

Kinetic Modeling and Process Design of Shale gas Aromatization using Mo/ZSM-5 in Packed Bed Catalytic Reactor

조지영, 김승우, 나종걸^{1,†}서울대학교; ¹이화여자대학교(jgna@ewha.ac.kr[†])

Mo 도핑된 제올라이트 촉매인 Mo/ZSM-5를 사용하는 Shale gas to BTX 전환 반응기의 kinetic modeling에 관련된 연구를 수행하였음. Shale gas to Aromatics에 관한 연구는 1970년대부터 활발하게 진행되었으나 그 세부 kinetic mechanism의 정론이 존재한다고 보기 어려우며, 기존의 논문들은 주로 microkinetic 기반으로 설계되었기에 CFD 혹은 공정스케일 모사에서 사용되기 어렵다는 문제가 있었음. 더불어, Mo/ZSM-5 의 경우 20세기까지는 LAS인 Mo site가 Ga/ZSM-5 에서의 Ga과 같이 Dehydrogenation 반응을 유도하여 Ethylene을 생성하고, 생성된 Ethylene 은 BAS에서 Oligomerization & Cyclization 된다고 보는 것이 일반적이었으나, 최근의 연구들에서는 Mo site가 Alkane의 radical 생성을 유도하는 radical 기반 mechanism이 제시되고 있음.

본 연구 발표에서는 Mo/ZSM-5 를 사용한 Shale gas aromatization 반응을 radical 기반, dehydrogenation 기반 mechanism을 통해 이론적으로 잘 묘사한 lumped kinetic model을 제시할 것이고, 그것을 기반으로 PFR 반응기에서의 실험 결과를 사용하여 Parameter Estimation을 진행하여 공정 묘사까지 진행하는 것을 다룰 것임.