

제일원리계산을 활용한 Pd₃₈NC/Ni(OH)₂-Graphene 촉매 시스템에서 재생 가능한 수소
에너지 생산을 위한 개미산(HCOOH) 탈수소화 반응
메커니즘 규명

신동윤, 김민수¹, 강석호¹, 권정안¹, 신연정¹, 윤창원², 임동희^{1,†}

충북대학교; ¹충북대학교 환경공학과; ²한국과학기술연구원 수소연료전지연구단

(limkr@cbnu.ac.kr[†])

화석연료를 대체할 수 있는 에너지원인 수소에너지의 저장 및 수송을 위한 고효율의 매체 및 촉매 개발은 수소 경제 실현화를 위해 달성해야 할 과제이다. 최근 Pd와 Ni(OH)₂가 결합된 촉매 시스템이 높은 HCOOH 탈수소화 효율 뿐만 아니라 CO 생산을 효과적으로 억제할 수 있다는 연구결과가 보고되었다. 그러나 이에 대한 반응 메커니즘 및 multi-component interface system에 대한 이해가 부족한 현실이다. 이를 위해 본 연구에서는 제일원리계산을 활용하여 그래핀(G) 지지체가 더해진 다양한 Ni(OH)₂ 표면들을 디자인하고 Pd₃₈NC와 결합하여 HCOOH 탈수소화 메커니즘을 분석하였다. 이를 통해 Pd₃₈NC/Ni(OH)₂-G 촉매 시스템에서 HCOOH의 H 원자와 O 원자가 흡착되는 에너지(-1.10 eV) 보다 두개의 H 원자가 흡착될 때의 에너지(-1.67 eV)가 더욱 안정적인 것을 확인하였다. 이는 HCOOH 탈수소화의 다음 단계인 HCOO 형성에 영향을 주어 수소 발생에 긍정적인 영향을 미칠 수 있다. 이를 더욱 명확하게 규명하기 위하여 활성화 에너지, 전자구조 분석, 촉매의 내구성 분석을 수행하였다.