

촉매 유효인자를 고려한 DME 생산 고정층 촉매 반응기 해석

이신범, 안성준, 조원일*, 백영순*, 박달근, 윤인섭**

서울대학교 응용화학부

*한국가스공사 연구개발원

**서울대학교 화학공정신기술연구소

(esyoon@pslab.snu.ac.kr)

Analysis of the fixed bed reactor for DME synthesis in consideration of effectiveness factor

Shin Beom Lee, Sung Joon Ahn, Won il Cho*, Young Soon Baek*,
Dal Keun Park, En Sup Yoon**

School of Chemical Engineering, Seoul National University

*LNG Technology Research Center

**Institute of Chemical Processes, Seoul National University

요 약

최근 디젤유 대체 청정연료로서 주목 받고 있는 DME를 대량생산하기 위한 1단계법 고정층 촉매 반응기를 해석하기 위해서는 촉매의 유효인자의 고려가 필수적이다. 산업현장에서 주로 사용되는 촉매는 실험실에서 반응속도식의 parameter를 구할때 보다 훨씬 큰 사이즈의 촉매를 사용하며, 이는 촉매 내부에서의 확산저항이 반응기 전체 거동에 큰 영향을 줄 수 있기 때문이다.

따라서 본 연구에서는 고정층 촉매 반응기 내에서 DME 생산을 위한 연속반응일 경우 촉매 유효인자해석을 수행하였으며, 이를 반응기 해석에 적용해 유효인자의 고려가 중요함을 보였고, 최적 운전조건을 찾아내었으며, hybrid 촉매를 사용했을 경우도 가정하여 특성을 조사해보았다.

고정층 촉매 반응기 내에 메탄올합성촉매(CuO/ZnO/Al₂O₃)와 메탄올 탈수촉매(γ -Alumina)의 두가지 촉매를 사용할 수도 있고, 두가지 기능을 한 촉매 내에서 발현할 수 있도록 Hybrid촉매를 사용할 수도 있으므로 기존의 메탄올 합성 및 탈수촉매와 가정을 통한 Hybrid촉매 내부의 유효인자를 계산하였다. 이를 통해 DME 생산을 위한 연속반응에서 첫 번째 반응은 촉매 내부저항에 의해 반응이 둔화되지만, 두 번째 반응이후로는 첫 번째반응의 생성물 또한 확산저항에 의해 원활히 밖으로 빠져나가지 못하므로 반응이 가속될 수 있음을 보였다. 그리고, 이러한 결과가 반응기 해석에 적용되었을 때, CO전환율 및 DME 생산성을 절반이하로 떨어뜨릴 수 있다. Hybrid촉매를 사용하였을 경우, 모든 반응이 단일 촉매 내에서 일어나므로 촉매해석결과에 따라 반응효율이 높아지며, 그에 따라 초기 발열문제가 발생함을 알 수 있었다.