선택적 일산화탄소 메탄화 반응을 위한 니켈촉매의 반응 kinetics 연구

김우현, 윤왕래*
한국에너지기술연구원
(wlyoon@kier.re.kr*)

고분자전해질연료전지의 백금 전극촉매는 미량의 일산화탄소(CO)에 의해 쉽게 피독되므로 연료 개질기를 통해 생산된 수소에 포함된 CO 농도를 10 ppm 이하로 유지해야 한다. 이를 위한 선택적 CO 메탄화 반응은 수증기 개질 반응 및 수성가스전이반응을 거친 개질 가스의 수소와 1 vol. % 가량의 CO를 선택적으로 반응시켜 메탄을 생성하여 추가적인 반응물의 주입 없이 CO를 효과적으로 제거 할 수 있다. 본 연구에서는, 선행 연구를 통해서 우수한 촉매 활성 및 CO 선택도를 보여준 Ir/Ni-MgO/γ-Al_2O_3 촉매를 사용하여 예상되는 반응들(CO 및 CO_2 메탄화 반응, 역수성가스전이반응)의 kinetics에 대한 연구가 수행되었다. 반응메카니즘을 반영한 모델의 개발을 위해, Langmuir chemisorption 이론에 기반한 반응속도식을 사용하였고 150 - 250 ℃의 반응 온도 범위에서 얻어진 데이터로 유전 알고리즘을 이용하여 반응속도식들에 포함된 고유반응속도상수들(intrinsic kinetic parameters)이 결정되었다. 따라서, 제안된 수학적 반응 모델은 촉매반응기의 최적 설계 및 운전조건의 결정을 위한 기초자료로 활용 가능하다.