

밀도범함수 이론을 활용한 철계 촉매 상에서 이산화탄소 수소화 반응의 메커니즘 규명

한승주, 김석기†

한국화학연구원

(skkim726@kriect.re.kr†)

지구온난화에 대한 문제가 대두됨에 따라 이산화탄소 전환 기술에 대한 관심이 증대되고 있다. 이산화탄소 전환 기술 가운데 이산화탄소 직접 수소화를 통한 액체연료 생산은 재생 에너지와의 결합을 통해 효과적으로 이산화탄소를 저감할 수 있다. 이산화탄소 수소화 반응에서 철계 촉매는 역수성가스 전환반응 및 피셔트롭쉬 반응에 높은 활성을 가지고 있고, 다양한 활성상이 이에 관여한다고 알려져 있다. 철계 촉매 상에서 이산화탄소 수소화 반응에 대해 밀도범함수 이론을 활용한 연구가 있어왔지만, 활성상 및 반응 메커니즘의 복잡성으로 인해 체계적인 연구가 부족한 상황이다. 또한 최근에는 밀도범함수 계산 기반 microkinetic modeling을 통해 에너지 경향성 및 촉매의 활성을 예측하기 위한 방법론이 새롭게 제시되었고, 불균일계 촉매 스크리닝에의 활용이 시도되고 있다.

이에 본 연구에서는 밀도범함수 이론을 활용하여 이산화탄소 수소화 반응 메커니즘을 모사하고, 각 반응에 관여하는 실제 활성상을 제시하고자 하였다. 또한 계산 결과를 토대로 촉매의 활성을 예측할 수 있는 지시자 모델을 제시하고 microkinetic modeling을 수행하였다. 본 결과는 철계 촉매 상에서 이산화탄소 수소화 반응에 대한 이론적 이해에 더불어 신규 촉매를 개발하는데 새로운 방법론을 제시하고 있다.