

“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

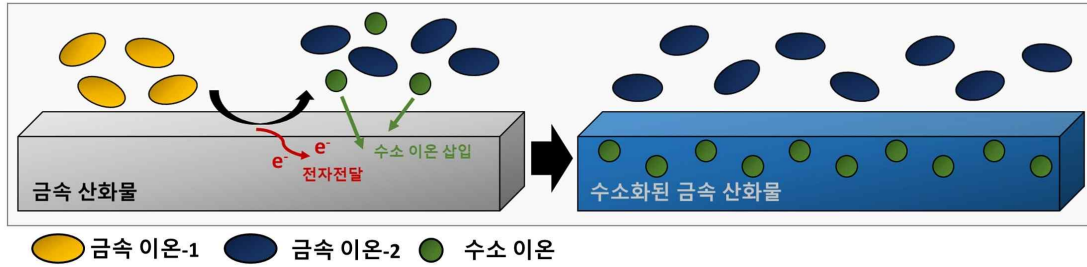
최근 에너지와 같은 다양한 분야에서 수소 이온을 활용한 소재의 물성 변형을 통해 배터리 등 에너지 저장 성능을 높이는 연구가 주목받고 있다.

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 측정한 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 측정한 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.**

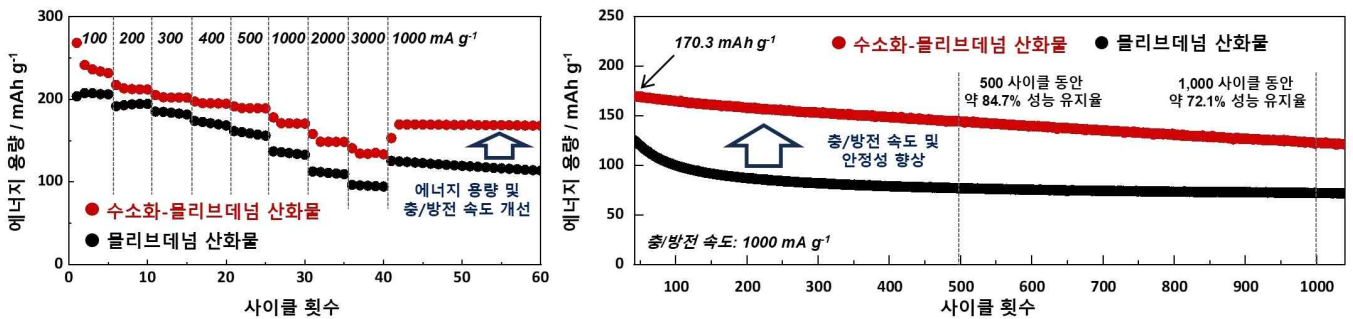
* **몰리브데넘:** 원자번호 42번으로 주기율표 상 6족에 속하는 전이금속이다. 야금학, 2차원 반도체, 태양전지, 배터리, 화학촉매 등으로 사용된다.

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.**

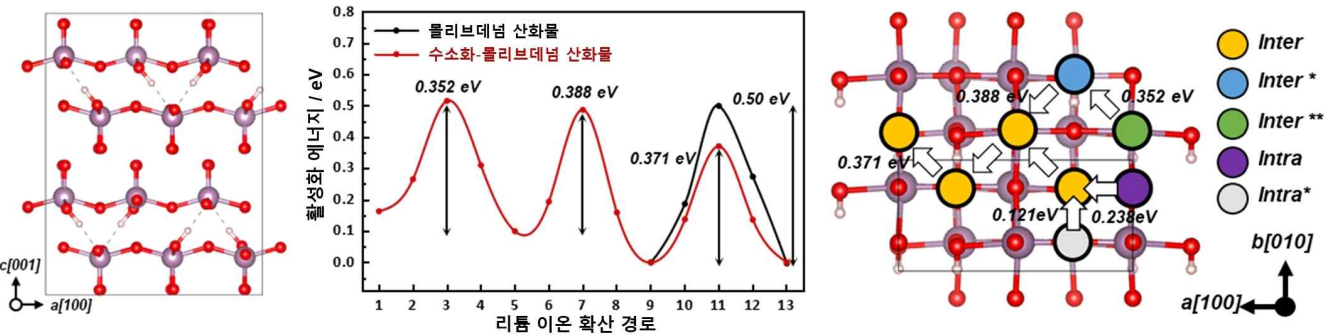
또한, 수소화-몰리브데넘 산화물 양극재는 기존 몰리브데넘 산화물이 가지고 있는 고질적 문제인 구조 붕괴 현상이 억제되어 **1,000회 충/방전 이후에도 초기 용량의 약 76%를 유지할 만큼 수명이 향상되었다.**

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 기대**된다”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)