DFT study for the adsorption phenomena and catalytic reduction of CO_2 on Bi surface

오우석, 한정우[1], 송봉근†
충남대학교; [1]서울시립대학교
(bshong@cnu.ac.kr†)

이산화탄소의 환원을 통한 태양연료의 합성은 기후변화의 완화 및 고부가가치 물질 합성이라는 두가지 측면에서 중요하다. 최근 비스무트 전극을 이용한 CO_2의 전해환원반응에서 액체연료인 개미산(HCOOH)이 선택적으로 합성된다는 것이 알려졌다. 그러나 Bi 표면에서의 흡착현상에 대하여 밝혀진 바가 적어 반응의 해석에 제한이 있다. 본 연구에서는 DFT (density functional theory) 계산을 통하여 CO_2의 환원반응과 관련된 Bi(111) 에서의 흡착현상의 근본적인 측면에 대하여 밝혔다. 나아가 C1 흡착종의 환원 반응 경로에 따른 자유에너지의 변화를 구함으로써, Bi 표면에서 CO_2의 환원반응은 HCOO 중간체를 거쳐 진행될 것임을 제안하였다.