비정질 알루미노실리케이트 촉매의 브뢴스테드 산 점에서 글리세롤 탈수반응 메커니즘 연구

윤다님, 윤양식[1], 김태용[1], 박홍석[1], 한정우[2], 이종협[1,†]
서울대학교; [1]서울대학교 화학생물공학부;
[2]서울시립대학교 화학공학과
(jyi@snu.ac.kr[†])

비정질 알루미노실리케이트는 고체산 촉매로써 높은 활성을 보임에도 불구하고 이에 대한 시뮬레이션 연구가 더디게 진행되고 있는데, 이는 주기성을 갖는 양자역학 이론 계산(density functional theory)에서 비정질성을 구현하기가 어렵기 때문이다. 이 연구에서는 이와 같은 한계를 극복하기 위하여, 비정질 실리카와 물리화학적 성질이 비슷하다고 알려진 베타-크리스토발라이트(β-cristobalite) 모델을 기반으로 비정질 알루미노실리케이트 고체산 표면을 구현하였다. 또한 구현된 비정질 알루미노실리케이트 촉매의 브뢴스테드 산점에서 글리세롤 탈수반응 메커니즘을 양자역학 이론 계산을 통해 탐색하였다. 글리세롤의 흡착 구조 및 흡착력, 단계 반응에서의 활성화 에너지를 계산한 결과, 비정질 알루미노실리케이트 고체산에서의 글리세롤 탈수반응 메커니즘은 기존에 알려진 H-ZSM-5 제올라이트 촉매에서의 반응 및 코크형성 메커니즘과 다르다는 것을 확인할 수 있었다. 또한, 반응활성실험, 원소분석, ^{13}C-NMR 분석결과를 통해 계산 결과는 실험 결과와 일치함을 확인하였다. (본 연구는 한국연구재단 “중견연구자지원사업 (2013R1A2A2A01067164)”의 지원으로 수행되었습니다.)