

PC-SAFT 상태방정식을 이용한 산성가스와
아민 수용액계의 기액 상평형, 엔탈피 및 밀도에
관한 연구

박진아^{1,2}, 신윤수¹, 빈영욱¹, 김권일¹, 이창하², 박종기^{1,*}

¹한국에너지기술연구원; ²연세대학교

(jngkprk@kier.re.kr*)

가스전에서 나온 천연가스에 포함되어 있는 중요 불순물 중 이산화탄소와 황화수소 성분의 산성가스는 액화과정에서 freezing 문제를 야기 시킬 수 있으며, 파이프라인을 통하여 사용자에게 공급되는 과정에서 수증기와 반응하여 carbonic acid 형태로 존재하여 부식을 발생 시키기 때문에 반드시 사전에 제거해 주어야 한다. 산성가스 제거 공정 중 흡수공정 설계를 위하여 산성가스(주로 이산화탄소 및 황화수소)와 아민 수용액 계의 상거동을 해석할 수 있는 모델이 필요하다.

상태방정식을 이용할 경우 화학공정 설계에 필요한 물성인 평형물성 (Equilibrium property), 열적물성 (Calorimetric property), 그리고 부피물성 (Volumetric property)을 계산할 수 있으므로 최근에는 활동도계수 모델에 비하여 상태방정식 모델이 많이 이용되고 있다. 최근까지 주로 Electrolyte NRTL 모델을 이용하여 공정을 해석하였으나 상평형 외에 열적 특성과 혼합물의 밀도에 대한 결과를 제공하지 못하는 단점이 있다.

본 연구에서는 통계역학에 기초한 상태방정식인 Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory(PC-SAFT) 모델을 이용하여 해당 계의 상평형 계산을 시도하였다. 또한 계의 열적물성(엔탈피) 및 밀도 예측에 관하여 연구하였다.