

Tetralin 수소화 및 탈수소화 반응의 열역학적 특성분석

박찬현, 조계성, 김성호, 서혜련, 이용걸*
단국대학교 화학공학과
(yolee@dankook.ac.kr*)

본 연구는 중질유분의 수첨분해반응을 고려함에 있어서 모델화합물인 tetralin의 수소화 (decalin) 및 탈수소화(naphthalene) 반응에 대한 열역학적 평형조성 분석을 목적으로 한다. 열역학적 평형 조성을 산출을 위하여 상용 공정모사기인 Aspen Plus 2006 package 상에 Gibbs 자유 에너지 최소화기법을 적용하였다. (Block : RGibbs, EOS: PSRK, Pressure: 1-200 atm, Temp: 300-900K) Naphthalene의 경우 1atm, 600K 이상 조건에서는 가장 안정한 분포를 이루고, 압력이 증가함에 따라 수소화반응이 촉진되어 분포가 감소되었고, 수첨분해 운전조건에 해당하는 150atm, 723K조건하에서는 10%이내의 조성분포를 이루었다. 또한 반응온도가700K이하로 낮아지면 150기압하에서는 모두 전환됨을 확인하였다. Decalin 의 경우 cis 대비 trans 형 구조가 보다 안정하여 95%이상 우세하게 분포한다. 상압에서는 550K 이상에서 탈수소화가 우세하여 decalin의 농도분포가 사라지지만, 수소압력이 증가함에 따라 수소화 촉진에 따른 decalin의 분포가 증가되어 150기압 720K 조건하에서 70% 이상의 분포를 확인하였다. 한편 tetralin의 경우 상압조건하에서는 400K이상에서 평형농도 증가가 관찰되는데, 이후 반응온도가 520K 이상으로 증가하면 naphthalene으로 탈수소화가 거동이 관찰되어 tetralin의 열역학적 평형특성은 수소화 및 탈수소화 반응에 대한 중요한 잣대가 됨을 입증하였다.