

Pt/Ru(111)의 자성과 촉매 반응성에 대한 제일원리계산

이상희*, 권오룡, 홍순철

울산대학교 물리학과, 울산광역시 남구 대학로 93, 680-749

연료전지의 전극에는 Pt가 촉매로 널리 사용되고 있다. 연료전지 공기극에서 산소의 환원반응은 연료극에서 수소의 산화반응보다 느려 실질적으로 연료전지의 전체 효율을 결정한다. Pt 자원은 매장량 뿐만 아니라 매장 지역까지도 제한적인 것은 연료전지 산업화에 큰 장애가 될 것으로 예상되므로 Pt을 대체하거나 Pt 사용량을 줄이기 위한 연구가 필요하다.

본 연구에서는 Ru(111) 기판 위의 Pt의 전자구조를 제일원리계산 방법을 이용하여 계산하고 순수한 Pt(111) 표면의 전자구조와 비교하여 촉매로서 사용 가능성을 연구하였다. 제일원리계산방법으로 VASP(Vienna Abinitio Simulation Package)을 이용하였으며 Pt 층의 두께를 달리하여 두께에 따른 전자구조의 변화와 반응성을 살펴보고자 하였다. 순수한 Pt 와 Ru 기판위의 Pt 표면에서 산소 분자의 가장 안정한 흡착위치는 bridge 자리이었다. 해리된 산소의 흡착위치와 분자에서 원자로 해리과정에서 에너지 장벽의 높이를 계산하여 순수한 Pt(111)과 비교, 분석하였다.