

제일원리 기반 FeN₄ 활성점의 상호작용에 따른 ORR 성능 연구

허진서, 임형규[†]

강원대학교

(hklim@kangwon.ac.kr[†])

연료전지의 Cathode 촉매로 사용되는 Pt는 고비용 및 용출 문제로 인한 단점을 가지고 있으며, 이를 해결하기 위해 FeN₄ 기반 연구가 다양하게 진행되고 있다. FeN₄ 촉매는 single atom catalyst로써 Pt에 근접하는 성능을 확보하기 위해 활성점의 density를 극대화할 필요가 있다. 제일원리 기반 밀도범함수 방법론을 이용하여 FeN₄ 활성점이 인접했을 때 전자 구조적인 상호작용에 의해 활성에 어떤 영향이 있는지 연구를 수행하였다. 두 활성점의 인접 구조에 따라 전자구조 특성이 달라졌으며, 활성점 고유의 열역학적 ORR 성능에 차이가 나타났다. 활성점의 구조와 ORR 성능의 상호관계를 통해 최적의 촉매 구조를 제안할 수 있다.