

## Carbon Dioxide Conversion into Hydrocarbon Fuels on Copper

신동윤<sup>1,2</sup>, 조준호<sup>1</sup>, 이재영<sup>2</sup>, 함형철<sup>1</sup>, 남석우<sup>1</sup>, 임동희<sup>1,\*</sup><sup>1</sup>한국과학기술연구원; <sup>2</sup>서울시립대학교

(limkr@kist.re.kr\*)

CO<sub>2</sub>의 HC화합물로의 전환은 온실가스를 감소시켜 지구온난화 문제를 해결할 뿐만 아니라, 탄소자원의 재활용이란 측면에서 매우 중요하다. 하지만, 안정한 탄소화합물인 CO<sub>2</sub>를 유용한 HC화합물로 전환하는 것은 에너지를 요구하며, 더욱 효율적인 촉매 개발이 필요한 실정이다. 여러가지 촉매들 중 구리는 다양한 연구를 통해 CO<sub>2</sub>로 부터 이용가능한 HC화합물을 생산하는데 그 효율성과 경제성이 증명되었다. 그러나, 아직까지 구리촉매의 비효율적인 오버포텐셜 문제가 해결되지 않은 과제로 남아있다. 이를 해결하기 위해서는 다양한 촉매표면 특성에 따른 이산화탄소의 전기화학적 환원 메커니즘에 대한 이해가 필요하다. 따라서, 본 연구에선, 기존의 연구되었던 Cu(211) 표면에서의 CO<sub>2</sub> 환원특성에 더하여 Cu(100), (110), (111) 표면에 대한 DFT 계산을 수행하여 다양한 구리표면의 구조적 특성이 CO<sub>2</sub> 전환에 미치는 영향을 분석하였다. Free Energy, Adsorption Energy, Work Function 등의 분석을 통하여 반응제한단계와 전체 반응속도를 결정지을 수 있는 표면을 밝혀냈으며, Strain Effect가 CO<sub>2</sub> 전환반응에 긍정적인 효과를 나타낼 수 있다는 것을 알 수 있었다. 이러한 결과를 바탕으로 기존의 구리촉매가 가지는 문제점을 보완할 수 있는 촉매에 대하여 서술하였다.