

미세공성 물질의 BET 비표면적 측정을 위한 CO₂ 흡착 등온선의 적용가능성

윤태웅, 김민범, 이승준, 김승익, 배윤상†

연세대학교

(mowbae@yonsei.ac.kr[†])

비표면적(surface area)은 다공성 물질이 가지는 가장 중요한 특성중의 하나다. MOF나 zeolite와 같은 다공성 물질의 비표면적을 측정할 때는 질소와 아르곤 흡착등온선을 이용한 BET분석이 일반적이다. 그러나, 운동반지름이 질소와 아르곤에 이르는 “작은” 초미세공을 가지는 물질의 경우에는 등온선 측정에 사용되는 극저온에서, 분자가 기공을 통과하는데 필요한 활성화 에너지를 극복할 수 없다. 이런 경우에는 일반적으로 273K에서 측정할 수 있는 CO₂ 등온선을 이용해서 BET 비표면적을 잴 수가 있다. 하지만, CO₂의 높은 사극자 모멘트 때문에 CO₂ 등온선을 이용한 BET 비표면적 측정에는 그 동안 논란의 여지가 있어 왔다. 본 연구에서는 GCMC 모사를 통하여 서로 다른 기공 크기를 가지는 여러 종류의 MOF와 zeolite에 대해 BET 비표면적 계산을 해본 결과, 오직 초미세공을 가지는 물질의 경우에는 BET 비표면적이 의미가 있음을 확인했다. 이 결과를 통해 초미세공을 가지는 흡착제에 한하여 273K에서의 CO₂ 등온선이 BET 비표면적을 측정하는데 사용 가능함을 확인하였다.

Acknowledgments -This research was supported by the Basic Science Research Program of the National Research Foundation of Korea (NRF) funded by the Ministry of Science, ICT & Future Planning (NRF-2013R1A1A1061178). The authors would like to acknowledge Prof. Randall Q. Snurr for his discussions.