

## Unlocking the Potential of Nanoparticles Comprising Immiscible Elements for Direct H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> Synthesis

조영훈, 이관영<sup>1,†</sup>

고려대학교; <sup>1</sup>고려대학교 화공생명공학과

(kylee@korea.ac.kr<sup>†</sup>)

과산화수소 직접 합성에 사용되는 촉매로는 주로 귀금속 팔라듐(Pd) 및 팔라듐을 기반으로 한 이종원소 촉매(Pd-Au, Pd-Pt, Pd-Ni, Pd-Sn...) 들이 주로 사용되어 왔다. 하지만 이 Pd 귀금속은 가격이 비싸기 때문에 경제적인 효율성은 떨어지는 단점이 있다. 그리하여 이러한 경제적 비효율성을 대체하기 위해 조금 더 값싼 과산화수소 합성용 금속을 계산화학을 이용하여 탐색하였다. 그 중에서도 과산화수소 합성에 활성이 높은 이종원소 금속(bimetal)의 조합을 탐색하였으며, 이 두 가지 금속이 섞이지 않는(immiscible) 조건 하에서 각각의 금속 위에서 수소와 산소가 분해되는 메커니즘 및 두 금속의 계면에서 과산화수소가 생성되는 메커니즘을 계산화학으로 예측하였고, 이렇게 예측된 bimetal 금속을 실제로 합성 및 구현하여 과산화수소 직접 합성 반응에 실질적으로 사용하였다.

총 5가지(Rh-Ag, Rh-Au, Pt-Au, Ir-Ag, Ir-Au)의 bimetal 금속을 합성하였고, 이에 대한 과산화수소 합성 능력 및 수소전환능력을 실제 반응 실험을 통해 밝혀내었다. 또한, 단일 금속(Rh, Ag, Pt, Au, Ir, Ag)에 대한 과산화수소 합성 반응을 진행 및 비교하였다.