

Co 촉매 기반 Fischer-Tropsch 합성반응의 탄화수소 사슬길이 분포 예측 모델 개발

곽승호, 박명준*, 배종욱¹, 전기원¹
아주대학교; ¹한국화학연구원
(mjpark@ajou.ac.kr*)

Co 기반 촉매를 사용하는 Fischer-Tropsch 반응의 수학적 모델들 중 대부분은 일산화탄소의 전환율에 초점을 맞추어 탄화수소물(paraffin과 olefin)의 사슬길이 분포를 예측하는데 어려움이 있었다. 본 연구에서는 고정층 촉매 반응기에서 코발트 기반(Ru/Co/Zr-P/SiO₂) 촉매의 메커니즘을 기반으로 kinetic 모델을 개발하여 사슬길이 분포를 예측하고자 한다. 반응 메커니즘은 olefin과 paraffin의 생성 반응에 초점을 두는데, 반응물의 흡착, 표면반응, 생성물의 탈착 중 olefin의 재흡착 가정을 제외한 모든 반응을 비가역적 반응이라고 가정하였고 olefin의 액상조성이 재흡착에 영향을 미친다고 가정하였다. 또한 메탄과 에틸렌의 경우 다른 사슬에 비하여 생성 속도에 실험적으로 큰 차이를 보이므로 별개의 속도상수를 고려하였다. 여러 조건에서의 실험 data를 바탕으로 변수 추정을 실행하여 모델을 완성한 후 변수 민감도 해석을 수행하여 각 변수의 영향을 살펴 보고자 한다.