

나노입자 합성기술과 DFT 계산화학을 활용한 고선택적 과산화수소 직접합성용 촉매 개발

이관영[†]

고려대학교 화공생명공학과

(kylee@korea.ac.kr[†])

고효율 산화제인 과산화수소를 수소와 산소로부터 직접 합성하는 과산화수소 직접합성 공정은 상용 공정 대비 친환경적이고 on-site 공정 경제성이 높다. 하지만, 산소분자 해리와 생성된 과산화수소의 연속적인 분해반응은 열역학적으로 자발적이기 때문에 과산화수소 선택도 저하를 초래한다. 따라서, 수소의 H-H 결합 해리 성능은 우수하되 산소의 O-O 결합과, 과산화수소의 O-O 결합 해리를 선택적으로 억제 할 수 있는 촉매개발로 이를 해결하고자 한다. 최근 DFT 계산화학 기술과 나노입자 합성기술의 비약적인 발전으로, 촉매 개발법은 고성능 촉매를 디자인하는 수준에 이르렀다. Pd (111) 면은 O-O 결합 해리능력이 낮을 것으로 계산되었고, 나노입자 형상제어 기술로 합성한 Pd octahedron으로 (111)면의 높은 선택도를 검증했다. 또한, 나노입자 크기에 따른 활성비교로 과산화수소 직접합성에 유리한 표면 전자구조를 규명했다. Strain engineering 및 charge transfer를 활용 해 촉매 표면의 전자구조를 과산화수소에 유리한 방향으로 제어하고자, 이중금속이 첨가된 형상제어 나노입자를 합성하였고 높은 과산화수소 선택도를 달성하였다.