

Methane partial oxidation to ethanol over α -Fe₂O₃/ZrO₂ catalysts: A density functional theory study

이성우, 최민지, 유종석[†]

서울시립대학교

(jsyoo84@uos.ac.kr[†])

메탄은 천연 가스의 대부분을 차지하고 있는 물질로서, 안정한 특성때문에 반응 활성이 어렵고 운송이 쉽지 않은 단점이 있다. 따라서 촉매 반응을 통해 액화가 용이하고 에너지 밀도가 높은 알코올류를 합성하는 연구가 활발하다. 산화철 기반 촉매는 열화학적 메탄 부분 산화 반응에 널리 쓰이는 촉매로서, 고온의 열화학적 조건에서는 산소 기체가 산화철 표면에서 잘 해리되어 촉매 표면에 흡착 산소종이 잘 생기지만, 고온의 환경에서는 촉매 안정성 및 코킹 문제가 대두된다. 상온 상압의 전기화학 환경에서는 전위를 조절하여 생성물의 선택도를 조절할 수 있는 등 다양한 장점이 있지만, 흡착 산소종을 만들기 어려워 메탄 활성이 일어나기 힘들다는 단점이 있다. 본 연구에서는, 메탄 부분 산화 반응을 통한 에탄올 합성이 뛰어나다고 알려진 산화철-지르코늄 혼합물 촉매에서 Density functional theory (DFT) 이용하여 에탄올 합성 메커니즘을 밝힌다. 또한, 일반 산화철 표면과 지르코늄 도핑 표면을 비교하여, 지르코늄 도펀트의 영향 및 전해질이 메탄 부분 산화 반응에 어떠한 영향을 주는지 밝힌다.