# 빛으로 열어 나가는 미래: 광촉매의 기초이론과 활용 방안

인천과학예술영재학교 김성윤, 김현아

## Open question (1) 강조하고자 하는 광촉매의 장점을 서술한다.

2D materials 광촉매

2D 물질은 원자 수준에서 2차원 형태를 가지는 물질로, 이중결합 혹은 삼중결합을 가지는 고분자소재로써 다중결합의 파이 결합전자들이 광조사에 의해서 유도되는 극성을 가진다.

2D materials 광촉매는 기본적으로 얇고 표면적이 넓은 2D 물질의 특성으로 인해 빛과 반응할 수 있는 활성부위가 많아 높은 전하 분리 효율을 가지며, 양자억제 효과를 통한 밴드갭 두꼐 조절이 가능하다는 이점이 존재한다.

## Open question (2) 광촉매의 성능을 향상시킬 수 있는 촉매 물질의 특성들을 나열하고 분석하는 방법을 제시한다.

광촉매의 성능을 향상시킬 수 있는 촉매 물질의 특성은 다음과 같다.

* 높은 광흡수 능력
  + 넓은 범위의 태양광 스펙트럼(혹은 가시광선 영역대의 스펙트럼) 흡수가 가능해야한다.
* 광학적 특성 조절- 나노구조화 혹은 표면 플라즈몬 효과를 통한 흡수 범위 확장

결정구조 최적화

* 적절한 밴드갭 크기
  + 밴드갭의 크기에 따라 흡수가능한 빛의 파장대가 달라진다.
* 밴드 갭이 너무 클 경우 : 광촉매가 자외선(UV) 영역에서만 작동하게 되어 태양광 활용 효율 낮아지게 됨
* 밴드 갭이 너무 작은 경우: 광촉매의 빛 흡수 후 전자-정공 재결합율이 증가하게 되며 이로 인해 반응 효율이 낮아지게 됨
* 전자 및 정공의 재결합 억제 능력.
* 결함, 도핑들을 통한 전하 분리를 유도한다.
* 이종접합(Heterojunction): 2개의 다른 물질을 조합하여 전자의 이동 경로를 길게 만들어 재결합을 억제한다.
* 표면 개질: 촉매 표면의 친화성을 높여 전자의 빠른 전달이 가능하게 한다
* 높은 전하 이동도 및 안정성 등

SEM(Scanning Electron Microscope) - 물질의 표면을 관찰가능한 전자현미경

TEM(Transmisson Electron Microscope) - 물질의 내부단면을 관찰가능한 전자현미경

XRD(X-ray diffraction) – X선의 회절을 이용, 결정의 원자 분자 구조를 밝혀내는 분석방법

XPS(X-ray Photoelectron Spectroscopy) - 시료 표면에 X선을 입사시켜 방출되는 광전자를 이용, 고체표면과 계면의 구성원소나 화합결합 상태 등을 밝혀내는 분석방법

UV-VIS(Ultraviolet–Visible spectroscopy)- 자외선 파장을 쏘아 화합물의 농도를 측정하는 분석방법

AFM(Atomic Force Microscope) – 미세한 탐침을 시료표면에 근접시킬 때 그 끝(팁)과 시료표면간의 작용하는 상호간의 힘을 측정하여 시료표면의 이미지를 언든 분석방법

구체적인 설명은 다음 참조([XRD vs.HRTEM vs.AFM vs. UV Vis vs.NMR](https://www.youtube.com/watch?v=4uTWTQ_cs3U))

## Open question (3) 광촉매를 활용 가능한 산업 분야 혹은 제품군을 특정한 후 그 분야의 문제점을 탐색한다.

물 분해를 통한 수소(H2) 및 산소(O2) 생산 및 부생수소 정제

현재 미래의 친환경 기술이라 주목 받고 있는 수소 연료 전지는 수소와 산소를 전기 화학적으로 반응시켜 전기 에너지를 발생시키는 장치이다. 허나 이를 위해 필요한 수소 생산 산업에서는 부생수소(일명 그레이 수소)가 큰 비중을 차지하고 있다. 부생수소는 타 생산물을 생산하고 남은 수소를 포집하는 방식인 탓에 그 양이 한정되어 있고, 화석연료 산업에 의존하는 탓에 지속 가능성이 부족하다. 무엇보다. 수소를 생산하는 과정에서 동시에 탄소 배출이 같이 이루어진다는 문제점이 존재하며, 이 탓에 다른 기체로부터 수소를 분리하기 위한 정제 과정이 별도로 필요로 한다.

## Open question (4) 3번의 문제점 중 한 가지를 선택한 후 구체적인 적용방안과 해결방안을 고안해본다.

2D material 광촉매를 통한 친환경 수소 생산(Hyrogen Evolution Reaction) 및 부생수소 정제 방안

1. 광촉매를 통한 친환경 수소 생산

2D material 광촉매의 경우 높은 표면적 및 밴드갭 조절(태양광 흡수 가능)이 가능하여 물분해에 유리한 이점을 가진다. 이황화몰리브덴(MoS₂)은 이산화티타늄과 결합한 TiO₂-MoS₂ 복합체는 가시광선 흡수효율이 높아, 현재 HER processing에서 높은 전망을 가지고 있다.

이를 통해 태양광 기반 수소 플랜트 구축하여 수소 생산 효율을 크게 늘릴 수 있다.

1. 부생수소 정제

.

부생수소에는 다양한 불순물이 포함될 수 있어 고순도 수소로 전환하기 위한 정제가 필요하여 광촉매 기술을 활용해 다음과 같은 정제 작업의 효율을 증가 시킬 수 있다

**CO 등 불순기체 제거**:

부생수소에는 일산화탄소(CO)및 황화수소(H₂S) 그리고 메탄(CH₄) 등 탄화수소가 포함되어 연료전지와 같은 응용에서 문제를 일으킨다., 광촉매를 이용해 이를 선택적으로 제거가 가능하다.

CO + H₂O → CO₂ + H₂ / TiO₂ 기반 촉매

H₂S → H₂ + S / CdS 기반 광촉매, ZrO₂ 광촉매

CH₄ + 2O₂ → CO₂ + 2H₂O / CeO₂ 기반 촉매, TiO₂-Ag 광촉매

또한 이러한 분리과정에서 타 기체 중 H2만을 포집하여 그 순도를 높이고 타 기체는 배제하는 시스템을 제작할 수 있다.

## Open question (5) 사회적 수요가 있는 제품을 시장에 출시했을 경우 그 제품의 가치를 평가해 본다.

부생수소는 현재 수소 산업에서 가장 큰 비중을 차지하고 있어 한순간에 이를 대체할 수 없다. 하지만 대부분의 부생수소가 석유화학, 철강, 정유 등 화석연료 공정을 통해 나오는 부산물에 의존하고 있어 생산과 동시에 탄소 배출이 이루어지며, 각 산업의 경제 상황에 따라 생산량이 변동될 가능성이 높다. 그렇기에 부생수소에서 친환경 수소로의 전환은 필수불가결한 사항이다. 광촉매를 통한 수소 생산은 현재 산업계 족에서도 크게 각광받고 있는 산업인 만큼 효율등의 문제를 해결하여 도입될 가능성이 크다. 또한 전환시기의 절충안으로서 부생수소의 정제 순도를 광촉매를 통해 향상시켜 수소 생산의 효율을 증가 시켜 부생수소의 양이 한정되는 문제를 어느정도 완화시킬 수 있을 것으로 보인다. 그러나 CO2 등 탄소 배출 문제가 여전히 남아있기에 포집하여 처리하는 CCUS 기술과의 연계가 필요해보인다.