

계산화학을 활용한 Pd/CeO₂ 촉매의
차량 냉시동 구간에서 배기가스(NO_x)
보관 성능에 대한 CeO₂의 역할 연구

홍광석, 유종석[†], Chen Hui Chan

서울시립대학교

(jsyoo84@uos.ac.kr[†])

자동차 배기가스의 질소산화물(NO_x)은 대기에 노출되면 스모그, 산성비 등의 환경적 이슈를 야기시킨다. 따라서 배기가스 방출에 대한 환경 규제가 강해지고 있다. 이 때, 엔진 내에서 질소산화물을 덜 해로운 질소 기체로 환원시키기 위한 삼원촉매 (Three-Way Catalyst)의 효율이 중요하다. 삼원촉매의 주된 성능은 크게 엔진 저온 구간에서는 반응이 잘 일어나지 않기 때문에 질소산화물의 흡착을 통한 보관 성능과 높은 온도에서의 반응 활성으로 나누어 볼 수 있다. Pd 계열 금속이 일반적으로 질소산화물 환원 반응에 유리하다고 알려져 있으며 담체를 CeO₂로 이용하였을 때 냉시동 구간에서의 보관 성능까지 향상된다고 알려져 있다. 따라서 배기가스 질소산화물의 대부분인 NO기체의 Pd/CeO₂ 계면의 보관 특성을 파악하는 것이 중요하다. 계산화학을 이용하면 다양한 반응 경로 및 자유 에너지를 계산하여 에너지학적으로 분석이 가능하며 각 반응의 활성화 에너지까지 비교가 가능하다. 따라서 본 연구에서는 밀도범함수이론 (Density Functional Theory)를 이용하여 Pd/CeO₂ 계면의 냉시동 구간에서 NO 기체 보관에 대한 메커니즘을 규명하고자 한다.