

Highly selective methane oxidation catalyst design through an *ab initio* Monte-Carlo approach강현주, 나종걸[†], 백서인¹, 목동현¹이화여자대학교; ¹서강대학교(jgna@ewha.ac.kr[†])

메탄의 저온 고선택성 화학적 전환을 위한 촉매설계는 메탄의 활용성을 크게 높일 수 있어 각광 받고 있다. 하지만 기존의 고온조건에서 산소를 직접 반응시키는 기술은 이산화탄소로 대부분 전환되어 선택도가 너무 낮다는 단점이 있다. 본 연구에서는 메탄 산화반응에서 최적의 촉매를 찾기 위해 메탄 C-H 활성화는 최대화하면서 메탄올 C-H 활성화는 최소화하는 탈수소화 반응 양상을 예측하기 위한 멀티스케일 시뮬레이션을 수행하였다. 촉매 표면에서 일어나는 분자 단위의 현상을 정밀히 묘사하기 위해 기존의 미분방정식 모델 대신 density functional theory(DFT)-kinetic Monte Carlo(kMC) 기반 제일원리 반응모델을 사용하였다. 크게 radical-like 메커니즘과 surface-stabilized 메커니즘으로 나뉘는 메탄 산화반응을 단계적으로 분석하였고, 촉매의 종류에 따라 달라지는 활성화에너지와 흡착에너지 등 반응 파라미터의 전역민감도를 측정하여 메탄 저온 고선택성 화학적 전환에 특화된 촉매 스크리닝을 수행하였다.