

S1-002

제일 원리 사용 Y-doped SrTiO₃ 연료극 특성 이해 및 3d 전위 금속 치환에 의한 표면 반응성 제어

함형철, 김희수, 김용민, 윤창원, 윤성필, 한종희, 남석우

한국과학기술연구원 연료전지연구센터

최근에 고체산화물 연료전지(SOFC) 연료극 조건에서 우수한 상 안정성, 높은 혼합 전자/이온 전도도 및 황/탄소 저항성 때문에 yttrium-doped strontium titanium oxide (Y-doped SrTiO₃)가 대체 연료극 재료로 주목을 받아 왔다. 그러나 Y-doped SrTiO₃는 연료 산화에 대해서 기존의 Ni 계열 연료극보다 낮은 전기화학적 활성을 보이는 단점이 있다. 따라서, 효율적인 Y-doped SrTiO₃ 계열의 연료극 재료를 개발하기 위해서는 Y-doped SrTiO₃의 연료극 특성 및 반응성의 이해가 필수적이다.

본 발표에서는 SOFC 연료극에서 수소 산화 반응성을 결정함에 있어 표면 산소 vacancy 형성 에너지의 역할에 대한 spin-polarized DFT (density functional theory) 결과를 발표할 예정이다. 표면 산소 vacancy 형성 에너지는 수소 산화 반응[H₂+O (surface) → OH+OH → H₂O+O (vacancy)]과 밀접한 관계가 있다는 것을 확인하였다. 또한 Y-doped SrTiO₃의 표면을 3d-전이금속(Sc, V, Cr, Fe, Co, Mn, Ni, Cu) 도핑함으로써 표면 산소 vacancy 형성 에너지를 제어할 수 있다는 것을 보였다.

Keywords: DFT, SOFC, anode