

# 연수 제안서

연구 분야 (Research Fields)	전기화학적 CO <sub>2</sub> 전환 에틸렌/에탄올 생산 연구
연구 과제명 (Project Title)	실시간 분석 활용 전기화학적 CO <sub>2</sub> 전환 C <sub>2+</sub> 화합물 생산 구리전극의 내구성 개선 연구
연수 제안 업무 (Training Proposal Work)	고내구성 구리전극 개발 및 메커니즘 연구
<p>▶ 고내구성 구리기반 C<sub>2+</sub> 화합물 생성 전극 촉매 개발 및 반응 메커니즘 연구</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Cu 촉매의 CO<sub>2</sub>-C<sub>2+</sub> 전환 선택성이 낮은 이유는 주요 경쟁반응인 수소생산이 활발히 일어나기 때문이며 이를 억제하는 동시에 C<sub>2</sub> 생성의 핵심 중간체인 *OCCO를 안정화시킬 수 있는 촉매 개발이 요구됨. 하지만, d-band 이론에 따라 *H, *CO, *OCCO 중간체의 결합에너지는 서로 연관되어 있어서 완벽하게 분리하기가 어려움. 따라서 선택적으로 C<sub>2+</sub> 생산 반응을 활성화시키는데 이론적 한계가 존재함.</li> <li>본 연구과제에서는 이러한 이론적 한계를 뛰어넘을 수 있는 전략으로 나노단위 계면을 활용하고자 하였음. 계면은 서로 다른 결합 특성의 두 표면이 공존하는 활성점이기 때문에 중간체의 결합 특성을 바꾸는데 크게 기여할 수 있을 것이라 예상하였음. 특히, <u>*OCCO 같은 중간체의 경우 planar 결합 구조를 가지므로 계면과의 상호작용</u>을 통해 결합 모드를 바꿀 수 있을 것이라 예상함.</li> <li>보고된 계산 연구들에 따르면, <u>구리촉매 표면에 존재하는 산소가 CO<sub>2</sub>-C<sub>2</sub> 전환 선택도에</u> 중요한 역할을 한다는 가설이 알려져 있음 (예: subsurface 산소 혹은 Cu-Cu<sub>2</sub>O 계면). 따라서 이산화탄소 환원 반응 중에 촉매의 산화수 변화 거동을 살펴보는 것이 중요하며, 촉매 표면에 특화된 <u>연 X-선 기반 NEXAFS 실시간 분석</u>의 활용이 필수임.</li> <li>C<sub>2+</sub> 생성 반응은 *CO 흡착 단계, 흡착된 *CO 분자 2개가 dimerization 되어 *OCCO가 생성되는 단계, 그리고 이후의 환원단계로 구성된다고 알려져 있음. 여기서 CO dimerization 단계가 속도결정단계로 알려져 있으며, CO가 다량 흡착되어 있는 활성점에서 C<sub>2+</sub> 생성 반응이 일어난다는 것을 알 수 있음. C<sub>2+</sub> 생성 반응의 활성점을 확인하기 위해 실시간 표면 분석이 필요함.</li> <li>전기화학적 이산화탄소 전환 C<sub>2+</sub> 화합물 생성 촉매 탐색 및 내구성을 높이는 방안 모색: ① 촉매 조성, ② 담지체간 상호 결합력 조절, ③ 전해질 조성 조절</li> </ul> <p>▶ 구리기반 C<sub>2+</sub> 화합물 생성 전극 촉매의 내구성 및 전자구조 거동 연구</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>sXAS의 경우 표면 반응만을 관찰 할 수 있음. (① Auger electron yield (AEY): ~1nm, ② Total electron yield (TEY): ~10nm, ③ Partial electron yield (PEY): ~5nm, ④ Total fluorescence yield (TFY): ~500nm)</li> <li>상기 분석을 위해서는 UHV 조건이 되어야하며, 수계 전기화학 분석을 위해서는 특별한 반응기가 필요함.</li> <li>고진공조건에서 전해질의 leak가 없도록 디자인이 필요하며, soft X-선이 투과될 수 있는 창 소재 선정, 크기, 두께 등의 최적화가 필요함. 창과 일체화된 작동 전극을 준비하는 방법 및 이를 3전극 실험에 적용 할 수 있도록 기준전극과 상대전극이 반응기 내 위치 할 수 있도록 디자인이 필요함.</li> <li><u>포항고속기 10D 빔라인 NEXAFS용 전기화학 반응기 설계 및 제작</u></li> </ul>	
소속 센터/단 명(Center) : 청정에너지연구센터	
연수 책임자(Advisor) : 오형석	