

## 자체 기동형 천연가스 자열개질기 설계

\*구 정보, 김 영애, 권 현지, 곽 인섭, \*\*신 장식

### Design of the Stand-alone Autothermal Reformer for Natural Gas

\*Jeongboon Koo, Youngae Kim, Hyunji Kwon, Inseob Kwak, \*\*Jangsik Sin

본 연구에서는 중-소형 SOFC에 적용할 수 있는 연료 변환 시스템으로 자체 기동 및 독립운전이 가능한 천연가스 자열개질(ATR) 반응기를  $10\text{Nm}^3/\text{hr}$ 급으로 개발하고자한다. 설계된 천연가스 자열개질기는 자열개질 촉매를 코팅한 금속 모노리스형 촉매체를 반응기 내에 장착함으로써 반응열을 신속하게 제거 또는 공급할 수 있는 시스템으로 구성되었다. 이는 금속 모노리스의 뛰어난 열전도 능력에 의해 반응기 내의 촉매층 전체 온도 분포를 균일하게 유지할 수 있는 저에너지형 자열개질 반응기이다. 또한 빠른 기동 특성을 실현하기 위하여 전기 발열식 촉매체(EHC ; Electrically Heated Catalyst)를 장착한 start-up 시스템을 적용하여 천연가스 자열개질 반응기의 신속한 기동과 장치 간편화를 실현하였으며, 합성 syngas의 배열 회수를 위한 최적 열교환 시스템을 설계/적용함으로써 에너지 효율 향상을 도모하였다. 이와 같은 촉매 및 구조 시스템을 가지는 천연가스 자열개질 반응용 소형 연료변환 시스템을 원통형의 이중관 구조로 구성하고, 독립운전 모드로 개발함으로써 소형 SOFC의 연료 변환장치의 적용에 용이하게 하고자 한다.

**Key words** : Stand-alone ATR(자체 기동 자열개질), Natural gas(천연가스), EHC(전기발열식 촉매체), Metal monolith (금속 모노리스)

E-mail : \*kjboon@rtieng.com, \*\*jangsiks@rtieng.com

## 우수한 가역적 이산화탄소 및 수소 저장성능을 가지는 공유결합성 유기적 골격구조체에 관한 다중스케일 접근법을 이용한 연구

\*최 윤정, 최 정훈, 최 경민, \*\*강 정구

### Covalent Organic Frameworks for Extremely High Reversible CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> Uptake Capacity : A Multiscale Simulation Approach

\*Yoon Jeong Choi, Jung Hoon Choi, Kyung Min Choi, \*\*Jeung Ku Kang

We report that the novel covalent organic frameworks (COFs) are capable of reversibly providing an extremely high uptake capacity of carbon dioxide and hydrogen at room temperature. These COFs are designed based on the multiscale simulations approach via the combination of *ab initio* calculations and force-field calculations. For this goal, we explore the adsorption sites of carbon dioxide and hydrogen on COFs, their porosity, as well as carbon dioxide adsorption isotherms. We identify the binding sites and energies of CO<sub>2</sub> on COFs using *ab initio* calculations and obtain the carbon dioxide adsorption isotherms using grand canonical ensemble Monte Carlo calculations. Moreover, the calculated adsorption isotherms are compared with the experimental values in order to build the reference model in describing the interactions between the CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> and the COFs and in predicting the CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> adsorption isotherms of COFs. Finally, we design three new COFs, 2D COF-05, 3D COF-05 (*ctn*), and 3D COF-05 (*bor*), for the high capacity CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> storage.

**Key words** : *ab initio* calculations(제일 원리 계산방법), force-field calculations(힘장이론 계산방법), CO<sub>2</sub> storage(이산화탄소 저장물질), H<sub>2</sub> storage (수소 저장물질), covalent organic frameworks(공유결합성 유기 골격구조), CO<sub>2</sub> adsorption isotherms(이산화탄소 흡착등온선), H<sub>2</sub> adsorption isotherms(수소 흡착등온선)