

열역학적 평형계산을 통한 바이오가스 수증기 개질 반응의 특성 연구

김지은, 김진희, 전경원, 장원준[†]

경남대학교

(wjjang@kyungnam.ac.kr[†])

본 연구에서는 수소 생산을 위한 바이오가스 수증기 개질 반응의 열역학적 평형 계산에 관해 연구하였다. 열역학적 평형은 Gibbs 자유에너지 최소화 기법을 이용해 계산하였다. 산화제/메탄의 비 $((\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2)/\text{CH}_4 = 1.0 \sim 1.6)$ 와 온도 $(500 \sim 1000 \text{ }^\circ\text{C})$ 를 변수로 하여, CH_4 , CO_2 및 H_2O 전환율, H_2 , CO 및 탄소침적 수율, 생산된 합성가스의 H_2/CO 비를 계산하였다. 최적 반응 조건 선정을 위해서는 투입 수증기량, 전환율, 수율, 탄소침적을 고려하였다. 열역학적 평형 계산 결과, CH_4 및 CO_2 전환율은 산화제/메탄의 비 $((\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2)/\text{CH}_4)$ 에 관계없이 온도가 증가함에 따라 증가하였으며 이는 바이오가스 수증기 개질 반응의 강한 흡열 특성에 기인한 것이다. H_2 수율은 온도가 증가함에 따라 증가하였으나 $(\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2)/\text{CH}_4$ 비 1.0과 1.2의 경우 $800 \text{ }^\circ\text{C}$ 이상에서 역수성가스전환 (Reverse water gas shift) 반응 발생에 의해 H_2 수율이 감소하였다. 탄소침적은 온도 및 $(\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2)/\text{CH}_4$ 비가 증가함에 따라 탄소침적 형성량이 감소하였다. 특히, $(\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2)/\text{CH}_4$ 비가 1.4와 1.6일 때, 각각 $750 \text{ }^\circ\text{C}$ 와 $700 \text{ }^\circ\text{C}$ 에서부터 탄소침적이 일어나지 않는 것을 확인하였다.