

A computational investigation of the applicability of BET theory in micro and meso-porous metal-organic frameworks

정충식, 정용철[†]
부산대학교

(greg.chung@pusan.ac.kr[†])

Metal-organic frameworks (MOFs)는 금속이온과 유기리간드가 자가 조립의 과정을 거쳐 만들어지는데, 사용하는 금속과 유기물의 종류에 따라 기공 크기, 결정 형태, 기능이 다른 다양한 종류의 MOF가 만들어 질수 있다. MOF의 특징 중 하나는 넓은 비표면적이고 이는 전통적으로 BET 이론을 활용해서 정량적으로 얻을 수 있었다. 최근 들어 실험적으로 얻어진 BET 이론 기반 비표면적과 실제 MOF 내부를 구성하고 있는 원자의 비표면적들을 계산해서 얻어진 값들 (geometric surface area)과 현격한 차이가 나는 것이 보고되고 있어 기존 BET이론을 바탕으로 얻어진 비표면적이 과연 MOF와 같은 다공성 물질에 적용하는 것이 타당한지에 대한 논의가 진행 중이다. 본 연구에서는 다양한 비표면적과 기공크기를 가진 213개의 MOF를 대상으로 grand canonical Monte Carlo (GCMC) 시뮬레이션을 실행하여 BET 표면적을 계산하고 이를 geometric surface area와 비교하였다. 이를 바탕으로 BET 이론으로 MOF와 같은 다공성 물질의 비표면적을 계산할 경우 한계점과 주의해야할 점을 발견하였다.