

Automated process design and techno-economic analysis for the electrochemical ammonia production

김주연, 최웅¹, 이수현, 황윤정¹, 나일 맥 다우웰², 나종걸[†]
이화여자대학교; ¹한국과학기술연구원; ²임페리얼컬리지런던
(jgna@ewha.ac.kr[†])

암모니아는 비료 또는 냉매로 주로 이용되고 있으며, 최근에는 수소 저장을 위한 캐리어 물질로써 주목받고 있다. 현재 암모니아의 대부분은 질소와 수소를 고온고압에서 반응시키는 Haber-Bosch (HB) 공정을 통해 생산되고 있다. 하지만, 해당 공정이 수반하는 온실가스 배출 문제와 화석연료 의존성으로 인해 이를 대체할 수 있는 공정에 대한 논의가 이루어지고 있다. 최근 물과 질소원 (질소기체, 질산염, 아질산염 등) 그리고 신재생에너지로부터 암모니아를 생산하는 전기화학적 질소 환원 반응 시스템이 촉매 개발 수준에서 보고되고 있다. 하지만 질소원의 다양성과 전기화학 공정 구성요소 (전극, 전해질, 분리막 등)의 복잡성으로 인해 공정수준의 경제성 분석을 통한 기술 평가가 이루어지지 못했다. 본 연구에서는 다양한 질소원의 전기화학적 환원반응을 통한 암모니아 생산공정에 대해 반응시스템 및 분리시스템을 포함한 전 공정 초구조 (superstructure)를 구성하고 이를 기반으로 기술경제성평가를 수행하였다. 자동 공정합성 기법을 이용하여 수천개의 공정 후보에 대한 공정모델을 자동으로 생성하고 이를 기반으로 전류밀도, 페러데이효율, 과전압 등에 따른 경제성 전역민감도를 평가하였다. 특히, 전기화학적 질소산화를 통한 질산염생산과 질산염환원을 통한 암모니아 생산을 단일반응시스템에서 구현하는 최적 설계에 대한 논의도 진행한다.