

### 탈황촉매의 활성종과 조촉매 역할 규명 (*J. Catal.*, 197, 1 (2001))

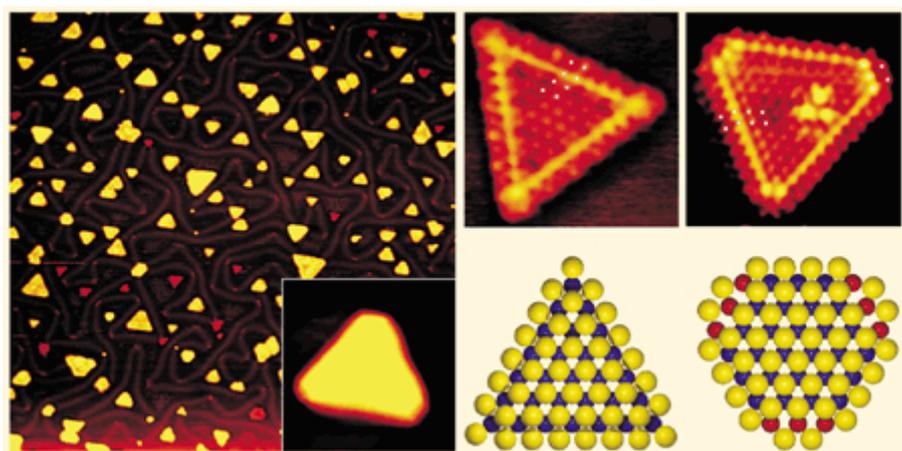
미국과 유럽 국가들이 운송 연료에 있어서의 황 함유량을 줄일 것을 강력히 요구하고 있는 가운데, 석유 생산업체들은 황제거 기술을 강화할 방법을 찾고 있다. 탈황촉매는 이미 연료 공정에 있어서는 일반화되어 있는 것이기는 하나, 아직 해결되지 않은 기초적인 문제들을 해결함으로써 한층 앞선 성능 개선을 이룰 수 있을 것으로 생각된다. 최근, 덴마크의 연구자들은 활성종의 원자 구조와 기능을 밝혀냄으로써 더 효율적인 황 제거에 대한 방법을 개척하였다.

수소첨가탈황(HDS) 촉매들은 전형적으로 molybdenum disulfide의 작은 클러스터와 반응을 촉진하는 소량의 코발트 또는 니켈 첨가제로 이루어져 있다. 다른 촉매들은 tungsten disulfide를 사용하는 것도 있다. 중질의 원료유분을 이들 HDS 촉매하에서 수소로 처리하면 황을 포함한 분자들은 휘발성이 있는 황화수소(hydrogen sulfide)로 전환되게 된다.

이 촉매의 활성점은 Co-Mo-S 영역이며, 여기서 조촉매는 결정의 모서리를 따라 존재하는 것으로 알려져 있다. 그러나, 코발트 또는 다른 조촉매들의 정확한 위치, 그리고 촉매 작용에 대한 이들의 영향등에 대해서는 계속적으로 이견이 있어왔다. 덴마크의 과학자들은 STM을 이용하여 특별히 제조된 모델 촉매를 조사함으로써, 코발트가 MoS<sub>2</sub> 입자들의 모양과 구조를 변화시키며, 활성종은 특정 형태의 MoS<sub>2</sub> 결정 모서리에만 배타적으로 형성됨을 밝혀내었다. 이 연구는 덴마크 University of Aarhus의 물리학과 교수인 Flemming Besenbacher 등에 의해 수행되었다.

연구자들은 이 STM 시료를 만들기 위해 진공하에서 H<sub>2</sub>S 존재 하에 금 표면 위로 몰리브데늄을 증발시켰다. 금의 표면 구조가 MoS<sub>2</sub> 핵화와 나노결정 성장을 위한 템플레이트로 작용하였다. 이 후에 이 나노 결정 위로 코발트와 몰리브데늄을 함께 도포하였으며 이를 잠시 고온에 노출시켰다.

이 STM 영상은 코발트가 나노클러스터의 모폴로지를 변화시킨다는 것을 직접 보여준다. 코발트가 없으면 MoS<sub>2</sub>는 순수한 삼각형 입자를 나타내나, 약간의 코발트를 첨가시키면 입자들은 모서리가 잘린 육모꼴의 형태로 변화한다. 다음 단계인 HDS 반응을 영상화하는 작업이 현재 진행중이다.



(그림) 금 표면에 성장된 Co-Mo-S 나노결정의 STM 영상(왼쪽)에는 규칙적인 형태를 갖는 촉매 입자가 보인다. 코발트가 없는 경우(가운데)에는, 이 입자는 완전한 삼각형 형태를 띠나(컴퓨터 모델에서 노란색은 S, 파란색은 Mo), 코발트(빨간색)가 포함되면 입자는 모서리가 잘린 육모꼴이 된다.