

촉매 구조-활성 관계식에 대한 DFT 연구

함형철[†]

인하대학교

(ham.hyungchul@inha.ac.kr[†])

고비용/저효율 촉매는 에너지 변환 및 저장 시스템의 상용화에 주요 걸림돌중의 하나이다. 따라서 효율적인 촉매 소재를 개발하는데 많은 관심이 있어 왔다. 촉매 개발 및 최적화에서 중요한 부분중의 하나는 촉매의 물리적 및 화학적 특성을 타당하게 이해하여 제어하는 것이다. 그러나 이러한 특성에 대한 이해는 신촉매 개발의 중요성에도 불구하고 여전히 어렵다. 이는 촉매 특성에 대한 직접 분석의 어려움 때문이다. 양자역학에 기반한 DFT(density functional theory) 계산은 촉매 작용 매커니즘을 정량적으로 해석하는데 강력하고 유연한 수단중의 하나이며 특별한 활성을 나타내는 촉매를 개발하는데 많은 도움을 줄수 있다. 본 발표에서는 다양한 촉매 반응 시스템에서 촉매 구조-활성 관계식에 대한 DFT 해석을 다룰것이다. 이는 향후 신촉매를 합리적으로 설계하는데 중요한 가이드라인을 제공할수 있다.