

## 밀도 범함수 이론을 통한 그래핀의 이산화탄소 흡착 특성 및 van der Waals force의 영향 연구

임근식, 함형철<sup>1</sup>, 이기봉\*고려대학교; <sup>1</sup>한국과학기술연구원 연료전지연구센터

(kibonglee@korea.ac.kr\*)

지구온난화의 주된 원인인 온실기체 중 하나인 이산화탄소는, 그 발생량이 꾸준히 세계적으로 증가하고 있는 추세이고, 이산화탄소를 저감하기 위한 다양한 기술들이 연구되고 있으며, 흡착도 그 중 하나이다. 흡착제로는 다양한 물질들이 흡착 조건(온도, 압력)에 맞게 연구되고 있으며, 탄소 소재들은 구조적 특이성을 비롯한 독특한 성질로 인해 주목 받고 있다. CNT, graphite, graphene 등의 다양한 탄소 소재들은 activated carbon과 같이 탄소로만 이루어져 있으며, 흡착 분야에서도 이들에 대한 연구가 이루어지고 있다. 그들 중 graphene은 벌집 모양의 한 층의 탄소로 이루어진 독특한 구조를 가진 이른바 '꿈의 소재'로 불리는 물질이다. 이러한 그래핀의 CO<sub>2</sub> 흡착 특성을 알아보기 위해 계산화학의 한가지 방법인 density functional theory (DFT)를 적용하여 흡착 에너지 등의 특성을 알아보았다. 또한 DFT-D2 방법을 통해 van der Waals force의 영향을 적용하여 그 결과들을 비교하였다. 이를 통해 van der Waals force를 적용하였을 때의 흡착 에너지 값을 구하였으며, 그래핀과 CO<sub>2</sub> 사이의 거리가 DFT-D2 방법을 적용하였을 때 보다 가까워진다는 것을 확인 할 수 있었다. 이 결과를 기반으로 graphene과 graphene oxide의 CO<sub>2</sub> 흡착 특성에 대한 보다 발전된 연구를 할 수 있을 것으로 기대된다.