

이산화탄소와 알칸올아민계 흡수제의 흡수반응 메커니즘

심재구*, 김준한, 장경룡
한전 전력연구원
(jgshim@kepri.re.kr*)

온실가스인 CO₂의 제거를 위해 가장 많이 연구되고 있는 방법은 습식흡수법이다. 지금까지 습식흡수법에 사용된 대표적인 흡수제는 알칸올아민류의 흡수제들이며, 대표적인 알칸올아민은 MEA, DEA, MDEA 등이 있다. 또한 Sartori와 Savage등에 의해 AMP와 같은 입체장애 아민 (Sterically hindered amine)이 산성가스 제거에 우수한 흡수제로 제안되어져 왔다.

알칸올아민과 CO₂의 흡수반응 메커니즘은 1, 2차 아민의 경우 CO₂와 알칸올아민의 직접 반응에 의한 알킬 카바메이트 생성반응이 주 반응으로 나타나는 반응 메커니즘을 가지며, 3차 아민의 경우 CO₂의 가수분해 반응에 의한 탄산과 알칸올아민의 반응이 주 반응으로 알려져 있다. 또한 AMP와 같은 입체장애아민의 경우 Steric hindrance에 의해 아민과 CO₂간의 반응이 방해받게 되어 반응속도는 느려지나 탈거시에는 반대로 흡수제와 CO₂의 분리가 쉽게 일어날 수 있다. 기존에 알려진 문헌에서는 1, 2차 아민의 경우, CO₂와 아민은 첫 번째 반응이 종결되는 지점에서 아민의 N과 CO₂의 C간에 결합이 이루어지며 두 번째 반응에서 아민중의 N-H가 분리되는 Zwitterion mechanism에 의해 반응한다고 가정하고 있다. 본 연구에서는 Gaussian program 등을 이용하여 기존의 Zwitterion mechanism과 CO₂ 중의 C와 아민중 N의 결합 및 아민의 N-H 분리가 동시에 이루어지는 Termolecular mechanism을 분석하여 실제 CO₂와 아민의 반응 메커니즘을 규명하고자 하였다.