

루테튬 기반 sub-nano 크기의 촉매에서의 전기화학적 질소 환원 반응에 대한 DFT 연구

김승훈^{1,2}, 오제규³, 송호창³, 한종희^{1,2}, 이관영⁴, 함형철^{3,†}

¹한국과학기술연구원 청정신기술연구소; ²고려대학교 에너지환경대학원; ³인하대학교 화학공
학과; ⁴

고려대학교 화공생명공학과

(ham.hyungchul@inha.ac.kr[†])

암모니아는 비료, 용매, 냉각제 등의 원료로 산업적으로 널리 사용되고 있으며, 최근 친환경·고효율 수소 저장 물질로 각광받고 있다. 하지만 현재 암모니아 생산의 대부분을 차지하는 Haber-Bosch 공정은 고온·고압의 조건을 유지하기 위한 많은 에너지가 들고, 다량의 화석 연료를 소모하여 CO₂ 배출이 많다는 단점이 있다. 이의 대안으로, 저온·저압에서 운전이 가능하며 CO₂ 배출이 없는 전기화학적 질소 환원 반응(N₂ Reduction Reaction, NRR)이 주목받고 있다. NRR 촉매로는 루테튬(Ru) 촉매가 가장 뛰어난 활성을 보이는 것으로 알려져 있으며, Ru 촉매의 성능을 향상시키기 위한 방법 중 단일 원자 촉매에 대한 연구가 활발한 가운데, 단일 원자 촉매의 합성 과정에서 함께 만들어질 수 있는 이중 또는 삼중 원자 촉매에 대한 NRR 활성 비교 및 분석 연구는 아직 발표된 바 없다. 본 연구에서는 DFT (Density Functional Theory)에 기반한 양자역학 계산을 활용하여, Ru 기반의 단일·이중·삼중 촉매에서의 NRR에 대해, 안정한 촉매 구조와 반응 메커니즘, Potential 결정 단계, Descriptor 등에 대해 알아보았다. 그리고 반응성에 영향을 주는 요인들을 나누어 자세히 살펴보았으며, 추가적인 전자구조 해석을 통해 촉매의 전자구조변화가 촉매의 흡착에너지와 촉매 활성에 어떠한 영향을 주는지 알아보았다.