

### 나노 금속 합금 촉매 작용의 Density Functional Theory (DFT)적 이해

함형철\*, 조진원, 후안 마틴 헤르난데스, 이민재, 이상현, 임동희, 유성종, 윤창원, 장종현, 조은애, 윤성필, 한중희, 남석우

KIST 연료전지연구센터

(hchahm@kist.re.kr\*)

나노 금속 합금 촉매는 단일성분 금속 촉매에 비해서 촉매 효율을 크게 향상시킬 수 있다. 이러한 향상은 다양한 합금 효과에 기인하게 된다. 즉, (1) 합금 구성 원자들의 표면 배열 [ensemble (geometric) effect], (2) 합금 구성 원자들간의 상호 작용에 의한 전자구조의 변화 [ligand (electronic) effect], (3) 합금 구성 성분들간의 격자 불일치에 의한 strain 존재 [strain effect] 등이 합금 촉매의 활성을 결정할 수 있다. 또한 나노 촉매의 모양 및 입자와 관계된 낮은 배위 원자 및 특별한 결정면 등의 선호적인 표면 형성은 촉매 활성을 결정하는 또 다른 중요한 인자가 될 수 있다. 그러나 직접 분석의 어려움 때문에 합금 효과의 이해 정도는 매우 낮다. First-principles density functional theory (DFT)에 기반한 계산과학적 접근은 촉매 활성 및 구조 등 같은 정보를 정량적으로 제공할 수 있어 합금 효과의 역할을 이해하는 데 강력하고 유연한 방법이 될 수 있다. 본 발표에서는 DFT를 사용하여 나노 금속 합금 촉매에서 촉매 반응을 지배하는 원리를 다룰 것이다.