페로브스카이트 촉매의 구조적 특성과 메탄 산화이량화 반응에서 활성과의 상관관계에 관한 연구

<u>심유진</u>, 정지철^{1,†}, 권다혜¹ 명지대학교; ¹명지대학교 화학공학과 (jcjung@mju.ac.kr[†])

메탄을 고부가가치화하기 위한 다양한 전환 방법 중 단일화합물중 가장 큰 시장을 가진 에탄 과 에틸렌으로 직접 전환하는 메탄 산화이량화(OCM) 반응이 많은 관심을 받고 있다. OCM 반응의 경우 반응 시 높은 반응온도를 필요로 하고 산소를 첨가하여 산화반응을 동반한다는 단점을 가지고 있다. 따라서 이를 극복하기 위하여 높은 C_2 선택도를 가지며 열적 안정성이 높은 촉매개발 연구가 필요하다. 현재 OCM반응을 위한 다양한 촉매들이 연구되어 왔지만 상업화 가능한 최소 활성에 미치지 못하고 있으며 복잡한 조성 및 구조를 가지고 있어 활성점 규명이 어렵다. 따라서 이러한 단점을 극복하고 효율적인 촉매를 체계적으로 설계하기 위해 촉매적 활성부위를 명확히 하는 근본적인 연구를 진행할 필요성이 있다고 판단하였다. 따라서 간단하고 명확한 ABO3 구조를 가지며, 열적안정성이 높은 페로브스카이트를 OCM 반응의 촉매로 적용하였다. 촉매는 citrate sol-gel method를 이용하여 제작되었으며, XRD를 통하여 구조의 형성을 확인하였다. 본 연구에서는 페로브스카이트의 A와 B자리의 금속의 종류에 따른 촉매의 물리/화학적 변화가 촉매활성에 미치는 영향을 파악하고자 하였다. 촉매의 구조적 특성을 확인하기 위하여 tolerance factor와 specific free volume를 계산하였으며, 특성분석을 통하여 A, B 자리의 구성 성분에 따른 촉매의 특성과 활성관계를 규명하였다.