

Pt(111)표면 위에서 O₂ 분자의 자성변화와 촉매반응성: 밀도범함수 이론

권오룡*, 홍순철
울산대학교 물리학과

화석연료의 고갈되어 가고 있는 매장량과 환경오염문제로 대체에너지에 대한 연구가 활발히 진행되어지고 있다. 수소에너지 사용이 해결방안의 하나로 제시 되고 있다. 운송 수단에 수소에너지를 사용에 적합한 PEM 연료전지는 일반적으로 음극과 양극에서 Pt가 촉매로 사용되어지는데 양극 Pt의 O₂ 환원반응이 PEM 연료전지의 반응속도를 결정하는 것으로 알려져 있다. 본 연구에서는 양극 Pt 촉매에서 일어나는 환원반응을 이해하기 위해 Pt 표면 위의 O₂의 흡착 반응에 대해 제일원리계산을 수행 하였다. 제일원리계산 방법은 VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)을 이용하였으며 Pt 표면 위의 O₂의 흡착 위치와 흡착에너지를 계산하였다. O₂의 흡착 반응이 활발한 Pt(111)표면에 대한 연구를 하였으며, O₂의 흡착 반응이 일어나는 Pt(111) 표면의 위치를 bridge site와 fcc hollow site 그리고 hcp hollow site로 나누어 명명하였으며, 계산결과 bridge site에 흡착되는 O₂ 분자만이 자성을 가지는 것을 알 수 있었다. Pt와 O₂ 반응에서 자성이 미치는 영향을 밝히기 위해 O₂ 위치에 따른 자기모멘트를 계산하였으며, 낮은 에너지를 계산하여서 에너지장벽에 대한 상관관계를 알아보았다. 상태 밀도와 전하밀도 분석을 통하여 흡착된 O₂ 분자의 이온화 상태, 자성간의 상관관계, Pt(111) 표면의 흡착반응에 대하여 논의하고자 한다.