

Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 표면에 Cu particle을 도핑 후  
화학 반응성을 비교하는 DFT조사

최재원, 김기철<sup>†</sup>  
건국대학교

(kich2018@konkuk.ac.kr<sup>†</sup>)

화석연료를 이용한 에너지 생산 이후의 환경오염은 항상 문제가 되어왔다. 그 중엔 연료가 다 타고 버려지는 석탄재 역시 마찬가지다. 본 연구에서는 그 석탄재를 이용하여 이산화탄소와 같은 기체상태의 오염물질과 반응하여 흡수를 할 수 있는 연구를 진행하였다. [1]먼저, 본 연구에서 석탄재에 물을 쏘아 줌으로써 구형의 유기물을 제조하였다. [2]그러나 구형의 유기물 만으로는 표면에너지가 낮아 오염물질의 흡수가 많이 일어나지 않았다. [3]본 연구에서는 표면에너지를 높이기 위해 구리와 산화철을 이용하여 유기물의 도핑을 진행하였다. XRD와 Quantum espresso를 이용하여 분석한 결과 구리와 산화철을 각각 따로 도핑하였을 때 보다 같이 도핑을 하였을 때 표면에너지가 훨씬 더 많이 증가한다는 것을 확인하였다. [4] 이러한 결과들로 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>의 표면에서 Cu가 어떠한 촉매 역할을 하는지 DFT계산을 이용하여 조사를 하였다.