

Pt-Re 합금 촉매 표면에서의 수성가스 전환 반응에 대한 DFT 연구

김승훈^{1,2}, 조진원¹, 함형철^{1,†}, 윤성필¹, 한종희^{1,2}, 이관영^{2,3}

¹한국과학기술연구원 연료전지연구센터;

²고려대학교 그린스쿨; ³고려대학교 화공생명공학과

(hchahm@kist.re.kr[†])

바이오매스를 개질하여 수소를 생산하는 액상개질(Aqueous Phase Reforming, APR) 촉매반응은 C-C 결합을 깨는 탈수소화 부분과, 깨어진 중간체로부터 수소를 생산하는 수성가스 전환(Water-Gas Shift, WGS) 부분으로 구성되어 있다. 이 두 부분 중, 전체 반응의 속도를 결정하는 단계는 중간체인 흡착된 CO를 물과 반응시켜 수소를 생산하는 단계이고, 이 단계에 드는 에너지를 줄이면 전체 APR 반응의 성능을 향상시킬 수 있다. 본 연구에서는 밀도범함수이론(Density Functional Theory, DFT)을 활용하여, 개질 반응 촉매로 잘 알려진 Pt에 바이오매스 활성화에 주로 사용되는 Re를 첨가한 Pt-Re 이금속 촉매를 이용한 WGS 반응 연구를 수행하였다.