

Understanding the hydrogen evolution reaction mechanism at the various oxygen concentrations of Ni/YSZ interface for the cathode of solid oxide electrolysis cell: A DFT study

이수형, 김혜승, 유종석[†]
서울시립대학교
(jsyoo84@uos.ac.kr[†])

현재 수소가스는 주로 화석연료나 에너지원의 가스화 또는 개질반응으로 생산하고 있는데, 이러한 방법은 이산화탄소를 배출하여 기후변화를 야기한다. 따라서 최근에는 친환경적 전기분해 시스템을 통해 수소가스를 생산하는 방법이 주목받고 있다. 그 중에서도 고체 산화물 전해 전지는 간단한 구조를 가지고 있고, 고온에서 작동하여 효율이 좋다는 장점이 있다. 또한, Ni/YSZ의 Ni은 우수한 전기 전도성과 촉매 특성을 나타내고, YSZ는 좋은 안정성과 산소 공극으로 인해 이온 전도성이 좋기 때문에 고체산화물 전해 전지의 환원 전극으로 주로 사용되고 있다. Ni/YSZ는 세 가지 상이 만나는 삼상계면이 존재하는데, 환원 반응이 다성분 (Ni, YSZ, and Gas), 이중캐리어 (O^{2-} and e^-)로 일어나기 때문에 환원 전극의 특성을 파악하는 것이 중요하다. 시뮬레이션 계산을 통한 연구는 전극의 구조를 파악하기 용이하고, 다양한 반응 경로를 자유 에너지와 키네틱 모델링을 통해 비교할 수 있다. 따라서, 본 연구에서는 밀도범함수 이론을 이용한 계산 화학적 방법을 통해 Ni/YSZ에서 수소 발생 반응의 산소 공극 형성과 반응 메커니즘을 규명하고자 한다.