

밀도 범함수 이론 (DFT)을 통한 질소 도핑과 결합을
포함하는 그래핀의 이산화탄소 흡착 특성 분석
및 최적 조건 연구

임근식, 함형철¹, 이기봉^{2,†}

고려대학교; ¹한국과학기술연구원 연료전지연구센터;

²고려대학교 화공생명공학과

(kibonglee@korea.ac.kr[†])

대기 중으로 배출되는 이산화탄소의 양은 꾸준한 증가 추세이며 이로 인한 악영향을 줄이는 이산화탄소 저감을 위한 기술 개발은 여러 분야에서 이루어지고 있다. 포집을 통한 이산화탄소 제거 방법에는 아민 흡수제를 이용한 방법과 다양한 고체 흡착제를 사용하는 방법이 있다. 기존의 아민 흡수 방법은 현재 가장 많이 활용되고 있으나, 용매 재생에 큰 에너지가 필요하므로 고성능 흡착제를 개발하여 활용하는 연구가 지속되고 있다. 본 연구에서는 넓은 표면적과 열적, 화학적 안정성으로 이산화탄소 흡착에 사용되는 탄소 소재 중 뛰어난 열 및 전기 전도도, 넓은 표면적 등의 독특한 성질을 갖는 그래핀의 이산화탄소 흡착 특성 분석을 위해 분자 모델링과 DFT를 통한 계산을 수행하였다. 그래핀의 합성 과정에서 유발되는 결합 (vacancy, stone-wales)과 이산화탄소와 보다 강한 결합력을 가지게 하는 질소 도핑의 영향을 그 양에 따른 흡착 에너지 계산 등을 통해 파악해보고 최적 조건을 찾아보았다. 또한 이산화탄소 외에 질소, 메탄 등에 대해서도 흡착 에너지, 흡착 과정의 DOS 변화, 표면과 기체 분자의 오비탈 계산을 통해 흡착 메커니즘을 파악하여 탄소 소재의 선택적 이산화탄소 흡착 가능성을 확인해 보았다. 본 연구결과는 이차원 탄소 구조로 나타낼 수 있는 탄소 소재의 이산화탄소 흡착 성능 향상에 응용할 수 있을 것으로 기대된다.