

Breaking the scaling relation of electrochemical CO₂ reduction on partially thiolate-protected nanoclusters

최민지, 유종석[†]
서울시립대학교
(jsyoo84@uos.ac.kr[†])

최근 이산화탄소 배출량을 규제하기 위한 방법으로 이산화탄소의 전기화학적 환원 반응이 주목받고 있다. 이산화탄소 환원 반응에 대한 촉매 활성을 높이기 위해서는 기존 촉매 상에서 반응 중간체의 흡착 에너지 간에 존재한다고 알려져 있는 상관 관계를 벗어나는 새로운 촉매를 설계해야 한다. 따라서 본 연구에서는 이산화탄소 환원 반응에 효율적인 새로운 촉매의 설계를 위해, Density Functional Theory (DFT)을 활용하여 thiolate 리간드로 둘러싸인 금속 나노 클러스터 촉매에서 해당 반응에 대한 활성을 평가하고자 한다. 특히 이중원소 도핑 기법을 이용하여 다양한 촉매 물질을 모델링하고 반응 활성점 (active site)의 변화를 야기한다. 모델링된 표면에서 열역학적 촉매 활성을 분석하기 위해 반응 중간체의 흡착 자유 에너지를 계산하여 그 상관관계를 파악하고 기존 전이금속 촉매와의 차이점을 분석함으로써, 금속 나노 클러스터 표면의 촉매 활성에 대한 전반적 경향성을 수립하고 그 원인을 밝힌다. 또한 이산화탄소 환원 반응의 주요 부반응으로 알려진 수소 기체 발생 반응에 대한 활성 분석을 통해 선택도 측면에서의 분석을 진행하고자 한다.