

## Kinetics modeling for the Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyzed synthesis of methanol

임혜원, 박명준<sup>1,\*</sup>, 채호정<sup>2</sup>, 강석환<sup>2</sup>, 전기원<sup>3</sup>, 정순용<sup>2</sup>  
아주대학교 화학공학과; <sup>1</sup>아주대학교 화공신소재공학부;  
<sup>2</sup>한국화학연구원 석유대체연구센터;  
<sup>3</sup>한국화학연구원 화학기술단1팀  
(mjpark@ajou.ac.kr\*)

메탄올 합성은 CO와 CO<sub>2</sub>를 수소화(hydrogenation)시켜 메탄올과 물을 합성하는 반응으로 지금까지 여러 반응 기작들이 제시되었으나 아직 명확한 해석이 이루어지지 않고 있다. 본 연구에서는 고정층 촉매반응기에서의 메탄올 합성 결과로부터 적합한 속도식 및 반응 속도상수를 결정하고 이로부터 동특성을 포함한 반응기의 특성을 예측하여 보았다. 사용된 실험 데이터는 온도, 공간속도, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>의 분압의 비율을 조절하여 획득하였으며, 다양한 형태의 메커니즘 및 율속단계로부터 반응식을 유도한 뒤 속도 상수 추정을 수행하였다. 가장 오차가 작은 속도식을 결정함으로써 메탄올 합성을 위한 반응 기작을 제안하였으며 반응 조건 및 반응기 변수가 반응기 동특성에 미치는 영향을 살펴보았다.