

Pt₃M(M=Co,Fe)표면에서 O₂흡착과 자성의 상관관계: 밀도범함수 이론

권오룡*, 홍순철
울산대학교, 물리학과

본 연구에서는 PEMFC의 공기극(cathode)에서 Pt 촉매를 대신하여 강자성물질인 Co, Fe과 Pt가 합금으로 이루어진 Pt₃M(M=Co,Fe)합금에 대하여 연구하였다. 제일원리 계산방법으로 VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)을 이용하였으며 Pt에 대표적인 강자성물질인 Co, Fe이 합금에 첨가가 됨에 따라 어떠한 자성상태가 안정한지를 총 에너지 계산을 통하여 확인하였다. Pt₃M (M=Co, Fe)은 각각 강자성 상태가 안정하였고 segregated된 표면과 non segregated 표면으로 구성된 Pt₃M(111)고려하여 보면 각각 -0.593 eV, -0.397 eV 차로 segregated 표면이 non segregated 표면에 비해 안정하였다. 이 계산을 바탕으로 표면에서 O₂흡착에 따른 표면의 자성변화를 비교하였다. 그리고 DOS(Density Of States)그림을 통하여 O₂흡착에 따라 Pt₃M합금의 각각 원자의 orbital 상태가 표면의 어떠한 자성 변화를 미치는 지를 분석하였다.