

## NO<sub>x</sub>와 알칸올아민 흡수제의 반응 메커니즘 규명

김준한, 이지현, 장경룡, 김자현<sup>1</sup>, 전영호<sup>1</sup>, 심재구\*  
한전 전력연구원; <sup>1</sup>승실대학교  
(jgshim@kepri.re.kr\*)

화석 연료의 연소후 배출되는 배가스중에 함유된 SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub> 그리고 CO<sub>2</sub> 등을 동시에 저감 가능하다면, 발전소, 제철소 등과 같은 대용량 대기오염 배출원의 부지확보 및 환경개선비용 저감등에 크게 기여할수 있다. 따라서, 고효율 SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub> 그리고 CO<sub>2</sub> 복합흡수제 개발의 일환으로 알칸올아민 흡수제 중 대표적인 CO<sub>2</sub> 흡수제인 MEA와 NO<sub>x</sub>의 흡수 반응 메커니즘 해석을 수행하였다.

본 연구는 계산화학 프로그램을 이용하여 흡수제와 NO<sub>x</sub>를 반응시킨후, 각 구간마다 structure optimization 시켜가면서 수행되었다. 연구결과, MEA-NO<sub>x</sub> 반응은 각 NO<sub>x</sub> 구성성분에 따라 다른 것으로 나타났다. 즉, MEA-NO<sub>2</sub>의 경우에는 반응이 거의 일어나지 않는 것으로 나타났으며, MEA-N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>의 경우에는 반응확률이 가장 높은 것으로 나타났다. 이러한 MEA와 CO<sub>2</sub>, SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>간의 반응 메커니즘 분석을 통해 복합 배가스 흡수제의 개발이 추진 될 예정이다.