재생 가능한 수소 에너지 생산을 위한 BN-Biphenyl과 BN-Diphenylmethane의 가역적 탈수소화 제일원리계산 연구

이유경, 신연정, 신동윤, 임동희†
충북대학교 환경공학과
(limkr@cbnu.ac.kr†)

수소에너지는 화석연료를 대체 할 미래의 친환경 에너지원으로서 각광받고 있으나 수소 저장 및 운송에 있어 경제성과 효율성을 충족시키기 위한 기술적 한계가 존재한다. 최근 이를 극복하기 위한 매체로써 LOHC (liquid organic hydrigen carries)에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 선행연구에서 biphenyl과 diphenylmethane을 혼합 시 상온에서 액체 상태로 존재하며 6.9wt% H_2와 60 g/L의 높은 수소 저장 능력을 갖는다는 것이 실험적으로 보고되었지만 이를 더욱 향상시키기 위한 메커니즘 규명에 대한 연구는 부족한 실정이다. 따라서 본 연구에서는 Gaussian16 소프트웨어를 이용한 제일원리 계산을 수행하여 biphenyl과 diphenylmethane의 가역적 탈수소화 메커니즘을 분석하였다. 또한, 더욱 높은 효율을 확보하기 위해 B와 N이 C와 치환된 BN-phenyl과 BN-diphenylmethane를 디자인하여 가역적 탈수소화 메커니즘을 분석하였다. 그 결과로서, B와 N이 동시에 치환되었을 때, B와 N에서 탈수소화가 더욱 빠르게 진행되는 것을 발견하였으며 그 이유를 규명하기 위해 평균 전하 분석을 수행하였다. 이와 같은 결과들을 기반으로 가역적 탈수소화 효율을 더욱 향상시키기 위해 Pd와 Ru 합금 촉매를 개발하여 최적의 수소 저장 및 방출을 할 수 있는 조건을 제안하고자 한다.