

안정적인 수소 발생을 위한 실리콘 광전극의 유기 보호막 개발

윤찬규, 서지연 | 부산대학교 나노에너지공학과 (E-mail: j-y.seo@pusan.ac.kr)

최근 수소생산 기술이 활발하게 연구되고 있다. 하지만 여전히 장기적으로 안정하게 수소를 생산해 낼 수 있는 소재의 개발이 필요한 상황이다. 본 연구에서는 실리콘 광전극 기판으로부터 전해질을 분리하고 촉매의 물 분해 반응성을 동시에 향상시킬 수 있는 친수성 유기 보호층의 개발과 최적화된 광음극의 제조로 안정된 수소 생산을 가능하게 하였다.

태양 에너지를 수소와 같은 화학 연료로 변환하는 접근 방식은 에너지 및 환경 문제 해결을 위한 지속 가능한 전략이다. 저비용과 적절한 밴드 갭을 갖춘 실리콘은 광전기화학적 물 분해를 통한 수소 생산에 적합한 대표적인 소재이다. 그러나 실리콘(Si)은 수용액에서 쉽게 비활성화되는 단점이 있다. 이 문제를 해결하기 위해, 실리콘 표면에 금속 산화물 층(예: TiO_2)을 코팅하여 성능을 개선하는 연구가 있었으나, TiO_2 는 음전위(negative potentials)와 적외선에서 불안정하다는 한계를 가지고 있다.

본 연구에서는 이러한 문제를 해결하기 위해 소수성의 표면에 하이드록실기의 친수성 작용기를 가지는 친수성 유기 보호막을 도입하여 실리콘 표면의 젖음성을 조절했고, 유기 보호막의 기공

크기를 최적화하여 실리콘 전극의 노출 표면적을 조절하였다. 그 결과, 최적화된 노출면에서 백금(Pt) 공촉매(co-catalyst)가 가스층을 관통하여 전해질과 접촉할 수 있게 되어 높은 광전류를 유지하고 소자의 장기 안정성을 확보할 수 있게 되었다.

이를 위해 실리콘 표면에 안정적으로 정착 가능한 친수성 유기 보호막 형성을 위해 사용된 화학물질은 오가노실레인(organosilane) 물질의 한 종류인 Si($\text{O}-\text{CH}_3$)₃-(CH_2)₁₇- CH_3 (trimethoxy octadecylsilane, TMOS)를 사용하였다. 그림 1과 같이 pn^+ -Si 표면에 코팅된 친수성 TMOS 유기 보호층의 기능과 다공 구조로 노출된 pn^+ -Si 표면에서 백금 촉매의 수소 발생반응(HER)에 의한 수소 생산의 모식도와 전압대별 전류 밀도 결과값을 보여주고 있다.

장기안정성 측정결과, 기존의 실리콘 광음극에 비해 친수성 유기 보호막이 형성된 실리콘 광음극은 장기간(110시간 이상) 안정적으로 수소생산반응을 하는 것으로 나타났다. 또한, 일반적으로 소수성 표면에서는 기포가 축적되어 전류가 약 22%가 감소하는 것과 달리 친수성 표면 형성 덕분에 전극 표면에 기포가 축적되어 전류 밀도가 감소하는 현상도 나타나지 않았다.

본 연구는 실리콘 기반 광음극의 장기간 안정성을 개선하기 위한 친수성 유기 보호층의 설계 및 제작 방법을 제시하였다. 이러한 기술의 발전은 향후 태양 에너지를 화학 연료로 전환하는 다양한 에너지 응용 분야에서 중요한 역할을 할 것으로 기대된다.

본 연구결과는 *Nature Communications*에 “Stable solar water splitting with wettable organic-layer-protected silicon photocathodes”의 제목으로 2022년 8월에 게재되었다 (DOI: 10.1038/s41467-022-32099-1).

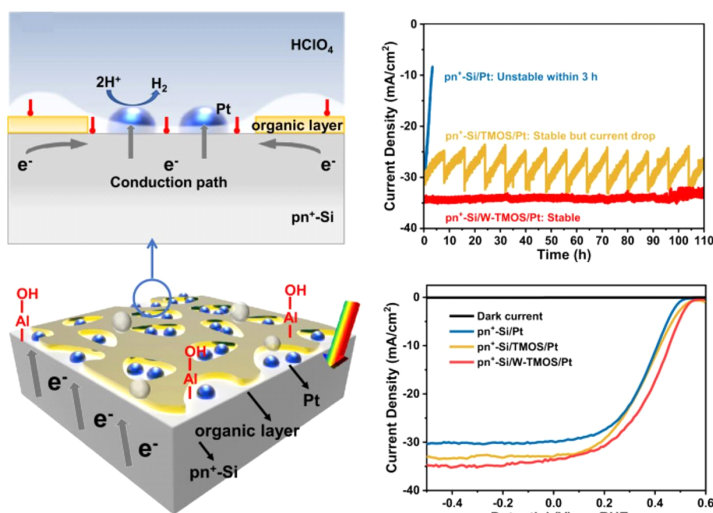


그림 1. (좌측) 습윤성 유기 보호층의 구조. (우측 상단) 장기간 안정성 시험과 (우측 하단) 전압대별 전류 밀도.