

## 제일 원리 계산을 이용한 $\text{CoPt}_3(111)$ 합금의 자성과 촉매반응성

이상희\*, 권오룡, 홍순철†

울산대학교 물리학과, 울산광역시 남구 대학로 93, 44610

연료전지의 전극에는 Pt가 촉매로 널리 사용되고 있다. 특히, 연료전지 환원극 내 산소 환원반응 속도는 산화극에서 수소 산화반응 속도에 비해 5배 이상 느리므로, 환원극의 활성화 에너지를 낮추기 위해 고가의 백금촉매가 많이 사용된다. 따라서 저가의 고효율 산소 환원 반응 촉매를 개발할 필요가 있고, 수소 연료전지로부터 안정적인 전력을 생산하기 위해, 높은 전기화학적 활성뿐 아니라 내구성도 동시에 갖춘 촉매 물질도 요구되고 있다.

본 연구에서는 Pt 저감 촉매 물질 탐색을 하고자 3d 전이금속중 하나인 Pt-Co 합금의 촉매 반응성을 연구하였다.  $L1_2$  구조의 덩치  $\text{CoPt}_3$ 의 격자상수, 전자구조, 자성을 계산을 통해 구하고,  $\text{CoPt}_3(111)$  합금 표면의 전자구조를 제일원리계산 방법을 이용하여 계산하였다. 또한, 산소분자의 흡착위치, 해리된 산소원자의 흡착위치, 해리 과정에서의 장벽의 높이를 계산하여 Pt(111) 표면의 그것들과 비교, 분석하고,  $\text{CoPt}_3$ 의 자성과 촉매성 사이의 상관관계에 대해서도 논의할 예정이다.