

II

연구성과



- Rapid sintering of TiO_2 photoelectrodes using intense pulsed white light for flexible dye-sensitized solar cells
고민재 | 한국과학기술연구원 광전하이브리드연구센터 10
- Biosynthesis of pinene (potential jet-fuel) from glucose using metabolically-engineered *Corynebacterium glutamicum*
우한민 | 한국과학기술연구원 청정에너지연구센터 13
- Separation of sulfur hexafluoride (SF_6) from ternary gas mixtures using commercial polysulfone (PSf) hollow fiber membranes
이상협 | 한국과학기술연구원 물자원순환연구단 19
- Photocatalytic performance of $\text{V}_2\text{O}_5/\text{TiO}_2$ prepared by Chemical Vapor Condensation and impregnation method under visible-light
정종수 | 한국과학기술연구원 환경복지연구단 22

- Investigation on growth behavior of multiphase silicon carbon film for front contact layer in a Si thin film solar cell
김동환 | 고려대학교 신소재공학부 29
- Effective Antifouling Using Quorum-Quenching Acylase Stabilized in Magnetically-Separable Mesoporous Silica
김중배 | 고려대학교 화공생명공학과 34
- Distinct Rayleigh Scattering from Hot Spot Mutant p53 Proteins Reveals Cancer Cells
심상준 | 고려대학교 화공생명공학과 38
- Direct synthesis of hydrogen peroxide from hydrogen and oxygen using Pd nanocatalysts
이관영 | 고려대학교 화공생명공학과 42

Rapid sintering of TiO_2 photoelectrodes using intense pulsed white light for flexible dye-sensitized solar cells*

고 민 재 | 한국과학기술연구원 광전하이브리드연구센터 책임연구원 / 고려대학교 그린스쿨대학원 교수

1. Introduction and Experimental section

염료감응 태양전지(Dye-sensitized solar cells, DSSCs)는 낮은 생산단가와 유연기판에 적용 가능하다는 장점으로 차세대 에너지원으로 각광받고 있다. 통상의 경우, 염료감응 태양전지는 구부릴 수 없는 유리기판에 제작하는 것이 일반적인 방법이지만, 여러 응용분야에 접목시키기 위해서는 roll-to-roll(R2R) 공정 등을 적용할 수 있는 플라스틱 기판 적용기술이 필요한 상황이다. 일반적으로 고효율 태양전지 제작을 위해서는 TiO_2 광전극을 450°C 이상의 온도에서 장시간 열처리(고온소성) 하는 과정이 필요한데, 이는 TiO_2 의 나노입자 간 연결을 좋게 해주어 전자 이동을 향상시켜 높은 광전류를 얻을 수 있기 때문이다. 하지만, 플라스틱 기판을 사용할 경우, 기판의 열안정성이 떨어지기 때문에 이러한 고온소성 공정을 적용할 수 없게 된다. 따라서 플라스틱 기판에 적용이 가능한 광전극 소성 방법으로 다양한 방법들이 연구되어 왔다. 예를 들어, 화학적 소결(chemical sintering), 기계적 압축 공정(mechanical pressing), 수열 결정화(hydrothermal crystallization), 전기영동법(electrophoretic deposition), 마이크로파 조사법(microwave irradiation), 자외선 조사(UV light irradiation), 극적외선 방법(NIR oven) 및 필름 전사법(film transfer)과 같은 방법들에 대한 연구들이 진행되어 왔다. 그러나 대부분의 방법들은 R2R공정과 같은 고속공정에 적용시키기 어려운 다단계 과정 공정이거나 공정적 접근성에 문제가 많이 있다는 단점을 가지고 있다.

이 연구에서는 공정성까지 고려한 효율이 높은 유연기판의 염료감응 태양전지를 위해 Intense Pulsed White Light(IPWL)를 사용하여 광전극의 소성에 적용하였다. 최근까지도 IPWL 광적 조사를 통해 나노 잉크 소결(nano-ink sintering)을 넓은 면적에도 빠르게 적용 가능할 수 있는 연구가 진행되어 왔다. 이러한 IPWL 방법은 (i) 밀리 초 단위의 빠른 소성 방법 공정, (ii) 여러 활용 분야에 적용 가능한 간단하고 접근성이 쉬운 공정, (iii) 넓은 디바이스 공정에 적용 가능 및 (iv) 진공상태가 아닌 일반 실험실 공기 상태에서도 적용 가능한 방법과 같은 상당한 이점을 가지고 있다. 이러한 다양한 이점을 가진 IPWL을 이용한 이 연구는 TiO_2 광전극을 광적 소성을 이용하여 나노 입자간의 상호 연결을 수 초 내로 가능하도록 하였으며, 이를 통해 염료감응태양전지의 효율향상을 볼 수 있었다.

본 연구에서는 10cm×2cm크기의 IPWL 빔을 이용하였고, ITO-PEN(tin-doped indium oxide

* Min Jae Ko (corresponding author) et al., *Applied Physics Letters*, Volume 104, Number 14, April 2014, 143902.

-polyethylene terephthalate) 위에 TiO_2 를 코팅한 광전극을 이용하였다. 이 때의 IPWL은 $21\text{J}/\text{cm}^2$ 수준이었으며 1번에서 9번의 반복적인 조사를 통한 효율 비교를 시도하였다.

2. Results and discussion

IPWL을 조사할 때에, 높은 강도의 빛 에너지를 사용하면 수 초 이내의 시간 스케일에서도 광전극의 소성이 가능하도록 충분한 열처리가 가능하다. 이러한 IPWL에 대한 원리는 주로 타겟이 되는 샘플에 빛이 흡수되고, 반대로 기판에는 흡수되는 빛이 적어 오로지 타겟에게만 소성되는 원리이다. 그림 1은 아무 것도 코팅하지 않은 ITO-PEN 기판과 TiO_2 를 코팅한 기판을 비교한 투과도인데, UV-vis의 빛이 ITO-PEN을 잘 투과시킨다는 것을 알 수 있다. 반면 흡수 스펙트럼에서도 TiO_2 를 코팅한 것이 아무것도 코팅하지 않은 것보다 훨씬 큰 흡수를 볼 수 있었다. 이러한 투과 및 흡수를 비교하였을 때에, 기판에는 큰 영향을 미치지 않고 타겟이 되는 TiO_2 에 광적 소결을 미칠 것이라는 부분을 알 수 있었다.

그림 2의 (a)와 표 1을 보게 되면, TiO_2 광전극에 IPWL 처리 횟수에 따른 염료감응태양전지의 전류밀도-전압($J-V$)을 알 수 있다. IPWL 공정을 반복적으로 시행하였을 때에, 3번 반복에서 가장 높은 효율을 갖는 염료감응 태양전지를 제작할 수 있었는데, 이 때의 효율은 4.52%로 아무 처리도 하지 않았을 때의 2.10%보다 큰 효율 향상을 볼 수 있었다. 이 때의 전체 공정 시간은 단지 5 초에 불과하다. 이 때의 효율 상승은 전체적으로 전류밀도가 크게 상승한 효과이다. 그림 2의 (b)에서는 IPWL처리 전과 앞서 가장 높은 효율을 가지는 IPWL을 3번 반복했을 때의 IPCE(입사 광자 전류 전환 효율; incident photon-to-current conversion efficiencies)를 비교한 그래프이다. TiO_2 입자들 간의 연결성이 증가되어 광수집 효율이 상승되었다고 생각할 수 있다.

이러한 TiO_2 입자들 간의 연결의 상승으로 증가한 효율적인 측면에 대한 정확한 계면저항을 살펴보기 위해 그림 3에서 EIS(electrochemical impedance spectroscopy; 전기 화학적 임피던스 분광학)를 살펴보았다. 이러한 임피던스는 전체적인 저항 뿐 아니라 TiO_2 간의 계면저항을 살펴볼 수 있다. 그림 3의 (a)를 살펴보면 전체적인 저항이 줄어들었는데, 그 이유에 대해서는 (b)를 통해 정확하게 알 수 있다. 그림 3의 (b)를 보면, TiO_2 와 전해질의 관계를 보여주는 전하재결합 저항 (charge-transfer resistance; R_r) 부분을 살펴보았을 때에 거의 비슷한 저항 값을 가지고 있다는 것을 알 수 있다. 반면, TiO_2 내 전자 전달 저항 (electron transport resistance; R_t) 부분을 살펴보았을 때에 저항 값이 IPWL을 처리하였을 때에 6.9에서 3.2 Ω 로 확실히 줄어든 것을 알 수 있다.

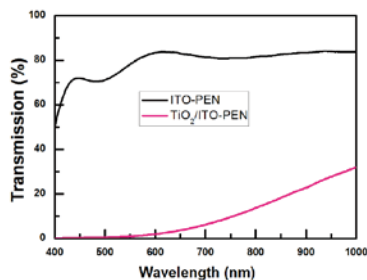


그림 1. ITO-PEN과 ITO-PEN위에 TiO_2 를 코팅한 UV-vis 투과 스펙트럼

II. 연구성과

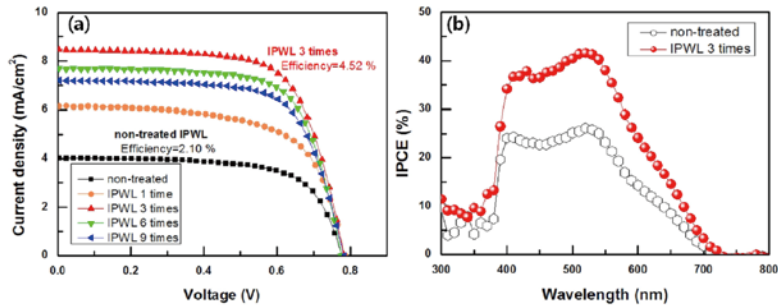


그림 2. (a) IPWL 소성 횟수에 따른 효율 차이를 AM 1.5G의 빛에서 측정된 전류밀도-전압(J-V), (b) IPWL을 사용하지 않았을 때와 3번 연속 사용하여 소성했을 때의 IPCE(입사 광자 전류 전환 효율; incident photon-to-current conversion efficiencies)의 비교

표 1. IPWL 소성 횟수에 따른 효율 차이에 대한 비교표

Sintering condition	Jsc [mA/cm ²]	V _{oc} [V]	Fill factor [%]	Efficiency [%]
non-treated	4.02	0.778	67	2.10
IPWL 1 time	6.15	0.785	64	3.09
IPWL 3 time	8.48	0.783	68	4.52
IPWL 6 time	7.70	0.776	67	4.00
IPWL 9 time	7.20	0.783	69	3.89

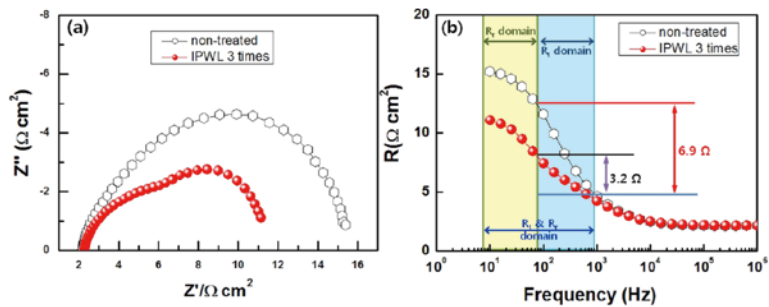


그림 3. (a) AM 1.5를 조사하였을 때(개방 전압 상태)의 임피던스 스펙트럼
(b) 임피던스 진동수에 따른 저항변화

본 연구를 통하여 IPWL 소성법을 적용하여 TiO₂ 광전극의 입자간의 연결성을 향상시켜 광전류밀도 110%, 효율 115%가 향상된 플라스틱 염료감응 태양전지를 구현할 수 있었다. 이러한 결과는 수 초 내에 유연기판에서도 적용 가능하여 R2R 공정에 접목 시킬 수 있으므로 염료감응 태양전지의 고속공정 및 상용화에 큰 도움이 될 것으로 예측된다.

Biosynthesis of pinene (potential jet-fuel) from glucose using metabolically-engineered *Corynebacterium glutamicum**

우 한 민 | 한국과학기술연구원 청정에너지연구센터 선임연구원 / 고려대학교 그린스쿨대학원 교수

1. Introduction and Experimental section

대사공학은 세포의 대사경로를 수정함으로써 원하는 물질을 더욱 많이 생산하는 것을 목표로 연구되어 왔다. 합성생물학은 또한 특정 효소를 과발현하거나 그 발현을 조절가능하도록 대사공학에 적용되어 왔다. 미생물의 대사경로를 바꾸는 과정에는 관련된 유전자들을 플라스미드를 통해 도입하거나 유전체에 직접 유전자를 도입하는 방법이 필요한데 최근 진보된 클로닝 기법으로는 SLIC(Sequence and ligase-independent cloning), Gibson DNA assembly, CPEC(circular polymerase extenseion cloning)와 같은 방법들이 개발되었다.

*Corynebacterium glutamicum*은 그람양성균으로 L-glutamate와 L-lysine 같은 아미노산의 산업적인 생산에 이용되고 있으며 미생물 생체공장으로서 succinate, isobutanol, cadaverine, ethanol 같은 물질생산에도 성공한 바 있다. 최근 recombineering, pTGR vector와 같은 *C.glutamicum*을 위한 합성생물학적 도구들이 개발되었으나 이들 시스템은 여러 개의 유전자들을 발현하는데 최적화 되어있지 않다. 따라서 본 연구에서는 쉽게 여러 개의 유전자를 클로닝하고 발현시킬 수 있고 *C.glutamicum*에 최적화된 BioBrick vector인 CoryneBrick vector를 제작하였다¹.

Pinene은 monoterpene에 속하며 미생물로부터 산업적으로 생산된다. α -Pinene은 *E.coli*에서 MVA 대사경로를 통해 생산된 바 있으며 미생물에 대한 Pinene의 독성을 제거하기 위해 용매를 이용하여 배양을 시도한 예가 있다. 최근에는 PS와 GPPS 유전자를 같이 발현시켜 pinene의 생산량을 늘린 바 있다.

본 연구에서는 먼저 Dodecane, α , β -pinene의 *Corynebacterium glutamicum*에 대한 독성을 테스트 하였다. 다음으로 Biobrick vector를 제작하여 Pinene 물질을 생산하는데 필요한 유전자들을 클로닝 하였으며 이를 *Corynebacterium glutamicum*에 형질전환 시켰다. Pinene 생산을 위해 사용된 배지는 CGXII이고 프로모터의 induction을 위해 1mM IPTG가 사용되었다. 20% dodecane은 배양 후 4시간 뒤에 첨가되었고 샘플은 배양 시작후 24시간, 48시간, 72시간 간격으로 채취하였으며 GC-MS를 이용하여 생산물을 분석하였다.

* Han Min Woo (corresponding author) et al., "Biosynthesis of pinene from glucose using metabolically-engineered *Corynebacterium glutamicum*", *Biotechnology Letters*, 2014, DOI: 10.1007/s10529-014-1578-2

¹ Han Min Woo (corresponding author) et al., "Synthetic biology platform of CoryneBrick vectors for gene expression in *Corynebacterium glutamicum* and its application to xylose utilization", *Applied Microbiology and Biotechnology*, Volume 98, Number 13, July 2014, Pages 5991-6002.

II. 연구성과

2. Results and discussion

그림 1에서 Corynebrick 벡터의 제작과정을 보면, 먼저 그림 1(a)는 *E.coli* origin이 있는 pBbE1c-RFP vector에 *Corynebacterium* origin pBL1을 삽입하는 과정으로 CPEC(circular polymerase extenseion cloning)가 사용되었다. 그림 1(b)는 *AatII-EcoRI* 제한효소와 Ligase를 이용하여 프로모터와 리프레서를 교체한 결과 3가지 벡터를 제작한 과정이다. 그림 2(c)는 세가지 프로모터-리프레서 조합으로 완성된 세가지 벡터의 모식도이고 그림 1(d)는 Biobrick 벡터를 이용하여 여러가지 유전자를 연달아 삽입하는 과정을 나타낸 것이다.

그림 2의 그래프는 완성된 세가지 Corynebrick 벡터(위로부터 차례로 pBbEB1c-rfp, pBbEB2c-rfp, pBbEB5c)가 *C.glutamicum*에 적합한지 알아보기 위해 미생물의 성장에 따른 rfp 유전자의 발현 측정값을 그래프로 나타내었다. pBbEB1c-rfp와 pBbEB5c-rfp는 1 mM IPTG로 induction하였고 pBbEB2c-rfp는 0.1 μ M aTc로 induction하였다. 그림 2(a),(c)에서 배양 시작 후 48시간 지났을 때 rfp 발현값은 induction을 하지 않았을 때보다 각각 5배, 2.5배 높았고 그림 2(b)를 보면 pBbEB2c-rfp의 rfp 발현값은 역시 배양 시작 후 48시간 지났을 때 induction을 하지 않았을 때보다 2.5배 높았다. 성장률은 세가지 Corynebrick 벡터 모두 induction 여부와 관계없이 거의 차이가 없었다.

그림 3(a)는 본 연구에서 새로 만든 mutant *C.glutamicum*의 대사경로 모식도로서 pyruvate로부터 DXP, IPP, GPP를 거쳐 pinene 순으로 만들어지는 과정을 나타내고 여기서 핵심 유전자는 Dxs와 idi, GPPS, PS이다. 그림 3(b)를 보면 핵심 유전자들을 각각 나누어 조합을 이루어 플라스미드에 클로닝하였는데 dxs와 idi 유전자는 trc 프로모터, 그리고 PS와 GPPS는 tac 프로모터의 조절을 받게끔 설계하였다.

그림 4(a)의 그래프에 의하면 dodecane의 농도가 20%(v/v)까지 높아져도 *C.glutamicum* 균주의 성장에 영향을 미치지 않는다는 것을 알 수 있다. 그리고 그림4(b)를 보면 *C.glutamicum* wild type은 pinene 0.25%, 0.5%, 1.0% 농도에 모두 영향을 받지만 20% dodecane이 함께 첨가되면 성장에 영향을 받지 않음을 알 수 있다.

그림 5의 GC-MS 결과를 보면 새롭게 만들어진 *C.glutamicum* 균주에서 α -pinene과 β -pinene이 모두 생산되었다.

3. Conclusions

본 연구를 통하여 *Corynebacterium glutamicum*에서도 호환가능한 Corynebrick vector를 제작하였고 rfp 유전자의 발현정도를 테스트하여 *C.glutamicum*에서 적용가능한지 여부를 확인하였다. Pinene 물질은 *C.glutamicum* wildtype의 성장에 영향을 미치지 않지만 dodecane의 존재하에서는 미생물의 성장에 영향을 미치지 않았고 20% dodecane의 첨가조건에서 *C.glutamicum*이 pinene 1% 농도에서도 잘 자라는 것을 확인하였다. 본 연구는 조작된 *C.glutamicum*에서 in situ extraction 기법으로 pinene을 생산한 첫번째 사례이며 다른 종류의 monoterpene인 sesquiterpene이나 diterpene 물질 또한 *C.glutamicum*에서 생산할 수 있는 좋은 예가 될 것이다.

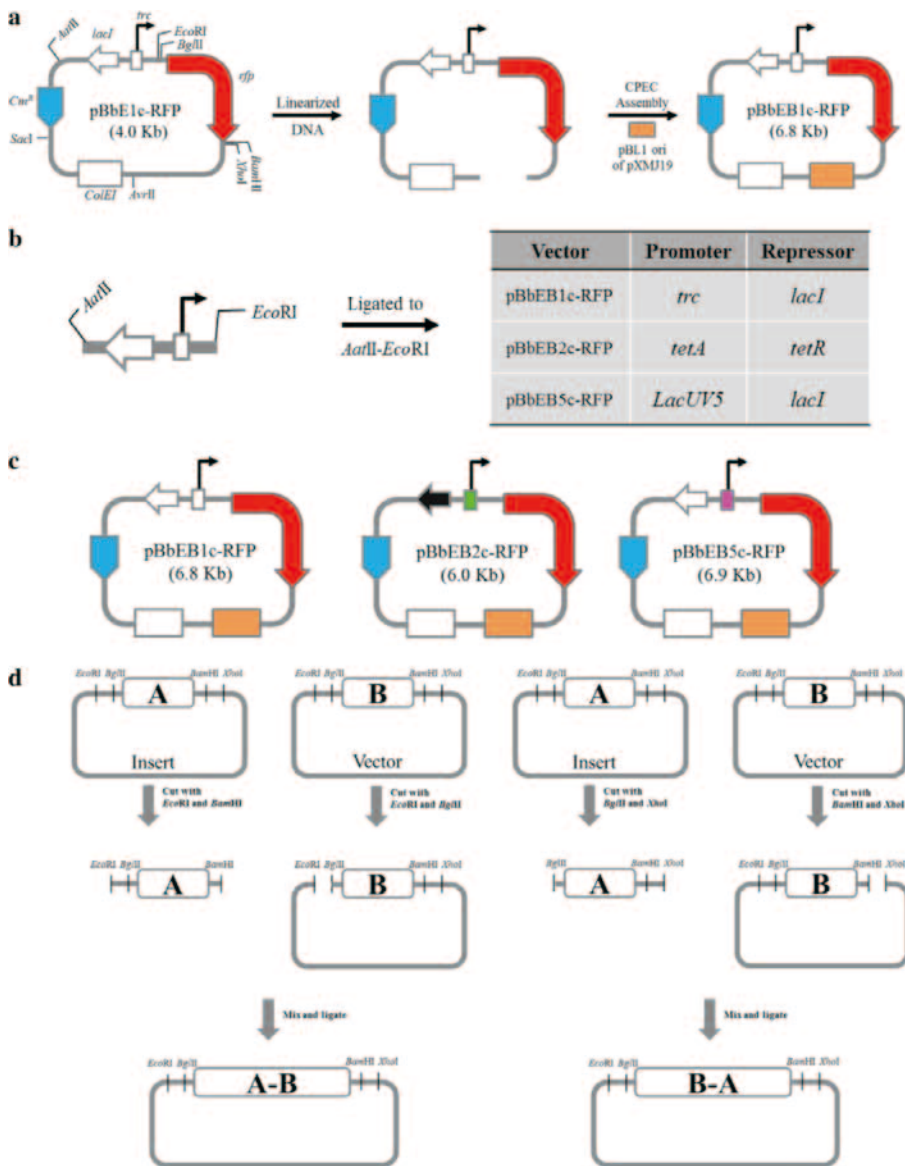


그림 1. CoryneBrick vector 제작과정 :

- (a): CPEC cloning을 이용하여 pBbE1c-RFP vector에 *C.glutamicum* origin을 삽입하는 과정
- (b): AatII-EcoRI 제한효소 자리를 이용하여 프로모터와 리프레서를 교체하는 과정
- (c): (a),(b) 과정을 통해 만들어진 다양한 CoryneBrick vector들의 모식도
- (d): CoryneBrick vector를 이용하여 다양한 유전자들을 자유자재로 클로닝하는 과정

II. 연구성과

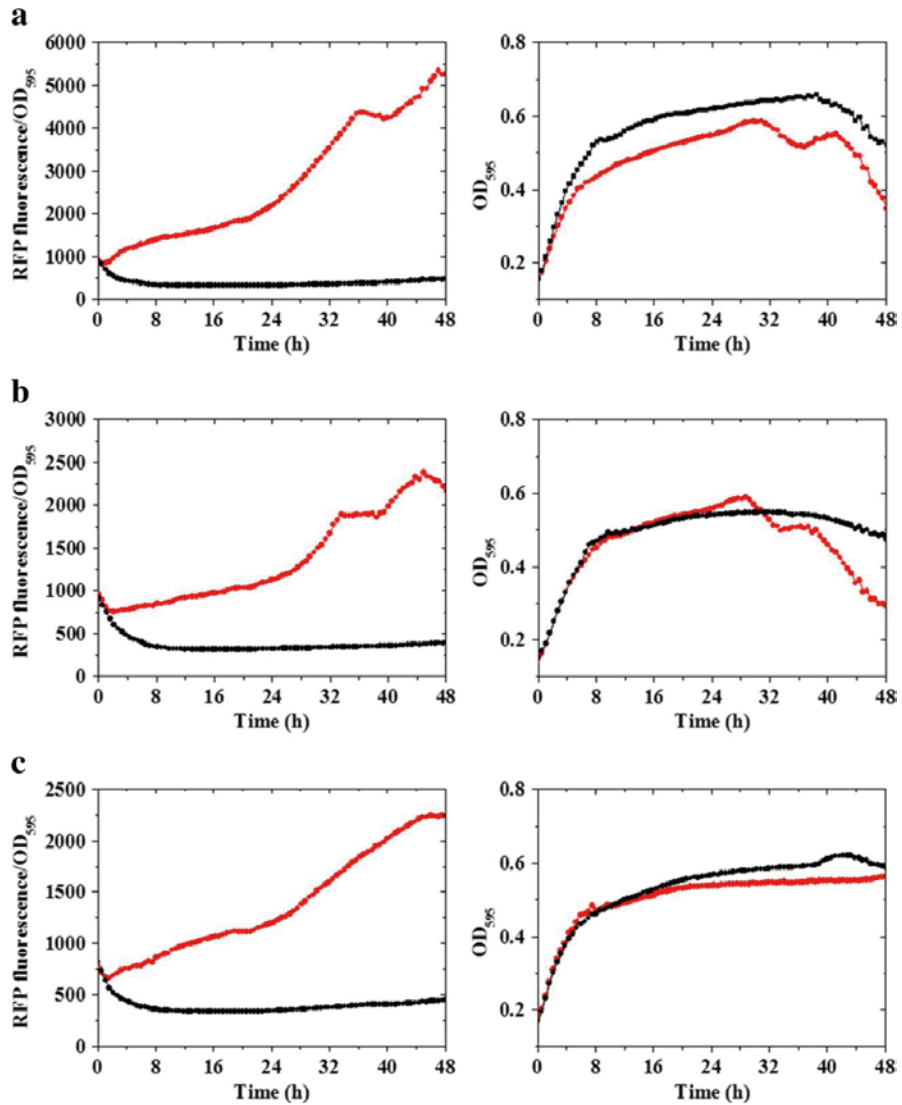


그림 2. CoryneBrick vector를 이용한 시간에 따른 *rfp* 발현 측정
 (a) pBbEB1c-RFP가 들어있는 *C. glutamicum*의 *rfp* expression 값과 성장곡선
 (Red: 1mM IPTG로 induction한 mutant *C. glutamicum*, Black: induction 하지 않은 mutant *C. glutamicum*)
 (b) pBbEB2c-RFP가 들어있는 *C. glutamicum*의 *rfp* expression 값과 성장곡선
 (Red: 100 nM aTc로 induction한 mutant *C. glutamicum*, Black: induction 하지 않은 mutant *C. glutamicum*)
 (c) pBbEB5c-RFP가 들어있는 *C. glutamicum*의 *rfp* expression 값과 성장곡선
 (Red: 1mM IPTG로 induction한 mutant *C. glutamicum*, Black: induction 하지 않은 mutant *C. glutamicum*)

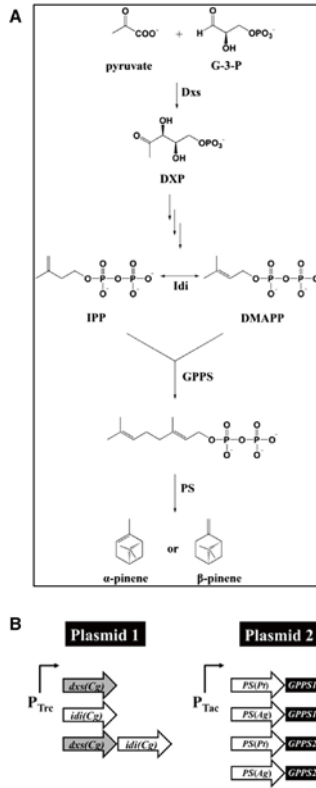


그림 3. *Corynebacterium glutamicum*에서의 Pinene 생산전략
 (a): Pinene 생산을 위해 새롭게 만든 대사경로
 (b): 두 개의 플라스미드에서 발현되는 dxs, idi, PS, GPPS의 조합 모식도

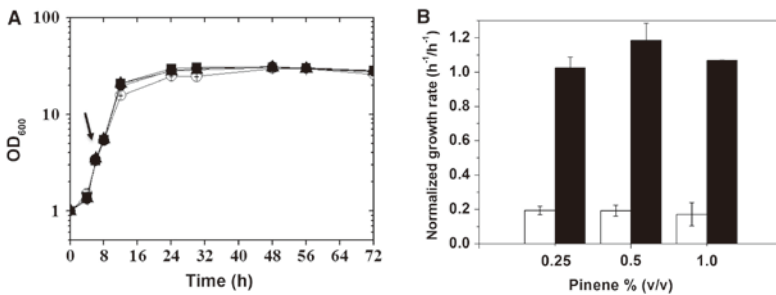


그림 4. Dodecane과 pinene의 영향을 성장곡선과 성장율로 알아본 결과:
 (a) Dodecane 농도에 따른 *C. glutamicum* wild type 성장곡선 (White circle: 0%(v/v), filled circle: 5%(v/v), filled triangle: 10%(v/v), filled square: 20%(v/v), 화살표는 Dodecane 첨가시점)
 (b) *C. glutamicum* wild type에 대한 Pinene 농도별 성장률 그래프 (Pinene 농도는 0.25%, 0.5%, 1.0%, 하얀색은 dodecane 첨가없이 pinene만 첨가후 배양했을때, 검은색은 dodecane 25% 첨가 후 pinene 첨가시 성장률을 의미)

II. 연구성과

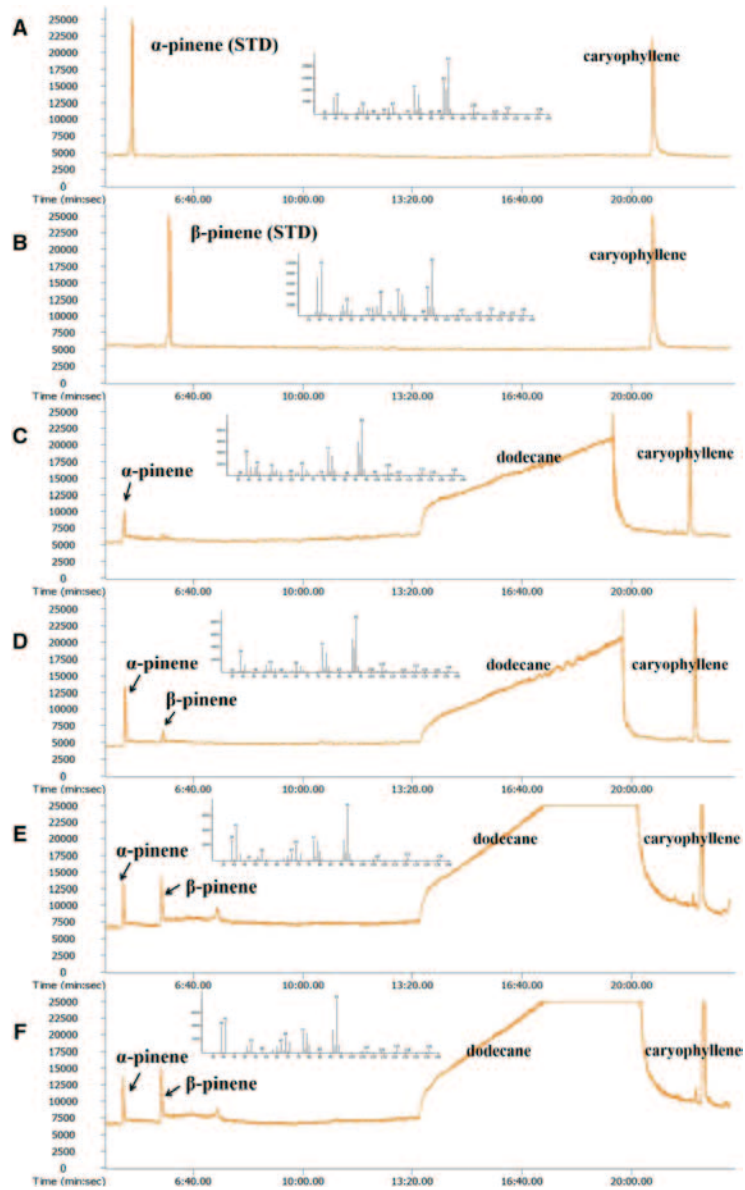


그림 5. 새로 제작한 *C. glutamicum* *Cg-pD1/pPPG1*과 *Cg-pD1/pPPG2*로부터 채취한 dodecane층의 GC-MS 분석결과 (a) Standard α -pinene, (b) Standard β -pinene, (c) *Cg-pD1/pPPG1* 으로부터 채취한 샘플 분석결과, (d) *Cg-pD1/pPPG2* 의 샘플 분석결과, (e) *Cg-pD1/pPPG1* 으로부터 채취한 샘플 분석결과, (f) *Cg-pD1/pPPG2* 으로부터 채취한 샘플 분석결과. Caryophyllene이 internal standard로 이용됨

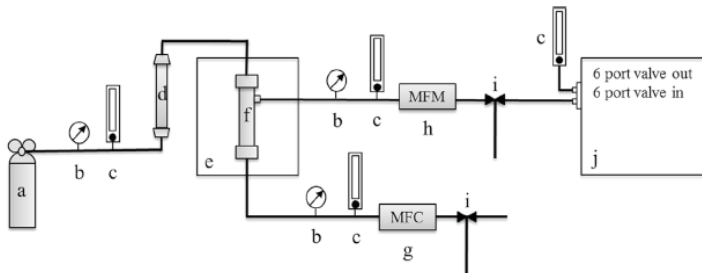
Separation of sulfur hexafluoride (SF₆) from ternary gas mixtures using commercial polysulfone (PSf) hollow fiber membranes*

이 상 협 | 한국과학기술연구원 물자원순환연구단 책임연구원 / 고려대학교 그린스쿨대학원 교수

1. Introduction and Experimental section

중전기, 반도체 등의 산업에서 절연체 및 식각가스로 사용되는 육불화황(SF₆)은 6대 온실가스 중 하나인 배출규제 대상 기체이다. 막 기반의 기체 분리기법은 기존의 온실가스 감축기술인 열분해 기법을 보완 및 대체할 수 있는 기술이다. 기존의 많은 연구에서 분리막을 이용한 온실가스의 분리의 가능성 및 효율성이 확인되었으며, 여러가지 소재의 분리막을 이용한 연구가 진행되어 오고 있다. 몇몇의 연구에서는 고분자 중공사 분리막을 이용한 N₂/SF₆ 이성분기체의 분리에 대하여 보고한 바 있으며, SF₆의 분리, 농축 회수에 미치는 온도, 압력 조건의 영향에 관하여 보고한 바가 있다. 그러나 배출가스내의 SF₆ 회수 감축기술을 개발하기에는 복잡한 조성의 배출 기체 분리과정에 관한 연구가 아직 부족한 실정이다. 이에 따라 본 연구에서는 다양한 상용화 고분자(PC, PI, PSf) 분리막을 통한 단일기체 및 혼합기체 투과실험을 다양한 조건에서 수행하여 실제 반도체 배출가스 내 SF₆ 회수 및 분리 공정을 예측하기 위한 자료를 얻을 수 있었다.

본 실험을 위하여 상용화 고분자(PC, PI, PSf) 분리막 모듈을 제작하였으며, 다음 그림의 기체 투과장치를 이용한 순수기체와 혼합기체의 투과 실험을 수행하였다. 여기서 (a) 가스 실린더, (b) 디지털 압력계, (c) 부피 유속계, (d) 수분트랩, (e) 오븐, (f) 분리막 모듈, (g) 유량조절기, (h) 유량측정장치 (i) three way valve (j) GC-TCD 이다.



* Sanghyup Lee (corresponding author) et al., *Journal of Membrane Science*, Volume 452, February 2014, Pages 311–318.

II. 연구성과

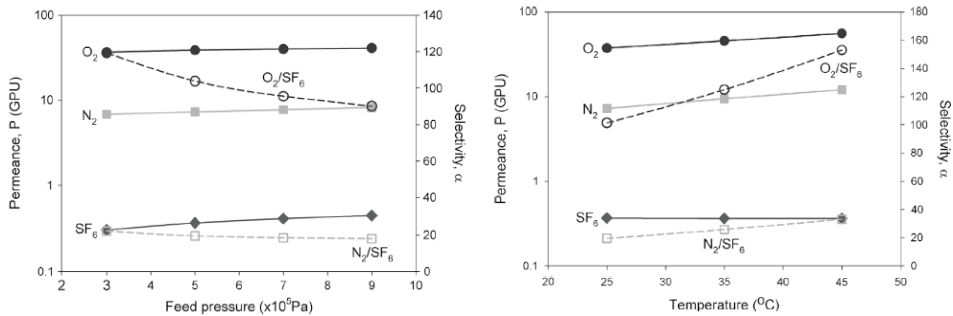
2. Results and discussion

상용화된 고분자(PC, PI, PSf) 중공사 분리막의 N_2 와 SF_6 단일기체투과 시험을 수행하여 상용화 중공사 분리막의 N_2 투과도와 N_2/SF_6 선택도를 다음의 표와 같이 구하였다. 이를 기반으로 투과도와 선택도가 모두 우수한 PSf 재질의 분리막을 SF_6 분리공정에 적합한 분리막으로서 선정하여 이후 연구에 활용하였다.

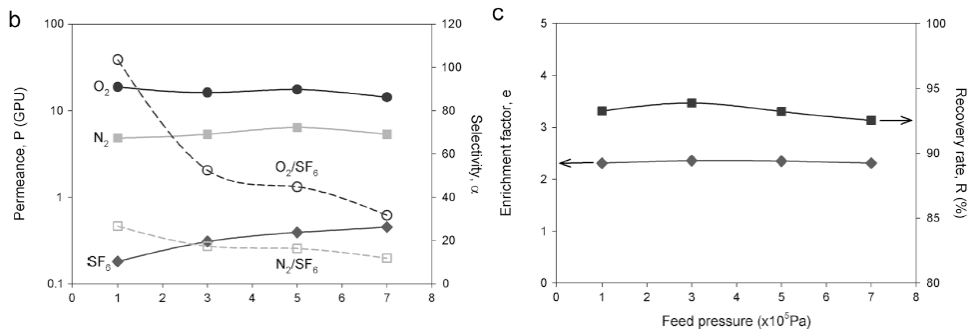
표 1. 고분자 분리막의 N_2 투과도 및 N_2/SF_6 선택도

	PSf	PC	PI
N_2 permeance (GPU)	4.83	5.68	0.97
N_2/SF_6 selectivity	23.6	2.4	43.8

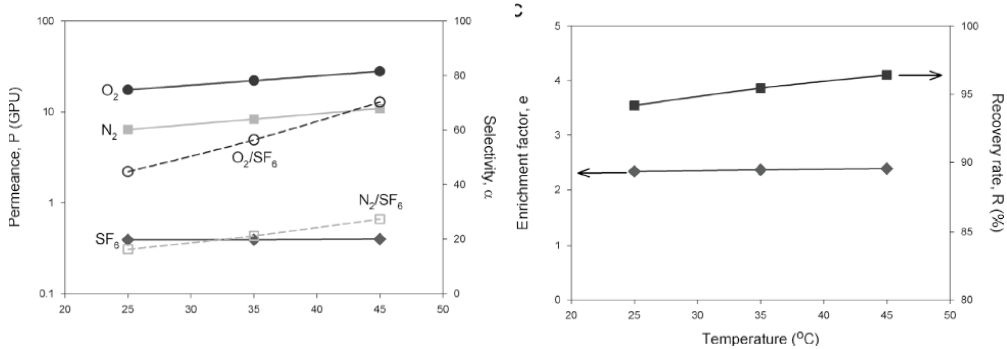
선정된 PSf 재질의 분리막을 이용하여 단일기체(N_2 , O_2 , SF_6) 투과에 미치는 공정조건(온도, 압력, Stage-cut)의 영향을 실험한 결과, 공급압력과 온도의 증가에 따라 기체별 투과도 증가도의 차이로 인해 N_2/SF_6 와 O_2/SF_6 의 선택도가 증가하였다.



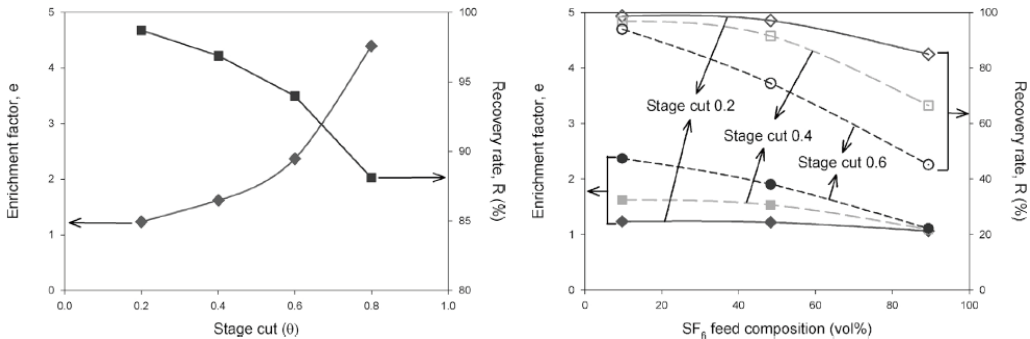
다양한 SF_6 조성(10, 50, 90%)의 삼성분 기체($N_2/O_2/SF_6$)의 분리에 미치는 공정조건(공급 압력, 온도, 조성)의 영향을 실험하였다. 공급 압력의 증가에 따라 혼합기체내 각 기체의 투과도 및 선택도에 변화가 발생되었으나, 농축도와 회수율은 큰 영향을 받지 않는것으로 확인되었다.



온도의 증가는 선택도의 증가를 유발하여 회수율을 증가시키는 결과를 발생시켰다.



공급유량에 대한 투과유량의 비로 정의 되는 Stage cut은 농축도를 결정하는 가장 중요한 공정요인으로서 Stage cut 증가에 따라 농축도의 급격한 증가와 함께, 회수율의 감소가 발생되었다. 농축도와 회수율은 N₂, O₂와 함께 투과되는 SF₆의 투과량에 지배되며, SF₆의 투과량은 SF₆의 SF₆ 농도 증가에 따른 분압증가에 직접적으로 영향을 받아, 고농도의 SF₆ 투과에서 낮은 회수율을 보였다.



3. Conclusions

상용화된 세 가지 재질의 증공사 분리막의 N₂ 및 SF₆ 분리성능을 비교해 본 결과, PSf 재질의 증공사 분리막이 배출가스내 SF₆ 저감을 위한 용도로 가장 적합하였다. 이 분리막을 이용한 삼성분 혼합기체의 투과는 온도, 압력, stage cut 의 공정요인에 영향을 받아 회수율과 농축도에 영향을 주는 것으로 확인되었다. 이들 중 stage cut은 가장 지배적인 영향을 미치는 공정 인자로서 stage cut 증가에 따라 농축도의 급격한 증가가 발생되며, 이는 회수율의 저감을 동반하기 때문에 공정의 목적이 SF₆ 농축인지 혹은 배출저감인지에 따라 공정조건 최적화가 필요하다. 연속적인 분리막공정을 통해 SF₆의 고농도 농축이 가능하나, 회수효율은 크게 감소하게 될 것으로 예상된다.

Photocatalytic performance of V_2O_5/TiO_2 prepared by Chemical Vapor Condensation and impregnation method under visible-light*

정 중 수 | 한국과학기술연구원 환경복지연구단 책임연구원 / 고려대학교 그린스쿨대학원 교수

1. Introduction

환경유해물질을 제거하기 위한 기술로서 잘 알려진 광촉매 물질인 TiO_2 를 이용한 광촉매 기술개발이 활발하게 이루어지고 있다. TiO_2 광촉매는 에너지의 형태로 빛을 받으면 물질 표면에서 전자(electron)와 정공(hole)이 분리가 되면서 물질 표면 혹은 주변에 접하고 있는 수산화기(OH)와 산소(O_2)가 반응하여 형성되는, 들뜬(excited) 상태의 수산화기(Hydroxyl radical)와 산소종(superoxide anions)이 강력한 산화력을 가지고 주위의 환경유해물질을 분해한다. 하지만 상대적으로 넓은 밴드갭(band gap energy: 약 2.9~3.2eV)를 가지고 있는 TiO_2 광촉매를 이용하면 자외선 영역의 특정한 파장(UV 385nm 이하) 하에서만 광촉매 반응이 일어난다는 점이 상용화에 걸림돌이 되어, 많은 연구자들이 이러한 제한을 극복하려는 연구를 활발하게 수행하고 있다.

본 연구실에서는 지속적으로 연구를 수행하고 있는 기상합성법(Chemical Vapor Condensation)으로 합성한 고비표면적 TiO_2 입자에 가시광 영역으로 활성을 좋게 하는 것으로 알려진 V_2O_5 를 함침(impregnation)하는 방법으로 가시광 광촉매를 제조하여 가시광 하에서 광촉매 활성을 평가한 결과 상용촉매 중 효율이 우수한 TiO_2 (P25, Daegussa)에 비해서도 2배 가량 높은 분해 효율을 얻었으며, 이 결과를 보고한 바 있다(Chin et al., Materials Letter 75, 57-60, 2012).

본 연구실에서는 Chin et al.(2012)의 연구 결과에 대해, 광 촉매의 표면반응 메커니즘을 밝혀 해당 메커니즘이 기상합성법으로 제조한 광촉매 활성에 어떻게 영향을 주는지를 연구하였으며(Cha et al., Powder Technology 258, 352-357, 2014), 본고에서는 그 결과를 요약 정리하여 소개한다.

2. Experimental section

본 연구에서는 기상합성한 TiO_2 를 지지체로, V_2O_5 를 함침방법을 이용(전구체 NH_4VO_3 사용)하여 광 촉매를 제조하고, V_2O_5 의 담지(loading)량 증가에 따른 광 촉매 표면의 화학적 조성과 물리적인 특성변화를 확인하기

* Jongsoo Jung (corresponding author) et al., *Powder Technology*, Volume 258, May 2014, Pages 352-357.

위하여 V_2O_5 의 담지(loading)량을 2, 5, 7wt%로 변경하였다. 광 촉매 활성평가를 위한 반응 대상물질로 많이 사용되는 유기염료물질인 메틸렌블루(Methylene Blue)를 10ppm 이하 수용액을 만들어, 수용액 중 메틸렌블루의 분해율을 측정하여 광촉매 활성평가를 수행하였다. 또한 제조된 광촉매 입자의 표면 특성 등을 UV-visible spectroscopy, X-ray diffraction (XRD), Brunauer-Emmett-Teller (BET) measurements, high-resolution transmission electron microscopy (HR-TEM), X-ray photoelectron spectroscopy(XPS), photoluminescence (PL) spectroscopy 등의 분석방법을 사용하여 분석하였다.

3. Results and discussion

3.1. Texture properties

그림 1은 광촉매 입자의 XRD 결과를 나타낸다. 기상합성법으로 제조한 촉매들($V_2O_5/CVC-TiO_2$)는 Anatase 결정상이 나타나는 반면, 상용 TiO_2 (P25)를 이용하여 제조한 촉매들($V_2O_5/P25-TiO_2$)는 Rutile 결정상이 함께 나타나고, Anatase 결정상의 피크 강도(peak intensity)가 기상합성법으로 제조한 촉매들에 비해서 상대적으로 높다. 한편 기상합성 제조한 촉매와 상용 TiO_2 를 이용하여 제조한 촉매들 모두에서 공히 V_2O_5 의 peak가 관찰되지 않는데, 이것은 담지된 V_2O_5 가 결정상을 가지지 않는 상태로 분포하고 있음을 의미하는 것으로 보인다. 본 XRD 분석결과에서 기상합성법으로 제조한 TiO_2 의 결정상은 100% anatase이며, 상대적으로 결정성이 적은 무정형상태임을 확인할 수 있다. 이러한 결정상태는 반응시간이 매우 짧은 기상합성 공정에서는 TiO_2 입자의 성장이 크게 이루어지지 않아 대부분 작은 TiO_2 입자들로 구성되어 있으며, 큰 비표면적을 가지는 작은 입자들은 촉매반응의 반응면적을 상대적으로 많이 제공하여 반응 효율이 높은 것으로 생각된다.

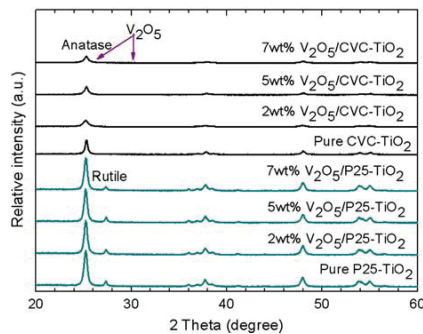


그림 1. XRD patterns of samples.

한편, BET 측정결과 얻을 수 있는 비표면적은 기상합성 TiO_2 와 $V_2O_5/CVC-TiO_2$ 촉매들은 각각 130, 250 m^2/g 정도의 값을 나타낸다(P25- TiO_2 는 50 m^2/g 정도). 이것은 기상합성 $CVC-TiO_2$ 는 비표면적이 넓고 작은 입자들로 구성되어 있음을 뒷받침하며, XRD 분석결과와도 잘 일치한다.

II. 연구성과

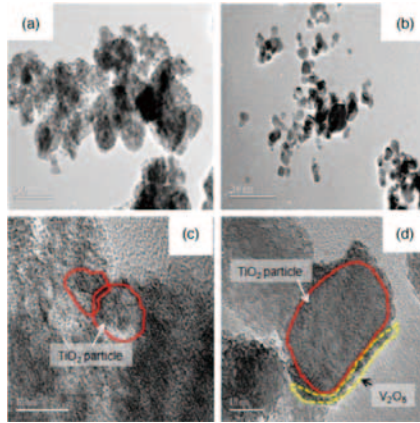


그림 2. HR-TEM images of V_2O_5 loaded on (a, c) CVC- TiO_2 and (b, d) P25- TiO_2

그림 2는 합성된 촉매 입자들의 HR-TEM 이미지를 200nm와 10nm 배율로 나타낸 것이다. 상용 TiO_2 를 이용하여 제조한 촉매(그림 2 b, d)의 이미지에서는 기본입자의 외각 윤곽이 뚜렷이 나타나며, 기본입자의 크기도 약 20~30 nm에 이르는 반면, 기상합성 CVC- TiO_2 (그림 2 a, c)의 이미지에서는 촉매 기본입자(primary particle)의 윤곽이 뚜렷하지 않고 평균 5~10nm의 크기로 서로 얽혀 있는 형태이다. 앞에서 제시된 XRD와 BET 결과와 함께 본 HR-TEM 이미지는 광 촉매 입자의 표면물리적 특성들은 시각적으로 직접 보여주는 것으로, 기상합성법으로 제조한 광 촉매가 광촉매 활성이 우수한 것은 일차적으로 상대적으로 넓은 활성면적을 제공하기 때문이라고 판단된다.

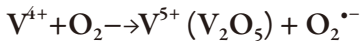
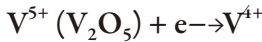
3.2. Chemical component on material surface

그림 3a는 XPS Ti_{2p} 분석을 통해서 파악한 입자 표면의 Ti 이온들의 조성분포를 보여주고 있다. 본 스펙트럼에서는 Ti^{3+} 와 Ti^{4+} 만 나타나며, 각 이온의 결합에너지의 위치(Binding energy, eV)가 456.5eV와 458.5eV 이상에서 확인되었다. 이 결과로부터, 광 촉매 입자의 V_2O_5 담지량이 증가함에 따라서 Ti^{3+} 이온의 peak area가 감소하면서 Ti^{4+} 이온의 피크 면적(peak area)이 증가하는 경향이 공통적으로 확인된다. 특히, 기상합성 광촉매 입자의 경우 Ti^{3+} 의 peak area가 상대적으로 더 높게 나타나고 있음을 확인할 수 있다.

TiO_2 표면에 V_2O_5 를 담지(loading)하면 TiO_2 표면에 존재하고 있는 자유전자(electron)들이 담지되는 금속인 V_2O_5 의 싱크(sink)로 이동한다. 특히, 기상합성법으로 제조한 광촉매 입자의 경우 Ti^{3+} 의 peak area가 상대적으로 높고, 이동가능한 자유전자가 많음을 의미한다. Liu et al. (J. Appl. Phys. 111, 2012)에 의해 Ti^{3+} 에서 Ti^{4+} 로 전환하면서 자유전자가 발생한다고 보고된 바 있다. 이러한 현상은 기상합성 광촉매 입자 중의 TiO_2 와 담지된 V_2O_5 사이에 보다 강한 상호작용이 일어남을 유추할 수 있고, V_2O_5 표면의 Vanadium(V) 이온의 상태가 보다 전자를 많이 가지고 있는 산화이온 상태로 존재한다고 판단할 수 있다.

그림 3b는 V_2O_5 표면의 vanadium (V) 이온의 조성을 보여주고 있다. 기상합성 TiO_2 가시광 촉매 및 상용 TiO_2 가시광 촉매입자들 모두 V_2O_5 의 담지량 증가에 따라 V 이온들의 peak area가 전체적으로 증가하는 것을 확인할 수 있다. 하지만 앞의 Ti_{2p} 분석 결과에서와 유사하게, 기상합성법을 이용하여 제조한 가시광 촉매입자의 경우 전자를 상대적으로 많이 가지고 있는 산화이온 상태인 V^{4+} 이온의 peak area가 상대적으로 높으며, 기상합성 촉매입자와 상용 TiO_2 로 제조한 촉매입자의 V^{4+} 와 V^{5+} 이온의 함량비율이 각각 48-49%/50-51%와 13-35%/61-86%로 상당히 큰 차이를 보인다.

Dong et al.(Int. J. Photoenergy, 10, 2012)의 연구결과에 의하면 V_2O_5 광촉매 표면의 V^{4+} 와 V^{5+} 이온들은 각각 다른 역할을 하며, 특히 V^{4+} 는 표적으로 하는 오염물질을 분해하는데 역할을 하는 활성 산소종(superoxide anions, $O_2^{\cdot-}$)을 만드는데 다음 반응식과 같이 직접적으로 기여한다.



따라서, 기상합성 TiO_2 로 제조한 V_2O_5/TiO_2 촉매표면에 보다 많은 V^{4+} 이온을 가지고 있어서 활성 산소종(superoxide anions, $O_2^{\cdot-}$)을 상대적으로 많이 생성시킴으로써 광촉매 반응을 활발하게 한다는 것을 의미한다.

그림 3c는 XPS O_{1s} 스펙트럼을 나타낸다. 본 분석에서 주목할 부분은 약 532eV의 binding energy에서 나타나는 수산화기(hydroxyl, OH)이다. 광촉매 입자의 표면에 존재하는 수산화기는 촉매 표면의 정공(hole)과 반응하여 광촉매 반응에 강한 반응력을 가지는 들뜬 상태의 수산화기(OH radical, $OH\cdot$)를 만든다. 기상합성 V_2O_5/TiO_2 광촉매 입자는 상대적으로 높은 수산화기 peak area를 가지고 있는 것을 확인할 수 있다. 이러한 표면특성은 들뜬 상태의 수산화기(OH radical)를 많이 형성시켜 광촉매 효율이 높아지게 함을 나타낸다. 표면의 수산화기가 광촉매 입자의 정공(hole)과 반응하여 OH radical을 형성시키는 메커니즘은 다음과 같다 (Dong et al., Int. J. Photoenergy, 10, 2012).

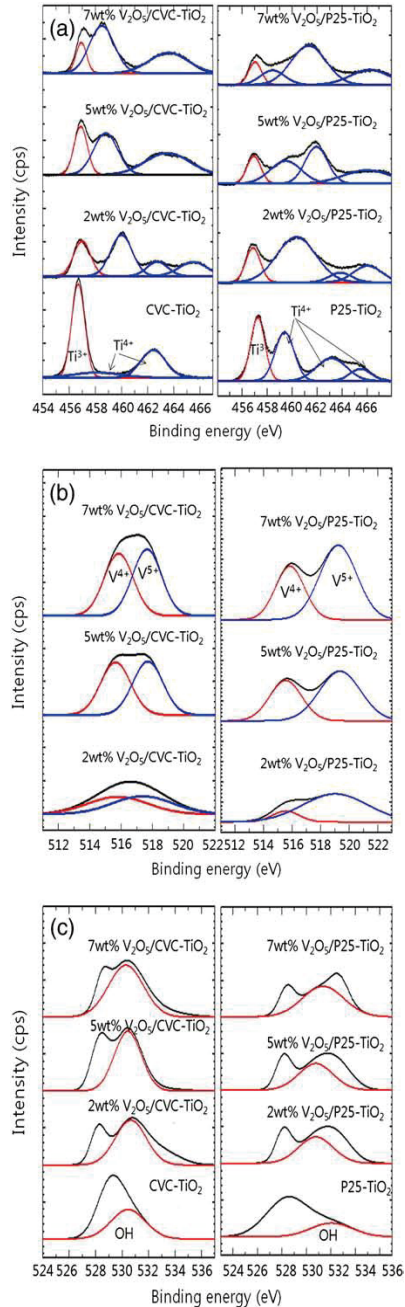
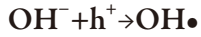


그림 3. XPS spectra of samples prepared using CVC and P25, with Gaussian fitted curves: (a) Ti_{2p} ; (b) V_{2p} ; (c) O_{1s} .

II. 연구성과



3.3. Optical properties of the photocatalyst

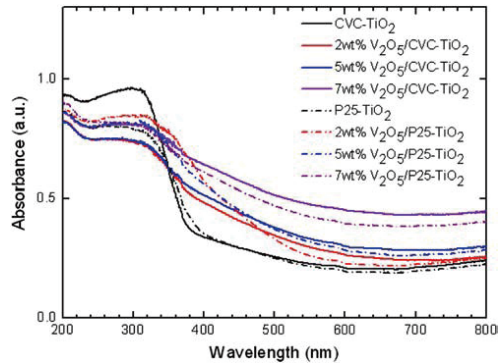


그림 4. UV-visible spectra of all $\text{V}_2\text{O}_5/\text{TiO}_2$ samples

그림 4는 UV-visible spectroscopy를 이용하여 측정된 광촉매 입자들의 빛의 파장대별 흡광도 분석 결과이다. 본 결과에서는 V_2O_5 담지량이 증가함에 따라서 가시광 영역의 파장(약 400nm 이상)에서 빛의 흡광도가 증가하며, 특히 전체 파장영역에서 기상합성법으로 제조한 광촉매 입자의 흡광도가 다소 높다. 이것은 V_2O_5 담지량이 증가함에 따라 가시광 영역에서 광촉매 반응이 이루어지고 있음을 설명하는 결과이며, 흡광도가 높게 나타나는 것에 의해 가시광 영역에서의 기상합성법으로 제조한 촉매의 광 촉매 분해반응이 향상된다는 것을 보여주는 결과이다.

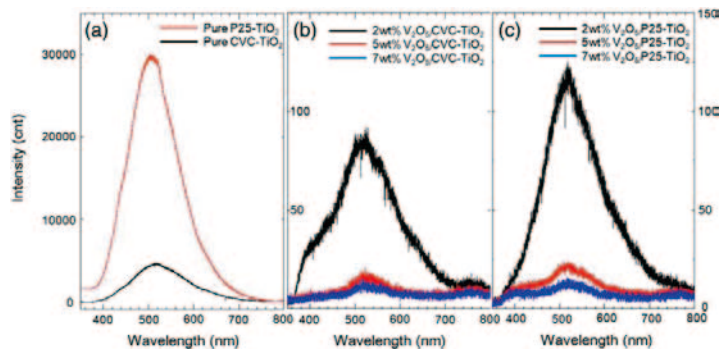


그림 5. PL spectra of (a) pure CVC-TiO₂ and P25-TiO₂; (b) $\text{V}_2\text{O}_5/\text{CVC-TiO}_2$; (c) $\text{V}_2\text{O}_5/\text{P25-TiO}_2$.

그림 5는 광촉매 입자들의 PL spectroscopy 분석 결과로, 빛 에너지를 조사해줌에 따라 입자 표면에서

전자(electron)와 정공(hole)이 분리되는 정도를 보여주는 스펙트럼이다. (a)에서는 기상합성법으로 제조한 광촉매 입자의 PL 강도(intensity)가 확연히 낮다는 것과, (b), (c)에서 V_2O_5 담지량이 증가하면 PL spectra의 강도(intensity)가 크게 낮아짐을 보여주고 있다. PL 강도가 낮다는 것은 광 촉매 반응 시 빛을 조사받을 때 촉매 표면에서 전자와 정공이 상대적으로 수월하게 분리가 되고 재결합(recombination)은 지연되면서 각 전자와 정공이 광 촉매 반응에 중요한 역할을 하는 들뜬 상태의 활성산소(superoxide anions, $O_2^{\cdot -}$)와 수산화기 라디칼(OH radical)을 만드는 역할을 기상합성법으로 제조한 가시광 촉매가 더 잘한다는 의미이다. 따라서 이러한 광학적 특성도 기상합성법으로 제조한 가시광 촉매의 광 촉매 반응이 향상되는데 역할을 하는 것으로 판단된다.

3.4. Photocatalytic performance test

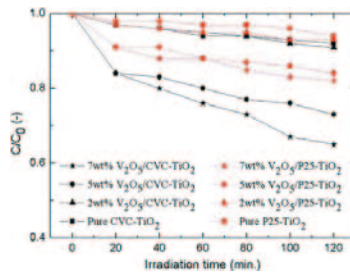


그림 6. Methylene blue photodegradation upon exposure to visible light of all samples. The initial concentration of the MB solution was 5 ppm. The visible light used (400–700 nm) was emitted by a commercial fluorescent lamp (FL15D-T25).

그림 6은 다양한 V_2O_5/TiO_2 광촉매 입자들을 이용하여 메틸렌블루 수용액 대상 가시광에서의 광분해 효율평가 결과를 나타낸 것이다. 반응시간은 총 120분으로, 조사한 빛은 가시광 파장대의 일반 상용 형광등 1개를 이용하여 실시하였다. 각 촉매입자들에 의한 가시광에서의 광분해 효율은, CVC-TiO₂와 $V_2O_5/CVC-TiO_2$ (2, 5, 7 wt% V_2O_5 loading)는 120분 경과 후 각각 7, 9, 28, 36% 였고 P25-TiO₂와 $V_2O_5/P25-TiO_2$ 의 경우 5, 6, 17, 18% 이다. 결과적으로 기상합성법을 이용하여 제조한 광촉매 입자들의 MB 광촉매 분해 효율이 약 1.5 ~ 2배 정도로 상대적으로 높다. V_2O_5 담지량이 증가하면서 광촉매 효율이 증가하여, 7 wt%를 담지한 기상합성법을 이용한 광 촉매 입자(7wt% $V_2O_5/CVC-TiO_2$)는 상용 TiO₂ 이용 제조한 광촉매 입자(7wt% $V_2O_5/P25-TiO_2$, 18%)보다 2배 높은 36%의 광촉매 분해효율을 나타냈다.

4. Conclusions

기상합성 TiO₂를 이용하여 제조한 $V_2O_5/CVC-TiO_2$ 광촉매 입자가 가시광 영역에서 상용촉매입자를 이용하여 제조한 광촉매 보다 2배 가량 높은 성능을 나타내며, 또한 광촉매 입자의 V_2O_5 의 담지량을 증가시키면 가시광

II. 연구성과

영역에서의 광 촉매 분해 효과가 향상된다.

이러한 광 촉매 분해 효과의 향상은 합성된 촉매 입자의 표면특성, 즉 화학적/물리적인 변화에 의한 것으로 판단되며, 기상합성법으로 제조한 광촉매 입자의 표면에서의 광촉매 반응에 영향을 주는 표면반응 메커니즘을 그림 7에서와 같이 제안한다.

앞에서 보여준 광 촉매 입자의 표면특성 평가결과와 광촉매 입자의 활성을 나타내는 표면반응의 메커니즘을 종합적으로 그림 7에서와 같이 설명할 수 있다.

즉, 기상합성 $V_2O_5/CVC-TiO_2$ 는 매우 작은 무정형의 TiO_2 입자로 구성되어 넓은 비표면적을 가지고 있으며, 이로 인하여 광촉매 활성점이 많다. 또한 V_2O_5 를 보다 많이 균일하게 담지하고, TiO_2 표면의 Ti^{3+} 이온의 농도가 상대적으로 높아서, 전자의 이동과 표면에서의 상호작용으로 V_2O_5 표면에서 V^{4+} 의 함량을 많이 가지게 되어 밴드갭 에너지(band gap energy)가 확연히 낮아지고, V_2O_5 담지량이 증가함에 따라서 가시광 영역(약 400nm 이상) 흡광도가 높다. 또한 표면의 수산화기(Hydroxyl)도 많아서, 광촉매 입자의 정공(hole)과 반응하여 오염물질을 분해하는 수산화기 라디칼(hydroxyl radical)을 상대적으로 많이 형성시킨다. 이와 더불어 광 촉매 표면에서 전자와 정공이 상대적으로 수월하게 분리되고 재결합이 지연되어 광 촉매 반응에 중요한 역할을 하는 들뜬 상태의 활성산소(superoxide anions, $O_2^{\cdot-}$)와 수산화기 라디칼(OH radical)을 더 활발하게 형성시켜 광 촉매 반응이 활성화된다는 의미이다.

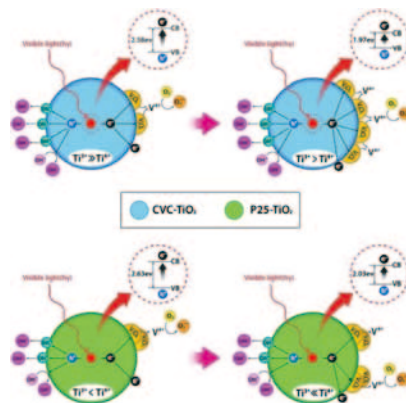


그림 7. Photocatalysis mechanism of $V_2O_5/CVC-TiO_2$ and $V_2O_5/commercial P25-TiO_2$.

References

- S. Chin, E. Park, M. Kim, G. Bae, J. Jurng, Mater. Lett., 75 (2012) 57–60.
- W. Cha, E. Park, S.-T. Yun, J. Jurng, Powder Technol. 258 (2014) 352–357.
- Y.S. Liu, Y.H. Lin, Y.S. Wei, C.Y. Liu, J. Appl. Phys., 111 (2012) 043103, published online.
- F. Dong, Y. Sun, M. Fu, Int. J. Photoenergy, 10 (2012) (Article ID 569716).

Investigation on growth behavior of multiphase silicon carbon film for front contact layer in a Si thin film solar cell*

김 동 환 | 고려대학교 신소재공학부 / 그린스쿨대학원 교수

1. Introduction and Experimental section

Si 박막 태양전지에서 TCO와 p-layer 사이 계면에서 발생하는 contact barrier는 효율 저하의 요인이 되어 이에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. Contact barrier는 TCO의 일함수가 p-type 반도체의 일함수보다 작을 경우 생성되며, TCO와 p-layer 사이 계면에 전도도가 우수하고 넓은 밴드갭을 가지는 layer를 삽입하면 contact barrier를 감소시키며, 접촉저항을 낮춰서 Si 박막 태양전지의 효율개선에 효과가 있다고 보고되고 있다.

현재 contact barrier를 감소시키기 위해 전도도가 우수한 hydrogenated microcrystalline silicon carbide를 가장 많이 사용하고 있으나 고가이고 단파장 광 손실이 크며, 균일도를 조절하기 어렵다는 단점이 있어 새로운 contact layer의 개발이 시급하다.

본 연구에서는 새로운 contact layer로 multiphase silicon-carbon 박막을 제작하였다. multiphase silicon-carbon은 a-Si:H, a-C:H 및 $\mu\text{c-Si:H}$ 의 multiphase로 구성되며 박막 내의 C-C 결합을 최대화하여 a-SiC:H없이 a-C:H 상을 생성하였다. multiphase silicon-carbon 박막은 a-C:H의 밴드갭이 a-SiC:H보다 크기 때문에 광손실을 줄일 수 있으며, PECVD 장비를 이용하기 때문에 대면적 균일도 확보가 가능하다는 장점이 있다.

multiphase silicon-carbon 박막은 PECVD 방법을 이용하여 RF power density와 hydrogen flow rate를 조절하면서 제작하였으며, 전면 contact layer의 영향을 알아보기 위해 triple-junction Si 박막 태양전지를 제작하여 적용하였다.

2. Results and discussion

그림 1은 PECVD RF power density에 따른 (a) 카본 농도와 (b) 전도도, Si 결정화도를 나타내었다. 카본 농도는 RF power density가 증가할수록 증가하였으며, 이는 CH_4 분해 증가에 기인한다. 전도도와 Si 결정화도는

* Donghwan Kim (corresponding author) et al., *Solar Energy Materials & Solar Cells*, Volume 127, Aug 2014, Pages 98-103.

II. 연구성과

RF power density가 증가할수록 감소하는데, 이는 증가된 carbon이 Si의 결정화를 억제하기 때문이라 이해할 수 있다. 그림 2에서 RF power density에 따른 흡수계수를 나타내었다. 높은 RF power density에서 증착된 샘플은 카본 농도의 증가 때문에 단파장 쪽 흡수 계수는 감소된다. 비록 높은 RF power density에서 흡수계수가 낮아지지만 낮은 전도도와 device 제작 시 계면 손상 때문에 다양한 적용이 용이하지 않다.

그림 3은 전자 온도에 따른 optical emission-intensity 비율 I_{CH^*}/I_{SiH^*} 와 결정질 Si내의 C-C 결합비율을 나타내었다. 전자 온도의 증가에 따라 CH^* radical 양 증가로 카본의 농도는 증가하고, 전자 온도의 감소에 따라 radical 간의 반응 증가로 C-C 결합비율이 증가하는 것을 알 수 있다. 그러므로 낮은 전자온도에서 carbon 농도를 감소시키고 C-C 결합을 증가시켜야 높은 전도도 및 낮은 흡수계수를 가지는 multiphase silicon-carbon 박막을 제조할 수 있다. 그림 4를 보면 전자 온도의 감소 때문에 높은 H_2 flow rate에서 carbon 농도가 감소하는 것을 확인할 수 있으며, 잔류 시간의 감소로 radical들 간의 반응이 줄어 H_2 flow rate가 증가할수록 C-C 결합비율이 증가하는 것을 확인할 수 있다. 그림 5는 H_2 flow rate 증가에 따라 C-C 결합 증가로 흡수 계수가 감소하는 것을 보여준다. 결과적으로 낮은 power density 및 작은 잔류 시간을 갖는 조건에서 C-C 결합비율이 94%까지 증가하는 것을 확인하였다. 그림 6의 HR-TEM과 C-AFM 자료를 보면, 비정질 matrix에 $\mu\text{-Si:H}$ 미세결정이 균일하게 분포하는 것을 보여주었으며, 3.7 nA의 평균 수직 전류를 가지는 것을 확인하였다. 이것은 multiphase silicon-carbon안에 a-Si:H, a-C:H 및 $\mu\text{-Si:H}$ 상이 존재하는 것을 나타낸다.

특성 비교를 위해 carbon 농도가 없는 p- $\mu\text{-Si:H}$, 수소화된 silicon-carbon alloy와 multiphase silicon-carbon 박막을 이용하여 triple junction Si 박막 태양전지를 제작하였다. 각각을 triple junction Si 박막 태양전지의 contact layer로 삽입 시, multiphase silicon-carbon 박막을 사용한 셀에서 전류밀도의 증가 때문에 약 0.3%의 효율 증가를 가져왔다(표 1). 결과적으로 그림 7의 QE에서 알 수 있듯이 contact layer의 흡수계수의 감소에 따른 단파장 QE 증가로 효율이 상승하는 결과를 얻게 되었다.

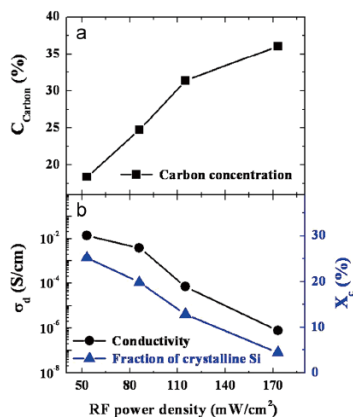


그림 1. RF power density에 따른 hydrogenated silicon-carbon alloy 박막의 단일 특성:

(a) carbon 농도, (b) 전도도와 Si 결정화도

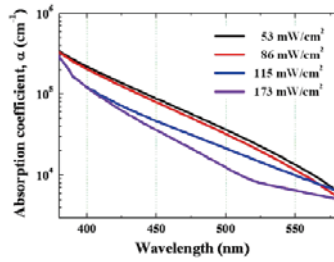


그림 2. power density에 따른 hydrogenated silicon-carbon alloy 박막의 흡수계수

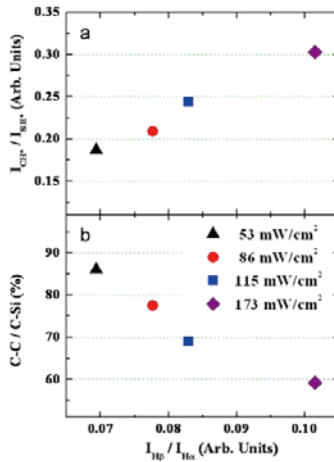


그림 3. PECVD 방법 내에서 (a) CH*와 SiH* radical의 optical emission intensity 비율 (I_{CH^*}/I_{SiH^*}) (b) 전자온도에 따른 carbon 원자의 결합 비율 (C-C/C-Si)

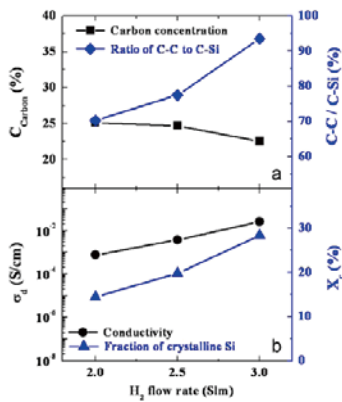


그림 4. H₂ flow rate에 따른 hydrogenated silicon-carbon alloy 박막의 단일 특성: (a) carbon 농도와 carbon 원자의 비율, (b) 전도도와 Si 결정화도

II. 연구성과

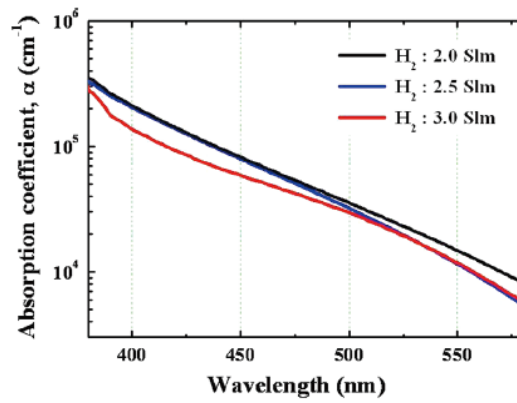


그림 5. H_2 flow rate에 따른 multiphase silicon-carbon 박막의 흡수계수

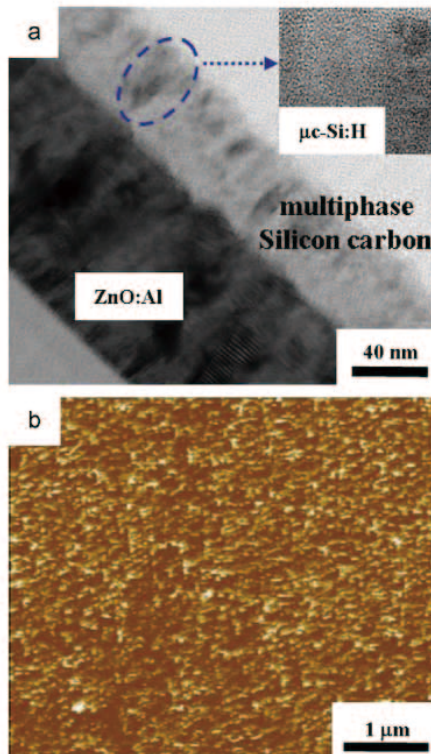


그림 6. multiphase silicon-carbon 박막의 미세구조와 수직전도도
(a) TEM 단면 (b) C-AFM을 통한 전류 image

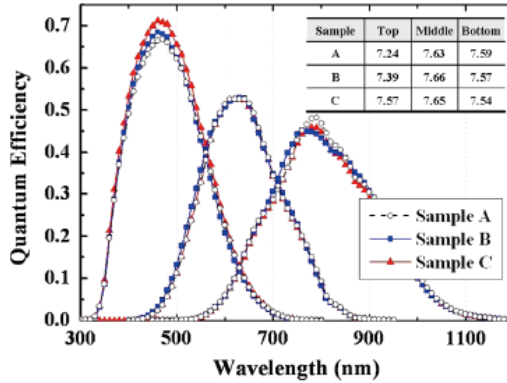


그림 7. 1 cm² 크기의 triple-junction 태양전지의 EQE

Sample A: p-μc-Si:H, Sample B: hydrogenated silicon-carbon alloy, Sample C: multiphase silicon-carbon

표 1. 전면 contact layer에 따른 triple-junction 태양전지의 효율

Sample name	Properties of contact layer				Triple junction cell parameter			
	Carbon concentration (%)	Ratio of C-C to C-Si bond (%)	Dark conductivity (S/cm)	Absorption coefficient (at 450nm/cm)	Voc (V)	Jsc (mA/cm ²)	Fill Factor	Efficiency (%)
A	0	0	2.2 x 10 ⁻²	9.39 x 10 ⁴	2.12	7.35	0.73	11.31±0.05
B	24.7	77.5	3.9 x 10 ⁻³	8.05 x 10 ⁴	2.11	7.41	0.72	11.30±0.08
C	22.5	93.5	2.5 x 10 ⁻²	5.93 x 10 ⁴	2.12	7.51	0.73	11.63±0.1

3. Conclusions

본 연구를 통해서 TCO와 p-layer 일함수 차이에 의해 생기는 계면 contact barrier를 줄이기 위해 multiphase silicon-carbon 박막을 제작하여 triple junction Si 박막 태양전지의 contact layer로 적용하였다. multiphase silicon-carbon 박막은 a-Si:H, a-C:H 및 μc-Si:H의 multiphase로 구성되어 광 손실을 감소시키고 높은 전도도를 가지는 박막의 제작이 가능하였다. multiphase silicon-carbon 박막을 사용하면 C-C 결합 비율 증가에 따라 흡수계수의 감소시키고 전도도 향상으로 contact 특성이 향상되어 p-μc-Si:H 비해 약 0.3% 효율 개선을 야기하였다.

Effective Antifouling Using Quorum-Quenching Acylase Stabilized in Magnetically-Separable Mesoporous Silica*

김 중 배 | 고려대학교 화공생명공학과 / 그린스쿨대학원 교수

1. Introduction and Experimental section

유체에 포함되어 있는 미생물 및 유기물의 상호 작용에 의해 형성되는 바이오필름(biofilm)은 quorum sensing 이라는 미생물 간의 생물학적 신호전달 과정에 의해 점점 두껍게 성장한다. 이렇게 형성된 바이오필름은 시간이 지남에 따라 지속적으로 성장하고 일정 두께 이상 자란 후에는 다시 떨어져 나가는 과정을 반복한다. 바이오필름은 배 밑바닥, 수처리 시스템(분리막 포함), 치석 형성, 체내 삽입형 의료기기, 미세유체 반응기, 각종 파이프라인 내부 등에서 쉽게 관찰되고 있다. 바이오필름은 유체의 원활한 흐름을 저해하는 요소로 작용하여, 시스템의 성능 및 효율의 저하를 유도하며 다양한 분야에서 엄청난 경제적 손실을 유발한다.

박테리아 셀 간의 신호전달 물질을 분해하여 상호작용을 방해하는 방오효소인 아실라아제(acylase)는 일반적인 수용액 상에서 시간이 지남에 따라 내외부적 영향에 의해 활성이 감소하여 방오를 위해 지속적인 활성이 요구되는 조건에서는 사용이 부적합하다. 이러한 문제 해결을 위해 나노효소반응기(nanoscale enzyme reactors, NER) 기술을 도입하여 아실라아제를 고정화 및 안정화하였다. 나노효소반응기 기술은, 넓은 접촉 표면적을 가지고 있으며 내부에 다공성 구조를 가지고 있는 다공성 실리카 물질 내부에 효소를 고정화하는 방법으로 효소 활성 감소를 유도하는 외부의 영향을 줄일 수 있을 뿐만 아니라, 효소간의 가교결합을 이용하여 효소 활성의 안정성을 극대화시킬 수 있다.

본 연구에서는 자성-다공성 실리카에 방오효소인 아실라아제를 나노효소반응기 기술을 이용하여 고정화 및 안정화된 방오 물질을 개발하고, 이 물질을 이용하여 미생물간의 신호 전달을 통해 바이오필름 형성을 유도하는 quorum sensing에 기여하는 신호분자(auto-inducer)를 분해하는 quorum quenching 효과를 확인하였다.

2. Results and discussion

자성 나노입자가 포함된 메조포러스 실리카에 아실라아제를 흡착시킨 후에 이를 가교결합하였으며, 그 결과로

* Jungbae Kim (corresponding author) et al., *Biomacromolecules*, Volume 15, Number 4, April 2014, Pages 1153-1159.

고집적의 효소가 성공적으로 고정화 및 안정화 되었음을 재사용을 통한 반복적인 활성 측정으로 확인할 수 있었다. 시간이 지남에 따라 고정화 하지 않은 아실라아제와 다공성 물질에 단순 흡착된 아실라아제는 활성이 지속적으로 감소하는 것으로 관찰되었으나, NER 방법을 통해 고정화된 아실라아제는 장기간 활성이 유지되어 실제 바이오필름이 문제를 일으키는 분야에 적용이 가능할 것으로 기대한다. 자성-다공성 실리카는 내부에 존재하는 공간을 제공함으로써 효소를 효과적으로 안정화 할 수 있을 뿐만 아니라 자석을 통해 반응용액과 쉽게 분리가 가능하다는 장점이 있어서 방오 물질의 실제 응용 가능성을 더욱 높여주는 구조물질이다.

합성한 물질의 방오 성능을 알아보기 위하여, 분리막(membrane) 위에 바이오필름 형성이 유도되는 미생물 조건에서 방오물질을 넣은 것과 넣지 않은 것의 막투과 압력(trans-membrane pressure)을 측정하였고 표면에 형성된 바이오필름을 공초점 레이저 주사 현미경(confocal laser scanning microscopy, CLSM)을 통해 관찰하였다. 방오물질이 포함된 조건에서는 일정 두께 이상의 바이오필름이 형성되지 않는 것이 시간에 따른 CLSM 확인을 통해 직접적으로 관찰되었고, 이러한 결과는 해당 분리막의 TMP 값이 일정하게 유지되는 것을 통해 간접적으로 재확인할 수 있었다.

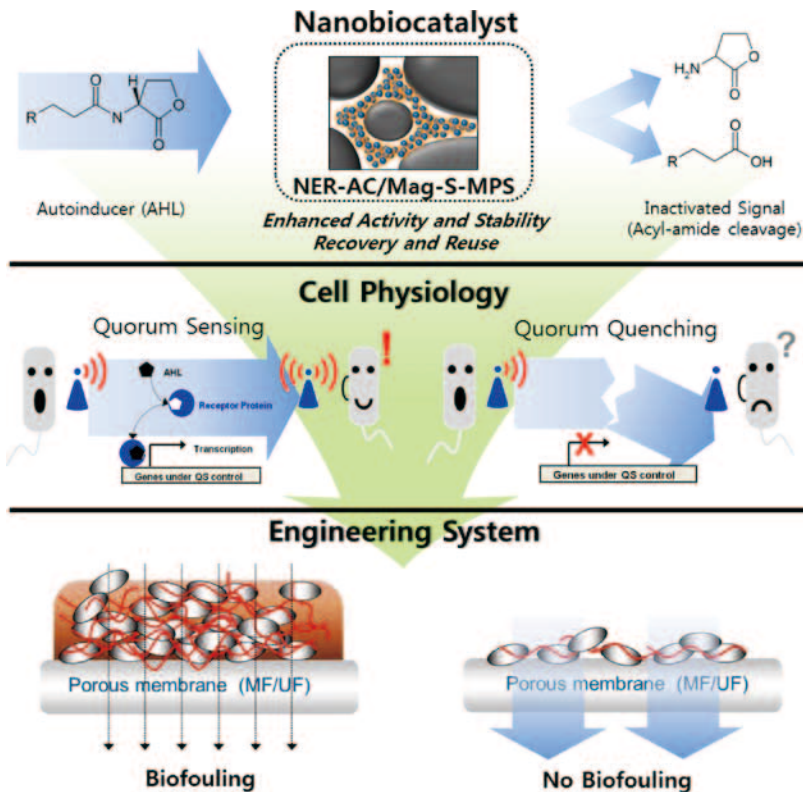


그림 1. NER 방법을 이용해 합성한 나노바이오촉매물질이 quorum sensing 신호물질을 분해하는 quorum quenching 효과를 통해 방오(antifouling) 성능을 나타내는 과정

II. 연구성과

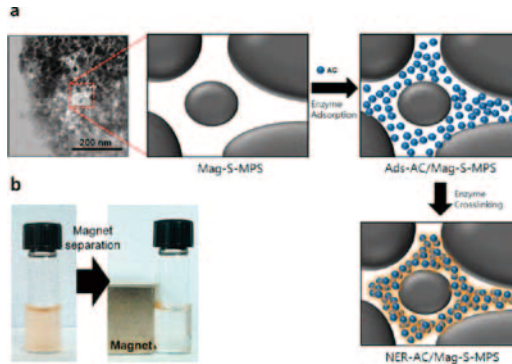


그림 2. 아실라아제를 다공성 물질 내부에 나노효소반응기 형태로 고정화 및 안정화하는 과정(a)과 자석을 이용한 자성분리 과정(b)

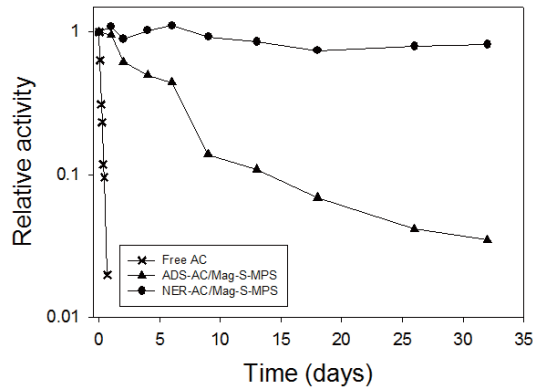


그림 3. 상온, 200 rpm 교반조건에서의 유리효소, ADS-AC 및 NER-AC의 안정성

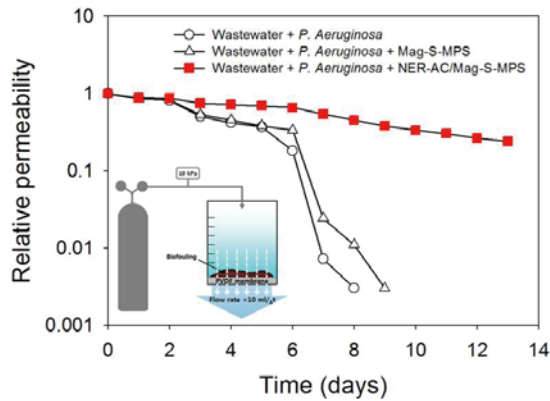


그림 4. NER-AC 유무에 따른 TMP 시스템에서의 투과율(permeability) 변화

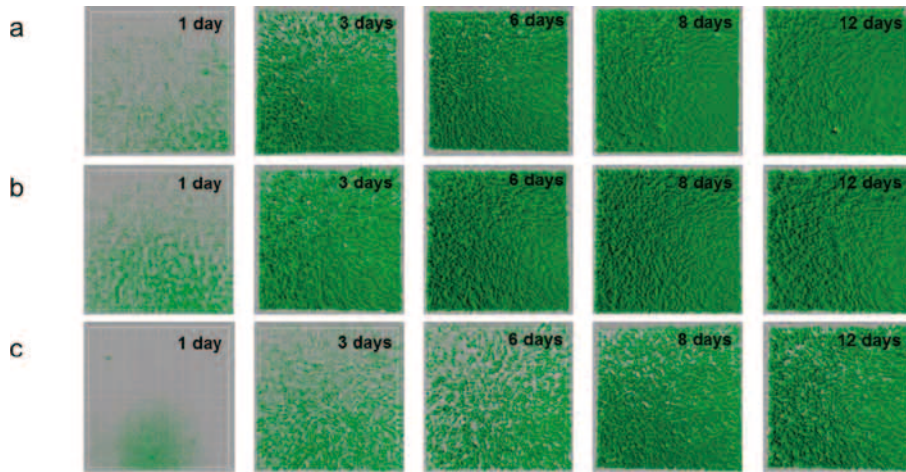


그림 5. 다양한 조건에서 형성된 바이오필름의 confocal laser scanning microscopy images, (a) 미생물에 의해 바이오필름 형성이 유도되는 조건, (b) 자성-다공성 실리카를 첨가한 조건, (c) 방오 물질을 첨가한 조건

3. Conclusions

NER 방식을 통해 아실라아제를 자성-다공성 실리카 내부에 고정화 하였으며, 교반 조건에서도 활성이 안정적으로 장기간 유지되었음을 확인할 수 있었다. 자성 물질을 이용함으로써 실제 공정에 적용할 수 있도록 자성 분리가 가능함을 확인하였고, 이는 사용 및 세척 과정의 단순화를 가능케 하는 결과로 여겨진다. 이렇게 합성된 방오 물질은 실제 미생물에 의해 바이오필름이 형성되는 조건에서 이를 억제하는 결과를 막투과 압력 측정 및 CLSM 관찰을 통해 확인할 수 있었고, 대량 생산이 가능한 물질을 이용한 방오 물질 개발에 성공하여 산업적 응용 가능성을 높은 결과라 생각한다.

Distinct Rayleigh Scattering from Hot Spot Mutant p53 Proteins Reveals Cancer Cells*

심 상 준 | 고려대학교 화공생명공학과 / 그린스쿨대학원 교수

1. Introduction and Experimental section

나노 크기의 금속입자는 자유전자의 구름으로 둘러싸인 이온의 집합체이므로 입사광의 전자파에 의해 편광이 일어나게 되고 결과적으로 집합적인 전자들의 진동공진에 의해 광 산란 현상이 발생하게 된다. 단일 나노입자의 빛 산란현상을 light scattering 스펙트럼 분석을 통해 정량적인 측정이 가능하기 때문에 표지가 어려운 생체분자를 검지할 수 있다. 분극에 의하여 형성된 전자들은 플라즈몬을 이루게 되며, 금속 나노입자의 표면에서 국소적으로 진동하게 되는데 이러한 현상을 국소 표면 플라즈몬 공명(localized surface plasmon resonance: LSPR)이라고 한다. 이러한 LSPR 광학특성은 금속입자의 종류, 크기, 모양, 입자간의 간격, 유전율 등의 변화에 매우 민감하게 반응하기 때문에 고감도의 생체분자 상호작용 분석에 많이 활용된다.

본 연구실에서는 나노입자들의 빛 산란 현상을 이용한 Rayleigh light scattering 스펙트럼 분석을 기반으로 한 다중 검출 나노플라즈모닉 검지 시스템을 개발하여 NADH와 같은 세포 내 대사물질의 탐지, 난치성 질환 바이오마커를 분석하고 검출하는 연구를 진행하였다. 더불어 생체 내 발암 과정에 중요한 메커니즘 중 하나로 인식되는 p53 mutation을 시각적으로 확인 가능한 실시간 검출 플랫폼의 성능을 지속적으로 테스트하였다.

돌연변이 p53 단백질은 전체 암의 50%가 넘는 암에서 발견되고 그 중 90% 이상은 DNA 결합 도메인에 변이가 발견된다. 정상 p53과 돌연변이 p53 단백질의 DNA 결합 능력을 모니터링 하는 것은 암세포 연구 및 진단 분야에서 그 가치가 상당히 크다고 할 수 있다. 따라서 본 연구실에서는 보다 정확하고 민감한 돌연변이 p53 단백질의 염기서열을 갖는 GADD45 promoter와 결합하는 야생형 및 돌연변이형 p53 단백질의 상호작용과 결합력의 차이를 분석하면, 기존의 방법보다 정확하고 빠르게 저농도의 변이 p53 단백질을 검출할 수 있다는 것을 확인하였다.

2. Results and discussion

본 연구실에서는 나노 플라즈모닉 센서를 이용한 DNA-단백질 상호작용 및 결합 활성에 관한 연구를 수행하였다. 먼저 표면 플라즈몬 공명 현상을 기반으로 한 GADD45 promoter-p53 단백질 상호작용 분석용

* Sang Jun Sim (corresponding author) et al., *Small*, Volume 10, Issue 14, July 2014, Pages 2954-2962.

센서를 제작하기 위해서 약 30nm 정도의 금 나노입자를 합성하였다(그림 1).

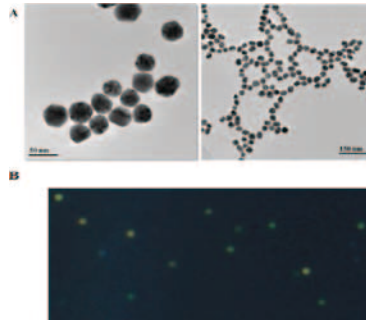


그림 1. (A) HAuCl4 용액을 소듐 시트레이트로 환원시킴으로써 만든 약 30nm 크기의 금 나노입자 TEM 이미지, (B) 1000배율에서 금 나노입자(30nm)의 암시야 이미지

단일 금 나노입자가 고정되어 있는 나노 플라즈모닉 센서를 이용하여, p53 단백질 DNA 결합 도메인에 특이적인 염기서열을 갖는 GADD45 promoter와 결합하는 야생형 및 돌연변이형 p53 단백질의 상호작용 및 결합력의 차이를 최대 파장(LSPR λ_{max} peak) 이동 값 비교를 통해 분석하여, 암 발생의 생성과 억제에 중요한 역할을 하는 p53 단백질의 돌연변이 여부를 확인함과 동시에 p53 단백질의 DNA 결합 도메인의 중요한 돌연변이 위치를 구분하고 분석할 수 있다. 기존의 방법보다 정확하고 별도의 표지 과정 없이 직접적인 분석이 가능하기 때문에 빠르게 단백질의 아미노산의 변이에 따른 각 부위의 중요도 파악이 가능함을 확인하였다(그림 2).

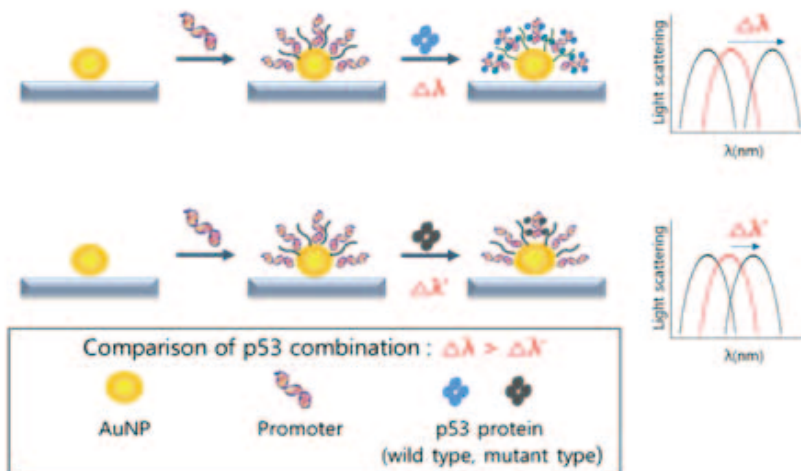


그림 2. 단일 나노 플라즈모닉 센서를 이용한 DNA와 p53 단백질과의 상호 작용을 분석하는 전체적인 과정 모식도

단일 금 나노입자에 생체물질들을 부착시킬 때마다 변하는 LSPR λ_{max} peak의 변화를 통해 DNA와 각각의

II. 연구성과

쥐 p53 단백질과의 결합력의 차이를 비교하였다. 야생형 p53 단백질의 경우 스펙트럼의 최대 파장이 9.6nm 이동한 것을 확인하였으며, 돌연변이 p53(I252F 및 R270H) 단백질의 경우 스펙트럼의 최대 파장 값이 각각 4.2nm, 1.7nm 이동하였다(그림 3).

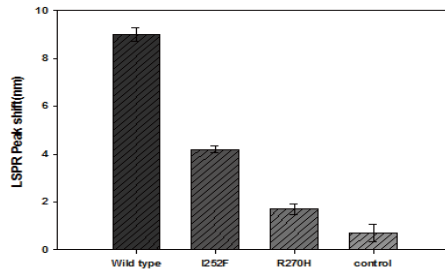


그림 3. p53 DNA binding domain의 선택적인 돌연변이로 인한 promoter와의 결합률을 금 나노입자의 최대 파장 이동 값으로 비교한 그래프

더불어 다양한 종류의 사람 유방암 세포주의 p53 단백질 돌연변이와 GADD45 promoter와의 최대 파장 이동 값을 비교하여 결합력을 비교한 결과 ZR-75-1 및 MCF-7 세포주에서 분리한 야생형 p53 단백질의 경우 스펙트럼의 최대 파장 값이 각각 8.6nm 및 9.3nm 이동한 것을 확인하였고, T47D, BT474, SKBR3, MDA-MB-231 및 MDA-MB-435s에서 분리한 돌연변이 p53 단백질의 경우 스펙트럼의 최대 파장 값이 각각 1.2nm, 1.0nm, 0.64nm, 2.66nm 및 2.1nm 이동한 것을 확인하였다(그림 4).

사람 폐암 세포주의 p53 단백질의 최대파장 이동 값을 비교한 결과, H460 세포주에서 분리한 야생형 p53 단백질의 경우 스펙트럼의 최대 파장 값이 15nm 이동한 것을 확인하였으며, H522, H441, Calu-3 및 H1703에서 분리한 돌연변이 p53 단백질의 경우 스펙트럼의 최대 파장 값이 각각 2.05nm, 3.9nm, 2.9nm, 2.66nm 및 2.4nm 이동한 것을 알 수 있다(그림 5). 여기에서는 폐암 p53 단백질 돌연변이 샘플 중 H522의 경우 DNA 결합도메인 191 위치의 p53이 유전자 결손으로 유전자가 knock down되어 p53 발현이 없다. 따라서 다른 돌연변이형 단백질보다 결합력이 현저히 떨어지며, 가장 낮은 최대파장 이동 값을 보였다.

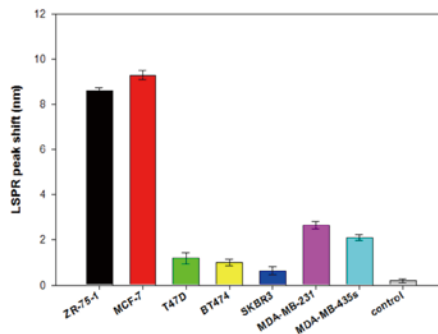


그림 4. 다양한 종류의 유방암 p53 단백질의 GADD45 promoter와의 결합률을 금 나노입자의 최대 파장 이동 값으로

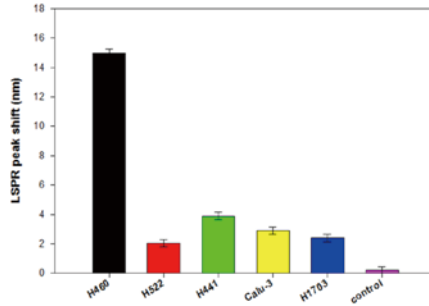


그림 5. 다양한 종류의 폐암 p53 단백질의 GADD45 promoter와의 결합력을 금 나노입자의 최대 파장 이동 값으로 비교한 그래프

즉, 돌연변이 p53 단백질과 야생형 p53 단백질의 최대파장 이동 값을 비교하여 수치화하였을 경우, 가장 높은 최대파장 이동 값을 보이는 샘플이 중요한 부분에 돌연변이가 일어났다는 것을 의미하며, 이를 통해 돌연변이 위치를 파악할 수 있는 것을 확인하였다.

3. Conclusions

본 연구를 통하여 나노 플라즈모닉 바이오센서를 기반으로 하여 특정 promoter와 결합하는 p53 단백질의 상호작용 및 결합력의 차이를 별도의 표지과정 없이 직접적인 분석이 가능하며, 야생형과 돌연변이형 p53 단백질의 결합력의 비교를 통해 아미노산의 변이에 따른 각 부위의 중요도 파악이 가능하다. 따라서 종양발생 가능성이 높은 환자를 조기 진단하는 분석 분야에 적용 및 응용할 수 있다.

Direct synthesis of hydrogen peroxide from hydrogen and oxygen using Pd nanocatalysts*

이 관 영 | 고려대학교 화공생명공학과 / 그린스쿨대학원 교수

1. Introduction and Experimental section

과산화수소는 펄프 및 섬유의 표백제, 소독 살균제, 반도체 세정액, 수처리 공정의 산화제, 화학 반응의 친환경 산화제(프로필렌 옥사이드 합성)로 사용되고 있다. 2009년 기준 연간 220만 톤의 과산화수소가 생산되고 있으며 프로필렌 옥사이드 수요의 증가와 함께 과산화수소의 수요 증가가 기대된다.

현재 과산화수소는 안트라퀴논(anthraquinone) 계열 화합물을 시작으로 연속적인 산화, 수소화 공정을 거쳐 생성되는데, 이때 많은 양의 유기 용매가 사용되고 폐기물로 발생한다는 문제점이 있다. 또한 과산화수소의 생산이 다단의 연속 공정과 생산 후 정제 및 농축 과정을 거치며 많은 에너지의 소비가 필요하다는 문제점도 있다.

이에 수소와 산소를 직접 반응시켜 과산화수소를 합성하는 직접 생산 공정이 주목 받고 있으며, 이러한 직접 생산 공정은 반응 부산물로 물이 생산되며 유기 용매의 사용이 적어 상용 공정의 대체 공정으로 많은 연구가 되어왔다. 또한, 직접 생산 공정은 구성이 간단해 과산화수소를 필요로 하는 곳에서 생산 공급할 수 있어 과산화수소의 보관 및 운반시 폭발의 위험성을 크게 줄일 수 있다. 따라서 과산화수소 직접 생산을 위한 촉매 및 반응시스템에 대한 연구가 진행되고 있다.

본 연구에서는 다양한 크기 및 다양한 형상의 팔라듐 나노 입자를 제조하여 SiO_2 에 담지 시킨 촉매를 제조하였고, 이를 과산화수소합성반응에 도입하여 팔라듐의 크기 및 형상에 따른 반응활성을 살펴보았다.

2. Results and discussion

그림 1은 다양한 크기로 합성한 팔라듐 나노입자의 TEM 사진 및 이를 실리카에 고정된 촉매의 TEM사진을 나타내었다. 팔라듐을 합성할 때 넣어주는 할로젠의 종류 및 양에 따라서 다양한 크기의 팔라듐 나노 입자를 형성할 수 있다. 하지만, 팔라듐 나노입자를 바로 과산화수소 합성 반응용 촉매로 적용시키기에는 촉매의 분리가 어렵기 때문에 이를 실리카에 고정화시켜서 촉매로 활용하였다. 그림 2는 고정화시킨 Pd/ SiO_2 촉매의 과산화수소 생성량을 나타낸 그래프이다. 일반적으로 입자의 크기가 작아지면, 단위 질량당 표면에 노출되는

* Kwan-Young Lee (corresponding author) et al., "Direct synthesis of hydrogen peroxide from hydrogen and oxygen over single-crystal cubic palladium on silica catalysts", *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, Volumes 383-384, March 2014, Pages 64-69;
Kwan-Young Lee (corresponding author) et al., "Shape-dependent catalytic activity of palladium nanoparticles for the direct synthesis of hydrogen peroxide from hydrogen and oxygen", *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, Volume 391, September 2014, Pages 48-54.

면적이 증가하여 촉매 활성이 증가하는 것이 일반적이다. 하지만 그림 2에서 보듯이 팔라듐 입자가 가장 큰 17 nm에서 과산화수소의 생성량이 가장 많은 것을 확인하였다. 과산화수소 합성반응에서 합성된 과산화수소는 촉매에 의해서 분해되며, 과산화수소의 분해반응은 나노 입자의 corner나 edge와 같은 곳에서 많이 일어난다고 알려져 있다. 나노 입자의 크기가 증가할수록 나노입자의 corner와 edge비율이 감소하기 때문에 17 nm에서 과산화수소의 겉보기 수율이 증가하는 것은 과산화수소의 분해반응이 억제 되었기 때문이라 판단된다.

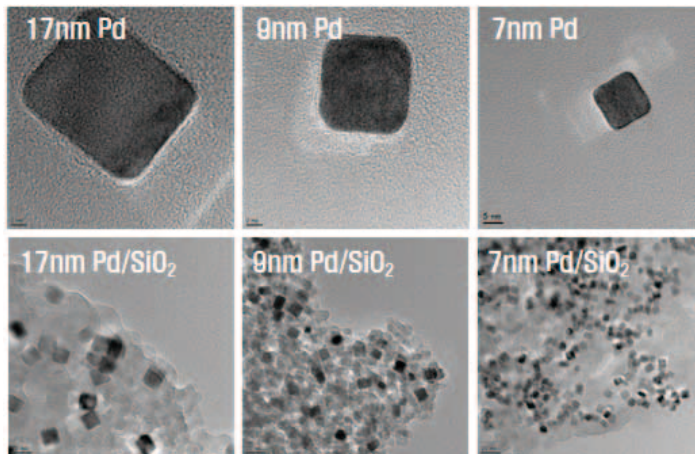


그림 1. 다양한 크기의 Pd나노 입자 및 SiO₂담체에 고정화 시킨 Pd/SiO₂촉매의 TEM 사진

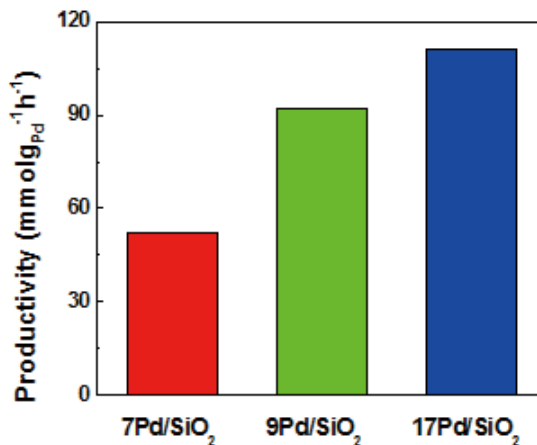


그림 2. Pd/SiO₂ 촉매를 적용하여 반응실험 결과 (과산화수소 겉보기 생성량)

II. 연구성과

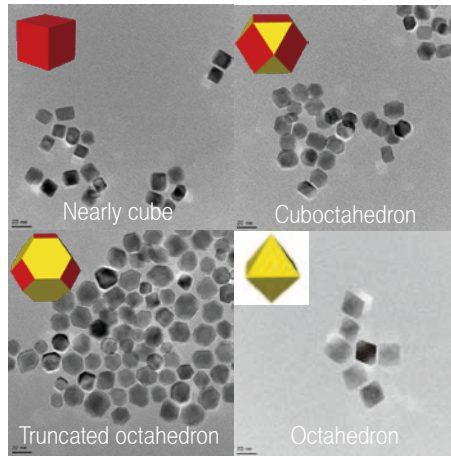


그림 3. 다양한 형태를 갖는 Pd 나노입자의 TEM 사진

그림 3은 다양한 형태를 갖는 Pd나노 입자를 합성하고 이를 TEM분석을 통해서 확인한 결과이다. 팔라듐 나노입자의 형태에 따라서 표면에 노출되는 팔라듐의 결정면이 다르기 때문에 Pd의 결정면 중에서 특정한 결정면을 노출 시키기 위해서 형상을 제어 하였다. 그림 3에서 붉은색의 면은 Pd {100}을 나타내며 노란색 면은 Pd {111}면을 나타낸다. 다양한 형태 중 Pd {100}면으로만 이루어져 있는 cube형태와 Pd {111}면으로만 이루어져 있는 octahedron을 SiO₂담체에 고정화하여 촉매로 사용하였으며, 이를 과산화수소 합성반응에 적용해 보았다.

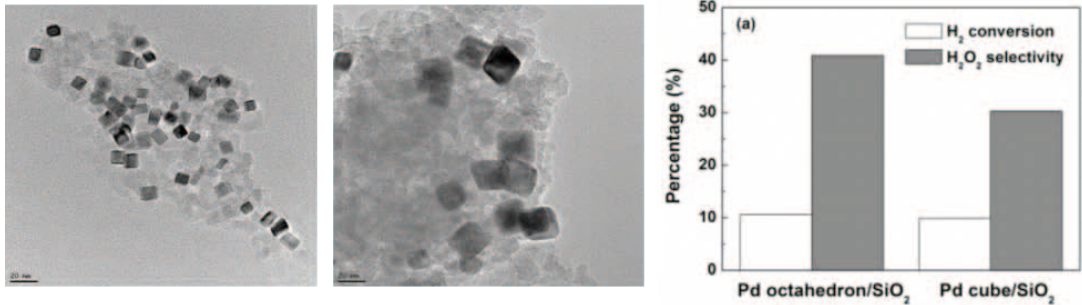
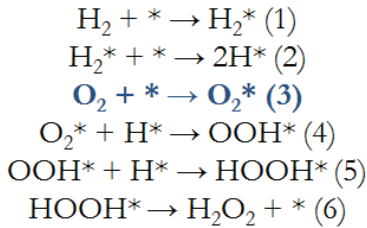


그림 4. Cube와 octahedron형태의 Pd나노 입자를 SiO₂에 담지 시킨 TEM 사진 및 과산화수소 합성반응에 적용한 결과

그림 4는 cube형태의 Pd와 octahedron 형태의 Pd를 SiO₂에 담지 시킨 촉매의 TEM 사진과 이를 과산화수소 합성반응에 적용시킨 결과를 나타낸 그림이다. 반응 결과를 보면, 수소의 전환율은 두 촉매 모두 비슷하지만, 과산화수소의 선택도가 octahedron이 훨씬 높은 것을 확인할 수 있었다. 이 현상은 산소가 Pd나노 입자에 흡착하여 라디칼이 생성되는 경로로부터 추측할 수 있다. Pd {100}면의 경우는 산소의 O-O 결합이 쉽게 해리되어 O* 라디칼 형태로 존재하기 쉽기 때문에 그림 5에서 보듯이 과산화수소 보다 물이 생성되기 쉽다.

반면에 Pd {111}면의 경우는 산소가 해리 흡착하기보다는 분자형태로 흡착하기 쉬우며, 분자형태로 흡착된 산소는 O_2^* 라디칼이 형성되기 용이하다. 이는 메커니즘 상에서 보듯이 과산화수소의 합성에 중요한 중간체인 OOH^* 의 형성을 용이하게 하여 과산화수소의 선택도를 촉진시키는 결과를 가져온다.

■ Synthesis of hydrogen peroxide



■ Side reactions

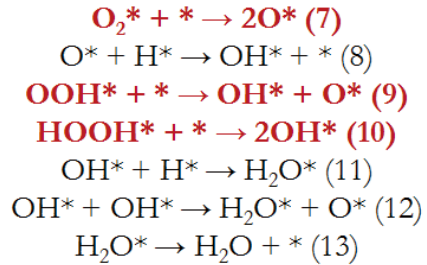


그림 5. 과산화수소 합성 메커니즘 및 부생물인 물의 합성 메커니즘

3. Conclusions

팔라듐나노입자의 크기 및 형상을 제어하여 과산화수소의 합성반응에 촉매로 적용 하였을 때, 과산화수소수의 합성은 성공적으로 이루어졌으며, 특히 일반적인 촉매의 활성과 다르게 과산화수소합성의 경우 팔라듐 나노입자의 크기가 커질수록 과산화수소의 생성량이 증가하였으며, 이는 과산화수소 분해반응이 잘 일어나는 팔라듐입자의 corner와 edge의 비율이 입자가 커질수록 줄어들기 때문이라 설명할 수 있다. 또한 Pd {111}면의 경우 산소의 해리 흡착보다는 산소 분자형태의 흡착이 용이하여 과산화 수소의 선택성을 높일 수 있다는 사실을 실험을 통해 규명하였다.