

## 밀도범함수 계산을 이용한 니오비움 도핑 니켈산화전극의 전기화학적 메탄 산화반응모사

곽승재, 김효석, 최윤영, 이원보<sup>†</sup>, 문준혁<sup>1</sup>

서울대학교; <sup>1</sup>서강대학교

(wblee@snu.ac.kr<sup>†</sup>)

이 포스터는 가벼운 C1 화합물인 메탄을 보다 무거운 알코올류로 바꾸는 전기화학적 촉매반응을 다룬다. 스팀 리포밍에 의한 syngas 반응은 현재까지 많은 연구가 되어왔지만 syngas 반응은 고온/고압 조건이 요구되기 때문에 에너지 소모적이라는 단점을 가지고있다. 이에 상온/상압에서의 전기화학적 반응이 좋은 대안이 될 수 있다. 기존에 메탄으로부터 전기화학적 방법을 통해 메탄올을 생성하는 연구는 상대적으로 많이 수행되지 않아왔고, 실험적방법만을 이용해 메커니즘을 알기 어렵기에 메커니즘적 연구는 보고된바가 더욱 적다.

해당 연구에선 밀도범함수 이론(DFT)+U 계산과 Nudged Elastic Band(NEB) method를 통해 NiO와 환원된 NiOOH 상에서의 메탄에서 알코올로의 전기화학적 전환 메커니즘을 밝히고, 반응 메커니즘에 Nb 도핑이 갖는 효과를 규명한다. 또한 산화제로써 CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> 이온이 반응 수용액상에 존재할 때 기 보고되어 있는 일반적 기상반응과 다른 메커니즘을 가질 수 있게 됨을 밝히고자 한다.