

다양한 작용기 도입에 의한 지르코늄 기반 유무기 복합체의 CH<sub>4</sub>/N<sub>2</sub> 분리 성능 향상

김태훈, 김서율, 박완제, 한혁희, 배윤상†  
연세대학교

(mowbae@yonsei.ac.kr†)

세일가스, 저급 천연가스, 매립지 가스 및 산업 부생가스 등에는 상당량의 CH<sub>4</sub>이 함유되어 있는데, CH<sub>4</sub>을 연료로 활용하기 위해서는 CO<sub>2</sub>, SO<sub>x</sub>, H<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub> 등 다양한 불순물을 제거해야 한다. 대부분의 불순물들은 기존의 기술들로 쉽게 제거가 가능하지만, N<sub>2</sub>은 CH<sub>4</sub>과 매우 비슷한 물리·화학적 특성으로 인해 제거가 매우 어렵다. 현재 CH<sub>4</sub>/N<sub>2</sub> 분리에는 에너지집약적 증류가 사용되고 있어서, 에너지 절약적인 흡착식 CH<sub>4</sub>/N<sub>2</sub> 분리 기술이 절실히 요구된다. 본 연구에서는 수열안정성이 높은 지르코늄(Zr) 기반 유무기 복합체에 다양한 작용기를 도입 함을 통해 뛰어난 CH<sub>4</sub>/N<sub>2</sub> 분리 성능을 보이는 구조들을 발견하였다. 또한, Grand Canonical Monte Carlo (GCMC) 분자모사와 First principle calculations 기반 흡착에너지 계산을 통해 CH<sub>4</sub> 흡착 메커니즘을 규명하였다.

#### Acknowledgments

We would like to acknowledge the “Next Generation Carbon Upcycling Project” (Project No.2017M1A2A2043449) through the National Research Foundation (NRF) funded by the Ministry of Science and ICT, Republic of Korea.