

## Asphaltene aggregation in a solvent deasphalting process using molecular dynamics simulation at various operating conditions

박준우, 이기봉<sup>†</sup>

고려대학교

(kibonglee@korea.ac.kr<sup>†</sup>)

용매탈아스팔트화 공정은 공급물로 감압잔사유와 같은 중질유분, 용매로 C3~C6의 알케인 용매를 사용하여 용매에 녹는 탈아스팔트화 오일 성분을 탑상으로 추출하고 용매에 녹지 않는 아스팔텐 성분은 탑저로 제거하는 공정이다. 추출용매의 아임계상에서 운전되며 온도가 낮을수록, 용매 대 원료 질량비가 높을수록 추출되는 탈아스팔트화 오일의 수율이 높아지지만 품질이 낮아지는 특징이 있다. 하지만 이런 현상에 대한 원인은 아직도 연구 진행 중이다. 대략적으로는 아스팔텐 및 레진 분자들이 응집현상을 일으키고 응집된 분자들이 점점 커져 탈아스팔트화 오일과 상분리가 된다고 알려져 있다. 하지만 응집현상은 매우 짧은 시간에 평형에 도달하여 실험으로는 자세한 진행과정을 알기 어렵다. 용매 탈아스팔트화 공정에서 아스팔텐의 응집현상을 자세하게 관찰하기 위해서 이번 연구에서는 분자 동역학을 이용하여 탈아스팔트화 공정의 추출공정을 시뮬레이션 하였다. 원료 오일을 단순화한 12가지의 분자들과 노말 펜탄 분자들을 넣어 시스템을 구성하고 변수로 온도와 용매 대 원료 질량비를 선정하였다. 분자 동역학 시뮬레이션을 통해 실험 결과와 마찬가지로 온도가 낮을수록, 용매 대 원료 질량비가 높을수록 추출되는 탈아스팔트화 오일의 수율이 높아지고 아스팔텐 응집현상이 약화되는 것을 정성적으로 확인하였다.