

고속 대량 스크리닝 이용 H_2O_2 직접합성 이중합금 촉매 후보군 선정이홍우^{1,2}, 여병철¹, 이관영^{2,†}, 한상수¹¹한국과학기술연구원 계산과학연구센터; ²고려대학교 화공생명공학과
(kylee@korea.ac.kr[†])

H_2O_2 직접합성 촉매로서 높은 수율을 가져온 Palladium (Pd)이 중점적으로 사용되어져 왔다. 그러나, Pd의 단점으로 O_2 분자마저 쉽게 해리가 일어나, 주변의 해리된 수소 원자와 Hydrogenation 되면서 쉽게 물을 형성하는 문제가 있었고, 이는 결국 낮은 선택도로 이어졌다. 또한, 최근 배출가스 저감 촉매로서 Pd이 각광받으면서 다른 금속 후보군 들 대비 가격이 급격하게 상승하고 있다. 따라서 많은 연구진들은 Cost-effective하면서도 더 선택적이며 생산적인 이중합금 (Bimetallic alloy)를 찾고자 노력해왔다. 본 연구에서는 H_2O_2 직접합성 촉매로서 Pd를 대체할 수 있는 alloy 후보군을 도출하기 위한 High-throughput catalyst screening protocol를 제시한다. 그리고 여기서 선정된 촉매 후보 군을 실제로 입자 합성하여 H_2O_2 직접 촉매로서 활성을 평가해보고, 이를 Pd과 비교한다. 나아가 선정된 촉매 후보를 밀도범함수 이론 (Density Functional Theory) 기반 전산모사를 통해 Pd과 비교/분석하여 본다.