



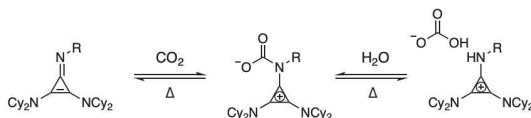
중등 사사과정 지도 개요

제 목	컴퓨터 시뮬레이션을 이용한 이산화탄소 흡착 기능성 분자 디자인			
지도교수	성 명	김형준		
	소 속	화학과	전 공	양자화학
탐구분야	계산화학		학년도	2024학년도

탐구 개요

1. 탐구 필요성

대기 중 이산화탄소 절감을 위한 방법 중 하나로 이산화탄소 흡착 기능성 분자에 대한 연구가 진행 중에 있다. 초강염기 분자 중 이산화탄소 흡착 기능성 분자로 사이클로프로펜이민(cyclopropenimine, CPI)이 유망한 후보물질로 관심을 받고 있다. 아래 그림에 보는 것처럼 CPI 분자(그림의 가장 왼쪽)의 질소 부분에 이산화탄소가 결합하는 것은 규명되었지만, CPI 분자 구조와 이산화탄소와의 결합 세기 사이에 대한 상관관계는 불분명하다.



2. 탐구 목적

양자화학 시뮬레이션을 이용하여 이산화탄소를 효과적으로 저장할 수 있는 CPI 유도체를 디자인한다.

3. 탐구 내용

- 1) 밀도 범함수 이론을 이용하여 CPI와 이산화탄소 분자의 결합 에너지를 계산한다.
- 2) CPI 분자 구조와 이산화탄소 분자 결합 에너지의 상관 관계를 파악한다.

4. 탐구 방법

다양한 작용기를 도입하고 양자화학 시뮬레이션을 이용하여 아래의 물성을 예상해본다.

- 1) 이산화탄소와 작용기를 도입한 후보 물질 사이의 결합 에너지 예측
- 2) 작용기의 전자적 특성에 따른 결합 에너지 변화 예측
- 3) 작용기의 분자 구조 특성에 따른 결합 에너지 변화 예측

5. 기대 효과

계산화학 시뮬레이션을 이용하여 이산화탄소 흡착 기능성 분자의 개발을 보다 체계적으로 수행할 수 있을 것으로 기대된다.