Miscible PtAu Nanoparticles with Excellent Catalytic performance for H2O2 Direct Synthesis: DFT Calculation and Experiment

이홍우[1,2], 이관영[2,†], 한상수[1]
[1]한국과학기술연구원; [2]고려대학교
(kylee@korea.ac.kr[†])

H2O2 직접합성 촉매로서 높은 수율을 가져온 Palladium (Pd)이 중점적으로 사용되어져 왔다. 수율을 가져온 Palladium (Pd)이 중점적으로 사용되어져 왔다. 그러나, Pd의 우수한 활성으로 인하여 O2 분자마저 해리가 쉽게 일어나, 주변의 해리된 수소 원자와 Hydrogenation 되면서 H2O와 같은 부산물을 쉽게 형성하는 문제가 있었고, 낮은 선택도로 이어졌다. 이를 개선하기 위해, 몇몇 연구진들은 수십년간 주로 화학 반응성이 적다고 알려진 Au를 Pd 입자에 도입하는 연구 중심으로만 DSHP 촉매 개발이 지속되어 왔다. 다시 말해, Bimetallic 촉매 개발 후보군에서 Immiscible 원소들 간 조합은 쉽게 배제되어 왔다. 본 연구에서는, DSHP에서 요구되는 특성인 수소를 잘 해리시키는 것으로 알려진 금속과 Inactive 한 금속으로 알려진 Pt와 Au를 서로 Solid solution alloying 시키는 연구를 수행하였다. 본래 Ambient한 컨디션에서는 열역학적으로 잘 섞이지 않던 두 금속을 비교적 간단한 환원 방법을 통해, FCC 구조를 갖는 Miscible PtAu 나노 입자를 성공적으로 합성하였다. 그리고, 이를 과산화수소 직접합성(DSHP) 촉매로써 활용한 사례에 대해 보고한다.