

범밀도함수를 이용한 $\text{NaWO}_x/\alpha\text{-SiO}_2$ 촉매에서의 산화이량화 반응 경로 해석우예솔, 하정명¹, 박명준[†]아주대학교; ¹한국과학기술연구원(mjpark@ajou.ac.kr[†])

메탄을 직접 산소와 반응시켜 C2 탄화수소로 전환하는 산화이량화 반응은 기술적 난이도는 높지만 석유를 대체할 수 있는 미래 기술로 주목받고 있다. 해당 반응의 kinetics 관련된 문헌은 주로 금속 또는 금속 산화물로 이루어진 촉매 표면과 반응물 간의 반응에 초점을 두어 광범위한 연구가 수행되고 있으나 반응의 근본적인 측면에서 명확히 반응 경로에 대해 밝혀진 바가 없다.

본 연구에서는 안정성이 높다고 알려진 $\text{NaWO}_x/\text{SiO}_2$ 촉매에 대하여 범밀도함수 계산을 수행하였다. Gaussian 16 프로그램을 이용하여 (101) 표면의 α -cristobalite 지지체 표면 중앙에 WO_x 활성점을 갖는 클러스터 모델을 가정하였고 LanL2DZ basis set을 사용하여 DFT-B3LYP 수준에서 계산을 수행하였다. 이러한 이론적인 계산을 통해 표면과 기상 반응 경로의 에너지를 비교하고 주요 생성물과 부생성물의 생성에 대한 각 경로의 역할을 설명하였다.