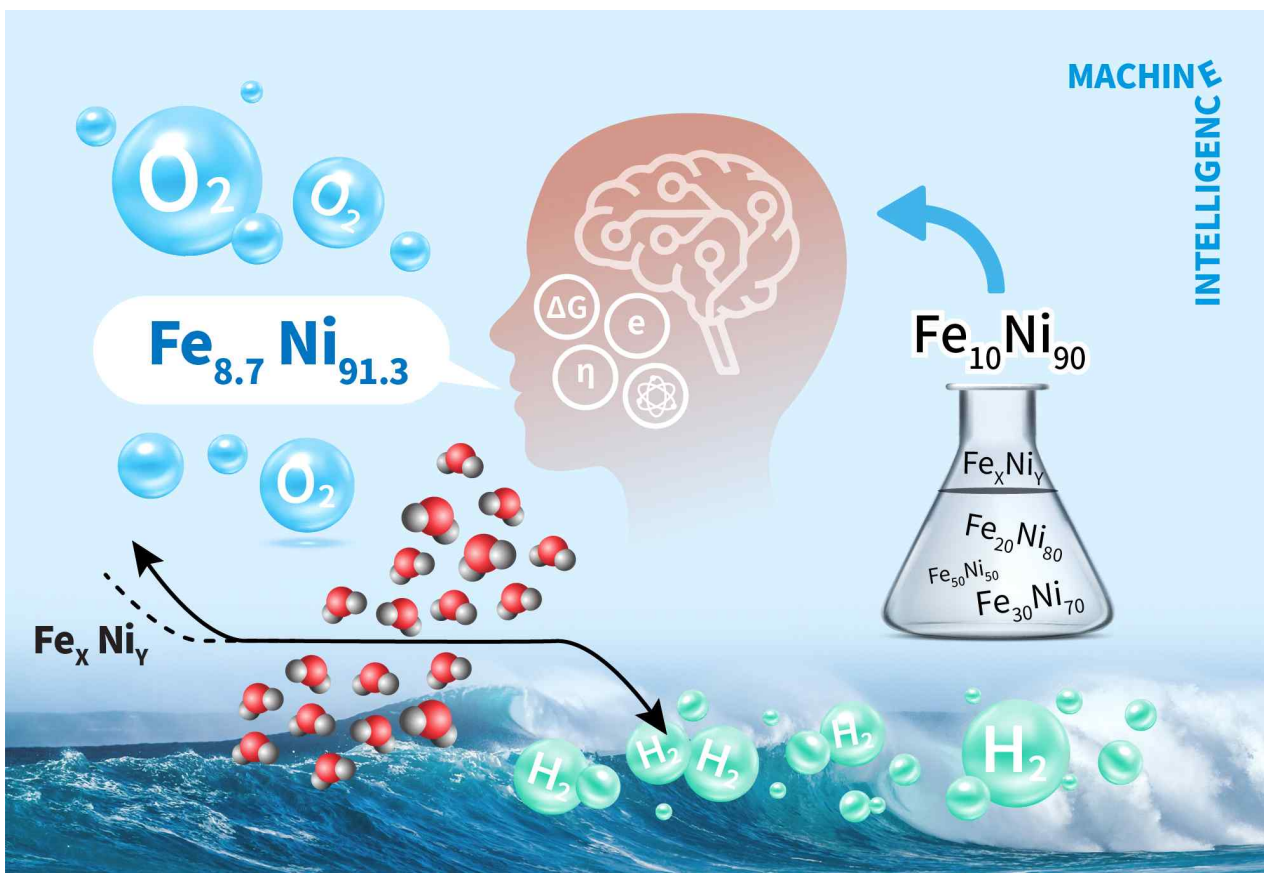
철과 니켈은 대표적인 비귀금속 전극촉매로서 가격이 낮고 매장량이 풍부하며 산소 발생을 위해 높은 과전압을 가지지만, 두 촉매를 적절히 조합하면 시너지 효과로 인해 과전압을 낮출 수 있다.

과전압을 조금이라도 더 낮추기 위해 두 금속의 비율을 조절하려는 연구들이 꾸준히 시도되고 있는데, 기존 연구들을 통해 철이 10% 내외일 경우 과전압이 낮다는 사실이 밝혀졌음에도 보다 정밀한 비율을 실험적으로 제시한 연구 결과는 찾아볼 수 없는 상황이다.

지스트(광주과학기술원) 지구·환경공학부 이재영 교수 연구팀은 수전해 시스템에서 사용하는 비귀금속 촉매인 철과 니켈의 최적 비율을 인공지능 딥러닝(Deep Learning)을 통해 제시했다.

연구팀은 철-니켈 촉매를 다양한 비율로 합성하고 그 특징들을 변수로 추출하여 데이터베이스를 만들었고, 딥러닝(Deep Learning)을 통해 철-니켈 촉매의 수많은 변수를 종합해 과전압을 표현하는 수식을 제시했다.

이 수식을 통해 과전압이 최소일 때의 철-니켈 촉매의 최적 비율 '철(Fe):니켈(Ni) = 8.7 : 91.3'을 도출했다.



▲ 그린수소 생산을 위한 수전해 공정에서 인공지능을 통해 철-니켈 비율을 특정하는 개념도

이재영 교수는 “이번 연구 성과는 그린수소를 생산하기 위한 수전해 촉매가 나아가야 할 방향을 인공지능이 제시한 것”이라며 “딥러닝 알고리즘이 촉매가 가진 자연 특성뿐만 아니라 두 금속 간의 최적 비율을 계산해 낸 놀라운 결과”라고 말했다.

지스트 이재영 교수팀이 수행한 이번 연구는 지스트의 <AI기반 사회문제 해결 융합 인재 양성 지원사업>, 한국연구재단의 <해외우수연구기관협력 허브구축사업>의 지원으로 수행됐으며, 화학 분야의 세계적인 학술지인 '저널 오브 머티리얼즈 케미스트리 A (Journal of Materials Chemistry A)'에 표지논문으로 선정되어 2022년 7월 15일자 온라인으로 게재됐다.

논문 및 저자 정보

1. 논문명, 저자 정보

- 저널명 : Journal of Materials Chemistry A(Impact factor: 14.511, 2021년 기준)
※ 화학 분야의 세계적 권위를 가진 국제학술지 (Energy & Fuel(9/119): 7.6% (상위 10% 이내 저널))
- 논문명 : Non-noble electrocatalysts discovered by scaling relations of key adsorption energies in water oxidation
- 저자 정보 : 박지현 박사(제1저자, 지스트), 강신우 박사과정 학생(공동 저자, 지스트), 이재영 교수 (교신저자, 지스트)