

## D<sub>2</sub> adsorption on Ti-decorated IRMOF3

김태승, 김인성, 이지화

서울대학교 공과대학 화학생물공학부

연료전지 자동차의 실현을 위해 수소저장이 필요하며 complex metal hydride 와 흡착을 이용한 수소 저장 방법이 활발히 연구되고 있다. 흡착에 의한 수소저장 방법은 가역적인 장점이 있지만 DOE 가 2015 년 까지 개발 목표로 설정한 실온에서의 저장 중량비 5.5 wt % 를 만족시키려면 수소분자의 흡착엔탈피가 20 kJ/mol 이상이어야 하지만 현재까지 연구된 그 어떤 흡착체도 10 kJ/mol 에 미치지 못하고 있다. 근래에 polyaniline, CNT, fullerene 과 같은 conjugate  $\pi$ -system 에 원자상태로 결합된 Sc, Ti, V 원자에 수소가 최대 4 분자까지 25-40 kJ/mol의 흡착에너지를 가지며 분자 흡착한다는 이론적인 결과가 보고되어 관심을 끌고 있다. 본 연구에서는 Kubas interaction에 의한 수소 분자흡착을 실험적으로 증명하여 수소저장 응용에 대한 가능성을 알아 보기 위하여 polyaniline (PANI) 과 MOF(Metal-organic framework) 표면에 Ti 원자를 진공 증착법으로 분산 흡착시킨 시편에 대한 D<sub>2</sub> 의 흡탈착 특성을 Temperature programmed desorption 방법으로 연구하였다.

먼저, 87 K의 Ti/ PANI에 D<sub>2</sub>를 흡착시키면 Ti 원자당 D<sub>2</sub>의 0.5 분자가 해리 흡착하였으며, 이는 Ti가 cluster를 형성하기 때문이라 결론지었다. Ti의 clustering을 방지하기 위해 MOF-5 의 벤젠링에 -NH<sub>2</sub> group이 1개 치환된 IRMOF-3의 박막을 성장시킨 후 같은 실험을 수행했을 때는 TPD spectrum에서 폭이 좁은 D<sub>2</sub>의 탈착 피크가 110 K에서 추가로 관찰되었다. 이 피크가 Kubas interaction에 의한 D<sub>2</sub>의 분자흡착인가에 대해 고찰하고 실험적으로 확인하는 방법을 제안하였다.