

Bifunctional HER mechanism in alkaline environments of Nickel-Molybdenum Nitride
(Ni₂Mo₃N)조태환, 임형규[†]

강원대학교

(hklim@kangwon.ac.kr[†])

HER (hydrogen evolution reaction, 수소생성반응)은 전기화학적 수소생산 분야의 핵심기술로써 다가올 수소 기반 신재생에너지 시대에 매우 중요한 역할을 할 것으로 기대된다. HER에 대한 이론적인 촉매 활성 결정 인자로써 주로 H-binding energy (ΔG_{H})가 고려되고 있으며, 특히 Pt와 같이 ΔG_{H} 가 0에 근접한 촉매를 이상적인 촉매라 할 수 있다. 하지만, 산성 환경과는 다르게 알칼라인 환경에서는 proton source로써 물분해 과정이 요구되므로 ΔG_{H} 만으로는 HER 활성을 설명하기 어렵다. 본 연구에서는 제일원리 양자계산 방법론을 통해, 알칼라인 환경에서 Pt 동등 이상의 HER 활성을 갖는 Ni₂Mo₃N 물질의 활성 발현 메커니즘을 제안하였다. 물분해가 용이한 metal 활성 영역과 수소생산에 용이한 nitrogen 활성영역이 원자 수준에서 표면에 형성되어 bifunctional mechanism을 통해 알칼라인 환경에서 높은 HER 활성을 갖는 것으로 이해된다.