

## Effect of Strain on Ru Surfaces for Ammonia Synthesis Based on Density Functional Theory Calculations

이재민, 최민지, 최명진, 유종석†  
서울시립대학교  
(jsyoo84@uos.ac.kr†)

높은 수소 함량과 에너지 밀도를 갖고 간편한 저장 및 운송이 가능한 암모니아는 현재 잠재적인 carbon free energy carrier로서 주목받고 있다. 하지만 현재 암모니아의 대량 합성은 대부분 하버보슈 공정을 사용하기 때문에, 수소 기체 생산 및 고온, 고압 조건 유지를 위한 천연가스와의 에너지 소모량이 매우 커 재생 불가능한 자원 소비와 온실가스 배출을 야기한다는 환경적인 부작용이 존재한다. 이 때 루테튬 촉매는 대부분 공정에서 사용되는 철 촉매보다 활성이 좋기 때문에 낮은 온도 및 압력 조건에서 상당한 암모니아 수득률을 가진다. 따라서 본 연구에서는 루테튬 표면에서 인장 변형(strain)이 암모니아 합성에 어떤 영향을 미치는지 원자 단위로 분석하기 위해 Density Functional Theory (DFT)를 활용하고자 한다. 촉매 표면에 인장 변화를 주기 위해 대표적으로 terrace와 step 표면에 원자 간 거리를 조정하여 모델링 했고, 각 촉매 위 깃스 자유 에너지 계산을 통해 열역학적 촉매 활성을 평가하고 전자 구조를 비교함으로써 그 원인을 분석하였다. 또한 키네틱 모델링을 통해 각 반응 메커니즘의 반응 속도 결정 단계와 어떤 인장 변형을 가진 표면이 암모니아 수득률이 높은지 파악 가능하다. 따라서 계산화학적 방법으로 인장 변형에 의한 촉매 활성과 선택성을 평가하고 이를 통해 우수한 성능을 가진 암모니아 합성 촉매를 설계하고자 한다.