

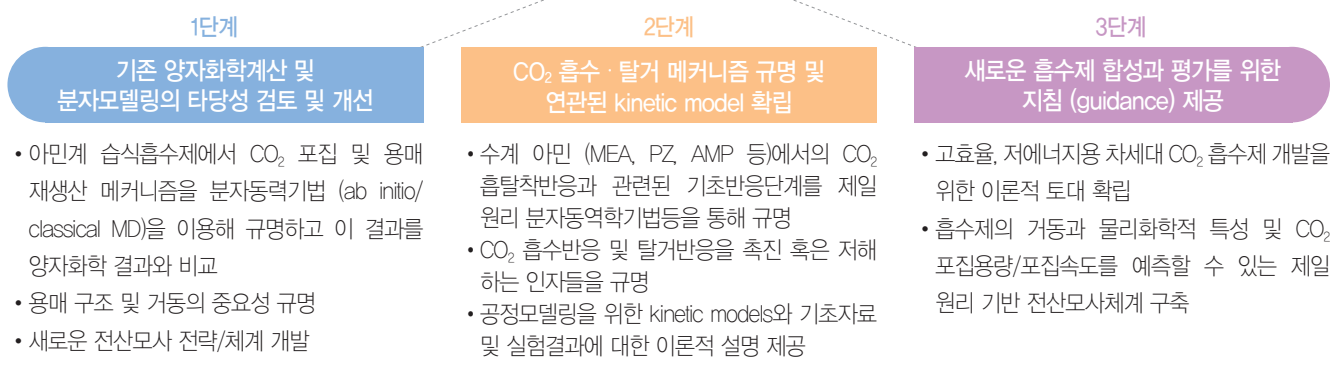
# 제일원리기반 다단계 전산모사를 통한 고효율 이산화탄소 포집용 흡수제 디자인

○ 연구 기관 University of Texas at Austin  
○ 연구 기간 2013.6.1~2020.5.31  
○ 참여 기관  
○ 연구책임자 황경순(gshwang@che.utexas.edu)



## 연구목표 및 내용

### 차세대 고효율 저비용 CO<sub>2</sub> 흡수제 개발 및 연관된 원천기술 확보를 위한 이론적 기초 제공



## 기술개발 TRM

	1단계			2단계			3단계		
	1차년	2차년	3차년	1차년	2차년	3차년	1차년	2차년	3차년
전산 모사를 통한 흡수제 디자인			수계 알카놀 아민(MEA) CO <sub>2</sub> 포집 및 용매 재생산 메커니즘 규명	기존 수계 아민(MEA, PZ, AMP 등) 흡수제에서의 CO <sub>2</sub> 흡탈착반응기구 규명			고효율 저비용 흡수제 개발을 위한 이론적 토대 확립		
					아민계 혼합물 및 치환계의 역할 규명			신규 흡수제들의 포집용량/포집속도 및 물리화학적 특성 평가	
			기존 모델링 방법의 타당성 검토 및 개선	저(비)수계 흡수제의 CO <sub>2</sub> 포집반응기구 규명				신규 흡수제들의 kinetic models 개발 및 기초자료 제공	
				CO <sub>2</sub> 흡수반응 및 탈거반응 촉진/저해 인자 규명					고효율 차세대 흡수제 개발을 선도할 전산모사 체계구축
			새로운 전산모사 전략/체계 개발	kinetic models 와 기초자료 제공					

## 기대효과

- 반응 메커니즘 규명을 통해 고효율 저비용 CO<sub>2</sub> 포집용 차세대 흡수제 개발에 중요한 지침 (guidance) 제공
- Kinetic models와 이에 필요한 기초자료를 제공함으로써 CO<sub>2</sub> 포집공정 최적화를 위한 공정모사 프로그램개발에 기여
- CO<sub>2</sub> 포집에 대한 전반적인 이해와 실험적으로 관찰된 복잡한 현상을 설명하고 더불어 새로운 공정조건과 흡수제에서의 거동 및 특성을 예측함으로써 새로운 물질 개발뿐만 아니라 기존 흡수제와 장치의 성능 극대화에 기여
- 반응 메커니즘의 정량적인 이해를 바탕으로 CO<sub>2</sub> 포집 및 재활용을 위한 기반기술개발 및 연관된 원천기술 확보에 기여