

이산화탄소 습식 흡수제 포집반응 모사 및 신규 흡수제 설계

Modeling and designing liquid/solid absorbents for CO₂ capture and release



장 윤 희 (yhjang@gist.ac.kr)
광주과학기술원

• Yunhee Chang
GIST

최종연구목표

- 다단계 분자모델링에 기반한 저온 비수계/저수계 CO₂ 흡수제의 합리적 설계
 - (1단계) 단분자 흡수제의 CO₂ 흡/탈착 반응경로/반응에너지/반응속도 양자역학 계산
 - (2단계) 벌크 흡수제의 (특히 수분에 의한) 안정성, CO₂ 용해도 정량화
 - (3단계) 혼합배기가스의 벌크 흡수제 통과 과정 모사, CO₂ 포집능/선택성 정량화

주요연구내용

- 다양한 흡수제 포집능, 재생능력, 선택성 및 각종 특성의 문헌치 (계산 및 실험) 축적
- 효율과 상관관계 ($r > 0.8$) 보이는 특성 찾아, 이를 최적화하는 물질 선택 또는 설계
- 흡수제 성능 관련 특성 정량적 예측 위한 양자역학 계산법 검증 및 개발
- 흡수제의 흡/탈착 반응기작 규명, 효율에 영향 미치는 핵심인자 및 핵심단계 규명
- 흡수제의 고유특성 (basicity, pKa 등), CO₂ 흡/탈착 반응에너지, 반응속도 예측
- 흡수제에 첨가하여 낮은 재생열과 높은 반응속도를 모두 구현할 CO₂ 포집 촉매 설계
- CO₂ 포집 공정 모사 (타 과제) 위한 패러미터의 선행적 유도 (분자 수준, 제일원리)
- 벌크 흡수제의 CO₂ 용해 과정의 대규모 분자동력학 모사 (2단계) 위한 힘장 개발
- 벌크 흡수제 통과 혼합배기가스 중 CO₂ 선택성 kinetic Monte Carlo 모사 (3단계) 위한 반응에너지/반응속도 패러미터 개발

기대효과

- CO₂ 흡/탈착 기작의 더 나은 이해
- CO₂의 흡/탈착 효율 개선을 위한 흡수제의 분자 구조 설계 원리 이해, 신물질 설계
- 설계된 신물질 합성/측정 전 특성 예측 (virtual screening) 통해 압축된 후보 실험진에 이진
- Virtual screening (계산) + combinatorial screening (실험) 결합으로 합리적인 물질 개발
- CO₂ 흡/탈착 효율 개선을 위한 공정 조건 이해, 최적화된 공정 조건을 실험진에 제안
- CO₂ 포집 후 전환 분야에도 확대 응용 가능 (인공 광합성, 바이오디젤 등)
- 저명 학술지 논문 저술, 저명 학술대회 발표를 통한 자사의 공유
- 서로 다른 분야 (계산-실험, 화학-물리, 다른 스케일 모델링) 간의 공동/융합 연구 초석 마련
- 해외 공동 연구 초석 마련, 환경의 중요성을 인식하고 보전에 공헌하는 글로벌 과학 인재 양성

Research Goals

- Designing high-performance, low-energy CO₂ absorbents by using molecular modeling tool

Research Contents

- Quantum mechanics calculations on CO₂-absorbent 1:1 complexes
- Molecular dynamics/Monte Carlo (MD/MC) simulation on CO₂ capture
- Grand Canonical MC simulation of flue gas through the absorbents

Expected Effects

- Better understanding of CO₂ capture/release mechanism.
- Rational design of CO₂ absorbents from virtual screening + combinatorial screening
- Rational optimization of CO₂ capture/release processes
- A step forward to CO₂ conversion (artificial photosynthesis, biodiesel, etc.)
- Knowledge shared through publications and presentations
- Framework for (international) collaborations and researcher exchanges