

Density functional theory (DFT)에 기반한 N-doped graphene의 이산화탄소 흡착 특성

임근식, 이기봉^{1,†}, 함형철²고려대학교; ¹고려대학교 화공생명공학과; ²한국과학기술연구원 연료전지연구센터(kibonglee@korea.ac.kr[†])

인류의 산업활동과 화석 연료를 통한 에너지 생산, 운송 수단의 사용 등 다양한 활동 과정에서 나오는 이산화탄소의 양은 꾸준히 증가하였다. 발생량의 증가와 함께 야기되는 생태계로의 악영향으로 인해, 이산화탄소 저감을 위한 기술 개발은 여러 분야에서 이루어지고 있다. 이산화탄소 포집 기술은 carbon dioxide capture and storage 기술에서 70 % 이상의 비용을 차지하고 있다. 포집 기술 중에서도 흡착 기술은 흡착제의 재사용이 가능하고 높은 효율을 낼 수 있다는 장점이 있으며, 이때 고성능의 흡착제를 개발하는 것이 중요하다. 활성탄이나 그래핀 등의 탄소 소재는 주로 물리흡착에 기반한 흡착 메커니즘을 가지고 있어 흡착제의 표면과 이산화탄소 사이의 작용에 대한 이해와 응용이 필요한데, 우수한 흡착제의 조건 파악과 흡착제에 대한 분석 및 선별에 분자 시뮬레이션을 활용할 수 있다. 본 연구에서는 그래핀 구조에서 나타나는 질소 등의 heteroatom 의 doping 의 영향을 density functional theory 를 통해 계산 화학적으로 분석하였다. Doping된 graphene 표면에서 나타나는 다양한 components에 대해 구조 계산을 수행하였고 이에 대하여 이산화탄소와의 작용을 다각도로 파악해 보았다. 이를 기반으로 탄소 소재의 이산화탄소 흡착에 대한 최적의 표면 조건을 파악하여 실질적 소재 개발에 응용할 수 있을 것으로 기대된다.