

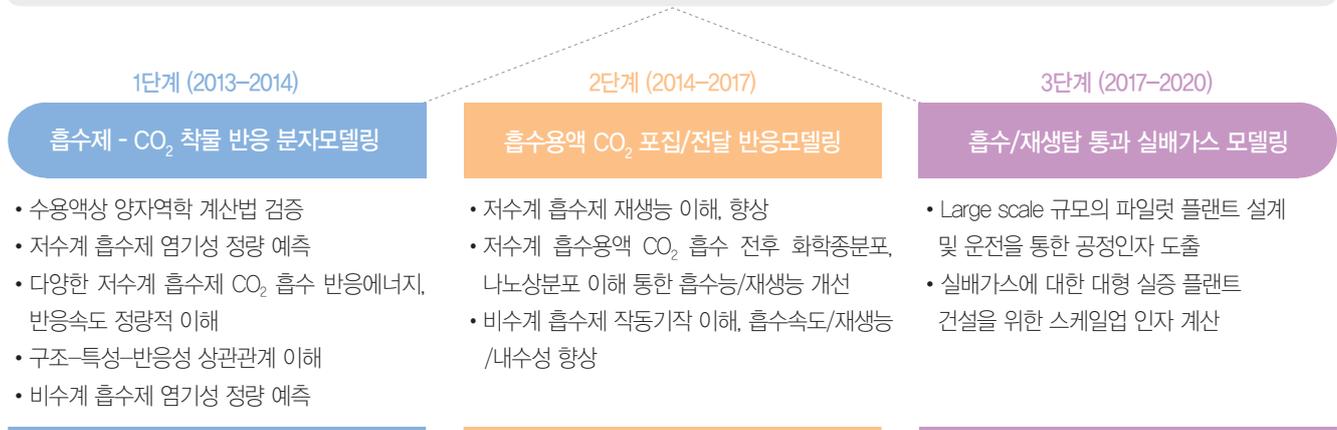
이산화탄소 습식 흡수제 포집반응 모사 및 신규 흡수제 설계

- 연구 기관 광주과학기술원
- 연구 기간 2013.6.1~2020.5.31
- 참여 기관 University de Tours
- 연구책임자 장윤희(yhjang@gist.ac.kr)



연구목표 및 내용

습식 흡수용액의 CO₂ 선택적 흡수/재생 반응 분자 수준 모사, 이에 기반한 합리적 흡수제 설계



기술개발 TRM

		1단계			2단계			3단계		
		1차년	2차년	3차년	1차년	2차년	3차년	1차년	2차년	3차년
실증 저수계 포집제 개발 분자 모델링	나노구조 호스트 물질 특성과 흡수능 관계 확립			기작 이해 단일흡수제 스크리닝 기법 확립	신규흡수제/혼합흡수제 스크리닝 흡수능/속도, 재생능 우수후보 선별 실험진 이전, 피드백 기반 기법 검증 점도, 안정성, 부식성 스크리닝 확립			포집/재생능, 안정성, 환경친화 만족 신규 저수계 우수 흡수제 창출 실배가스/흡수탑/재생탑 수준으로 스크리닝 기법 대규모화, 패키징화		
	혁신 저수계 촉매 포집제 및 비수계 포집제 분자 모델링				CA 모사 대표 촉매의 작동 기작 이해 CA 모사 대표 촉매의 분해 기작 이해 다양한 촉매의 효율/안정성 스크리닝			저수계 흡수용액 내 촉매 분포 이해 포집/재생능, 안정성, 환경친화 만족 저수계 촉매촉진 우수 흡수제 개발		
	다양한 아민형 게스트 물질 표면기능화 기술 개발				알코올 용액 모사 스크리닝기법 확립 CO ₂ BOL의 CO ₂ 흡수/재생 기작 이해 CO ₂ 흡수 따른 점도, 확산계수 이해 용액성분포/작동기작 수분 영향 이해			다양한 초염기, 아민계 비수계 흡수제에 대해 스크리닝 기법 검증 후 활용 포집/재생능, 안정성, 환경친화 만족 신규 비수계 우수 흡수제 창출		

기대효과

- 흡수 및 재생 메커니즘 이해를 바탕으로 신규 흡수제 설계 후 가상 스크리닝 통해 선별 후 실험진에 이전, 흡수제 개발 기간 단축
- 흡수제에 요구되는 MEA 대비 낮은 재생 에너지, 증기압, 점도, 부식성, 용해도, 높은 열적 화학적 안정성, 선별성을 계산으로 제시
- 용매 내 반응 모사 가능한 시뮬레이션 기법 개발, 대규모 액상 반응 모사에 확대 적용
- 유기 태양전지, 물 분해 촉매, CO₂ 전환 기술진과 연계하여 인공광합성 구현