

Overcoming the fundamental limitation of electrocatalytic methane-to-ethanol conversion using Zr doped Fe oxide: A DFT study

이성우, 이재현¹, 문준혁¹, 유종석[†]서울시립대학교; ¹서강대학교(jsyoo84@gmail.com[†])

메탄은 천연 가스의 대부분을 차지하고 있는 물질로서, 그 자체로 안정한 특성때문에 반응 활성이 어렵고 운송이 쉽지 않은 단점이 있어, 촉매를 이용한 메탄 부분 산화 반응을 통해 액화가 용이하고 에너지 밀도가 높은 알코올류 합성하는 연구가 활발하다. 산화철 기반 촉매는 열화학적 메탄 부분 산화 반응에 널리 쓰이는 촉매로서, 고온의 열화학적 조건에서는 산소 기체가 잘 해리되어 표면에 흡착한 산소가 메탄 활성점으로 작용하지만, 상온 상압의 전기화학 환경에서는 흡착 산소종을 만들기 어려워 전기화학 촉매로 사용되기 힘들다는 단점이 있다. 본 연구에서는, 실험적으로 메탄 부분 산화를 통한 에탄올 합성이 뛰어나다고 알려진 산화철-지르코늄 혼합물 촉매에서, 제일원리 계산을 통한 반응 메커니즘 규명을 목표로 한다. 이를 위해, 전기화학적 환경에서 메탄이 일반 산화철 표면을 통해 활성이 일어나지 않으며, O*나 OH*같은 흡착 산소종을 통해 메탄 활성이 일어난다는 것을 밝힌다. 또한 이 흡착 산소종이 전기화학적 산소 발생 반응(OER)을 통해 제공되는 것이 아닌, 전해질 용액에 존재하는 카보네이트 이온(CO₃²⁻)을 통해 생성됨을 규명함으로써, 전해질을 통해 전기화학적 활성이 뛰어난 촉매로 탈바꿈 할 수 있음을 밝힌다.