

싱크로트론 AP-XPS/XAS 장치를 이용한 단원자 촉매 활성 사이트 검출

- 제1저자 : 정범균 (KBSI 멀티모달 X-RAY/IN-SITU 연구그룹), HAFIZ GHULAM ABBAS (고려대학교), BENEDIKT PAUL KLEIN (KBSI 소재분석연구부)
- 교신저자 : 정범균 (KBSI 멀티모달 X-RAY/IN-SITU 연구그룹), REINHARD J. MAURER (UNIVERSITY OF WARWICK), STEFAN RINGE (고려대학교)
- ANGEW. CHEM.-INT. EDIT. / 2025. 3. (DOI: 10.1002/ANIE.202420673)

연구내용

본 연구는 연료전지용 FeNC(single-atom Fe-N-C) 촉매에서 촉매 활성점(Fe-N₄)의 밀도를 정량적으로 계측할 수 있는 새로운 표면분석 기반 기법을 제시함.

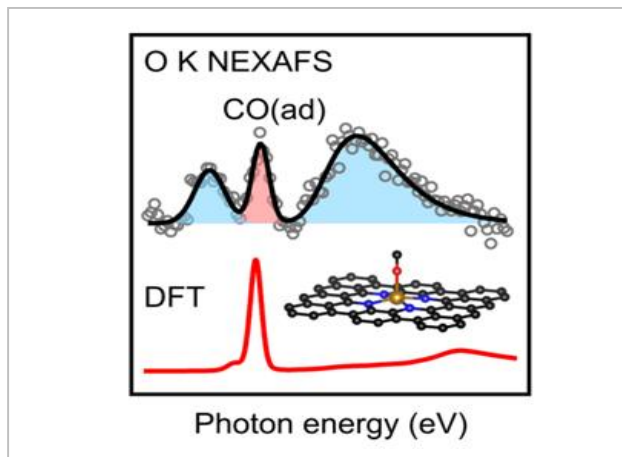
구체적으로는 저온에서 CO 분자(CO cryo-sorption)를 촉매 표면에 흡착시킨 후, X선 광전자 분광법(XPS) 및 X선 근접흡수 미세구조(NEXAFS) 분석을 통해 CO가 Fe-N₄ 활성점에 선택적으로 결합한 스펙트럼 피크를 식별함.

또한 밀도범함수 이론(DFT) 기반의 시뮬레이션을 통해 이 스펙트럼 지문을 이론적으로 검증하였으며, 이를 통해 활성점 밀도를 빠르고 정확하게 계산할 수 있는 방법론을 확립함.

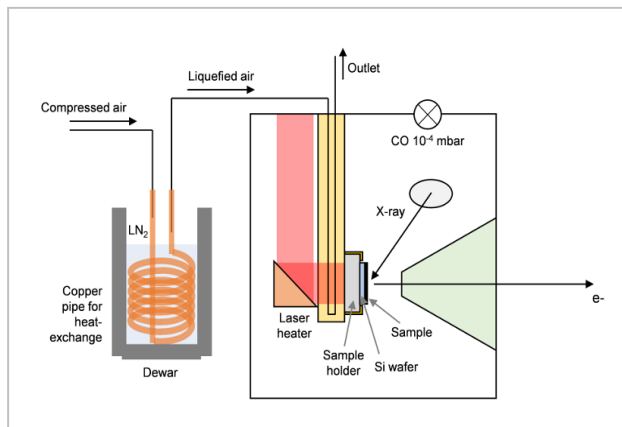
이는 기존의 전기화학적 측정이나 질량분석 기반 방법보다 표면 선택성(surface specificity)이 높고, 비파괴적이며 고속 분석이 가능하다는 강점이 있음.

기대효과

- 기존 방식보다 표면 선택성이 높고, 신속하며 정량 정확도가 높은 촉매 평가법 개발
- FeNC 단일원자 촉매의 정밀한 성능 평가 및 물질 설계 지침 정립 가능
- 다양한 전기화학 촉매 시스템에 확장 적용 가능성 보유 (e.g., CO₂ 환원, NO_x 제거 등)
- 고가 귀금속(Pt 등) 대체 촉매 기술의 산업적 실용화 가속



[그림1] 연엑스선 흡수 분광 및 DFT 계산을 이용한 Fe-N₄ 활성 사이트에 흡착한 CO 성분 포착



[그림2] Fe-N₄ 활성 사이트 CO 흡착 실험 개념도