재생 가능한 수소에너지 개발을 위한 밀도범함수론 이론을 이용한 Bis-BN cyclohexane의 기능기 치환 및 탈수소화 메커니즘 분석

민유리, 이유경, 신동윤, 이지혜[1], 송택용[1], 임동희†
충북대학교; [1]한국가스공사
(limkr@cbnu.ac.kr†)

지구상에서 풍부한 자원인 수소를 활용하는 수소에너지는, 연료전지에 적용 시 유해한 부산물이 생성되지 않는다는 장점을 가지고 있다. 수소 저장기술에는 수소저장합금, 고압탱크, 액체수소저장 등 많은 저장기술이 존재하지만, 대용량의 수소저장 및 안정성 문제 등으로 지속적인 연구가 필요하다. 이에 우리는 현재 수소 저장기술로서 주목받고 있는 LOHC (Liquid organic hydrogen carriers) 물질인 Bis-BN cyclohexane을 이용하여 고효율의 수소 저장물질을 개발하고자 한다. 이를 위해 Gaussian 16 소프트웨어를 이용한 밀도범함수이론 (density functional theory, DFT) 계산을 수행하여 Bis-BN cyclohexane의 탈수소화 반응엔탈피 및 반응자유에너지 계산 기반의 기능기 스크리닝을 진행하였다. F, Cl, NH_2와 같은 기능기 중 Bis-BN cyclohexane에 F를 치환하였을 경우 탈수소화 반응자유에너지는 0.4kJ/mol로 가역적인 반응이 확인되었으며, NH_2를 치환하였을 경우 탈수소화 반응엔탈피는 63.9kJ/mol로 안정적인 탈수소화 반응을 나타냈다. 이에 대한 메커니즘 규명을 통해 NH_2가 치환된 Bis-BN cyclohexane의 탈수소화 반응은 다른 두 물질의 경로와 다른 경로로 반응이 진행되었다. 또한, 명확한 규명을 위하여 ESP 및 HOMO&LUMO 계산 등의 전자구조 분석을 수행하였다.