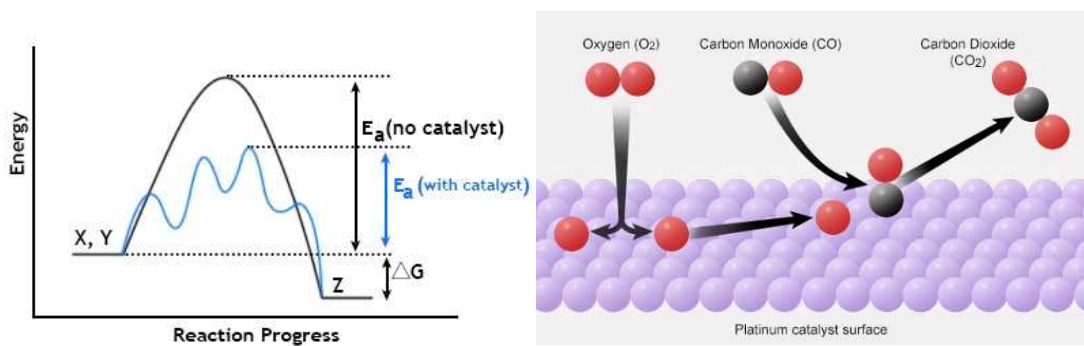


[붙임]

## KAIST Grand Challenge 30 Project 제안서

①연구제목	국문	불균일 촉매 반응의 실시간 메커니즘 분석			
	영문	in-situ Mechanism Analysis of Heterogeneous Catalytic Reactions			
②제안자	성명	국문	송현준	소속 학부/학과	화학과
		영문	Hyunjoon Song		
	주요 연구분야	나노구조체 합성 및 응용 연구			
	연구 impact 내용 서술				
불균일 촉매 반응을 실시간, 실제 반응환경에서 완벽히 이해할 수 있게 되면 촉매 특성의 큰 향상을 기대할 수 있으며, 나아가 최적화된 촉매의 조성 및 구조를 제시하여 새로운 고효율, 고선택성 촉매 반응을 개발할 수 있다. 따라서 에너지 및 환경 촉매의 기초 학문적 연구 및 관련 산업 응용에 크게 기여할 수 있다.					

③제안내용
<p><b>(1) 연구배경</b></p> <p>촉매란 반응과정에서 소모되거나 변화되지 않으면서 반응속도를 빠르거나 느리게 변화시키는 물질을 말한다. 기존 반응 경로와 다른, 즉 다른 형태의 전이상태를 형성하여 반응이 일어나는 데 필요한 활성화 에너지를 변화시켜 반응속도를 바꾸는 것이 촉매의 역할이다. 따라서 반응속도를 원하는 대로 조절하려면 반응 메커니즘을 이해하는 것이 중요하다. 촉매에는 크게 균일 촉매와 불균일 촉매가 있는데, 이 중 불균일 촉매는 반응물이나 생성물과 촉매의 상이 다른 것으로 반응 후 분리가 쉬워 산업적으로 널리 사용되고 있다. 실생활에서 불균일 촉매의 대표적인 예는 자동차의 머플러, 즉 배기가스 변환장치이다. 여기에는 로듐, 백금과 같은 금속 고체 촉매 물질이 포함되어 있으며, 엔진이 작동할 때 생성된 일산화탄소와 이산화질소 등의 공기오염 물질들이 금속 촉매 표면에 흡착, 탈착한 후 무해한 기체로 바뀌어 자동차 밖으로 배출된다. 이와 같이 불균일 촉매 반응은 표면에서 이루어지기 때문에 표면적을 넓히기 위해 대부분 나노미터(<math>10^{-9}</math> 미터) 크기의 구조를 가지게 된다.</p>



<촉매 반응 경로 변화 및 불균일 촉매의 예>

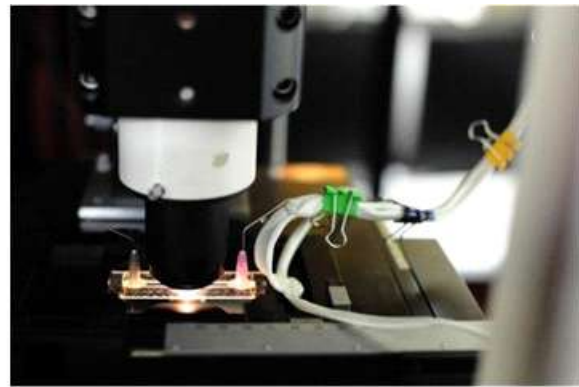
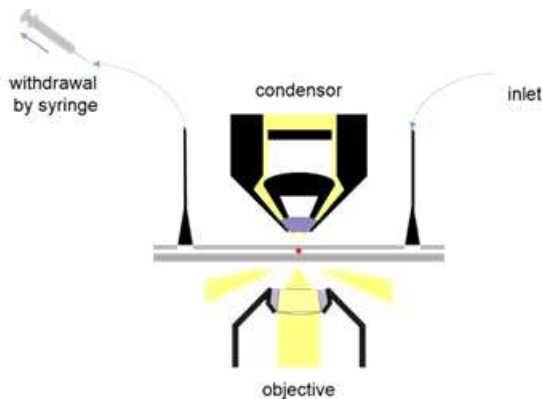
## (2) 기존 연구방법의 한계점

이렇듯 불균일 촉매는 촉매의 표면 상태에 따라 매우 다른 특성을 나타내며, 반응 중 촉매의 표면 구조가 온도나 압력과 같은 반응 환경에 따라 민감하게 달라지기도 하다. 현재의 나노 촉매 반응의 메커니즘 연구는 주로 전자현미경이나 분광분석법을 이용하고 있는데 이 분석법들은 분석 조건이 대부분 초고진공 상태에서 반응 연구가 이루어지고 있어 실제 촉매반응과는 다른 환경에서 진행된다. 또한 높은 에너지의 전자나 빛을 이용하기 때문에 촉매가 측정 중 변하거나 측정 시간이 수 초에 불과해 정밀한 분석을 유도하기 어렵다. 최근에 환경투과 전자현미경 (ETEM) 등의 분석장비들이 개발되고 있으나 특별한 측정 장비가 필요하고 아직까지 가능한 반응 환경이 제한되어 있다. 일반적인 분해능을 지닌 분광분석법 (자외선-가시광선 분광법 등)의 경우는 대량의 촉매 시료에 대한 평균적인 결과만을 얻게 되므로 각각의 나노구조 표면의 차이나 온도 혹은 농도 등의 국소 환경 차이에 따른 중요한 정보들을 알 수 없게 된다.

## (3) 본 연구실의 독창적 연구 방법

본 연구실은 국소표면플라즈몬공명 (LSPR) 을 이용한 실시간 반응모니터링 방법을 이용해 한계를 극복하고자 한다. LSPR이란 나노금속입자 표면의 전자 구름이 방사된 빛과의 상호작용으로 산란된 빛을 말한다. 이 산란된 빛은 금속의 특성이나 주변 환경에 따라 달라지는데 분해능이 촉매 입자 하나에 달하며 반응 환경 민감성이 매우 높아 좋은 측정 탐침으로 사용할 수 있다. 본 연구실에서는 흐름 셀과 온도조절장치 도입을 통해 상온 이상의 온도에서의 은 나노 입자의 갈바닉 반응을 실시간 모니터링하여 보고한 바 있다. 이 방법을 이용하면 실시간 (in situ), 실제 조건 (in operado) 에서의 촉매 반응 메커니즘 연구가 가능하게 된다. 또한 단일 입자를 관찰할 수 있기 때문에 표면 구조에 따른 반응 과정을 높은 분해능으로 측정할 수 있게 된다. 아울러 표면에 결합된 반응 중간체를 표면증강라만 산란 (SERS) 분광법으로 측정할 수 있으므로, 반응 중 촉매 입자

의 표면 구조 형태와 반응 중간체를 동시에 이해할 수 있을 것이다. 이는 현재 화두가 되고 있는 에너지 제조 반응을 이해하는 데 큰 도움이 될 것으로 예상된다. 앞으로 전기화학적 분석 장치와 결합, 전기 촉매의 반응 메커니즘을 분석하여 전자의 이동 동역학 수준까지의 정밀한 연구를 목표로 하며, 적용 대상 영역을 유기 촉매화학 반응과 광반응, 전기화학 반응 등 용액 상 반응과 아울러 고온 기체 반응에까지 적용하여 넓은 범위의 불균일 촉매 반응에 적용할 수 있는 일반화된 측정 방법을 고안하고자 한다.



<흐름 셀 도식과 국소플라즈몬 공명의 결합>

#### (4) 그랜드 챌린지 프로젝트의 적합성

불균일 촉매 반응의 메커니즘 분석은 기초학문 관점과 산업적 응용성 두 측면에서 모두 매우 중요한 과제임에도 불구하고 연구 과제를 수행하는 데에 어려운 점이 있어왔다. 먼저, 높은 산업적 응용 특성상 메커니즘을 분석해가며 촉매를 개발하기보다 그 효율과 응용에 집중된 연구개발로 메커니즘 분석에 대한 연구는 상대적으로 관심도가 적다. 또한 위와 같은 새로운 분석방법의 개발은 간단한 촉매 모델부터 실험을 시작하여 점점 복잡한 모델로 발전해 나아가며 분석 결과와 실험 노하우가 점차 축적이 되어야하기 때문에 장기적인 연구비 지원이 매우 절실하다. 따라서 그랜드 챌린지 프로젝트를 통하여 실시간, 실제 반응환경에서의 단입자 분석 방법을 개발하고 불균일 촉매의 정밀한 반응메커니즘 연구를 하고자 하며, 최종적으로 불균일 반응의 완벽한 이해를 통하여 고효율, 고선택성의 새로운 에너지 촉매를 개발하는 것을 목표로 한다.

제안자 : 송현준(인)