

흡착제의 설계인자 제시를 위한 흡착 데이터베이스의 설계

김현준, 이상수, 설용진, 김홍수*, 주국택*, 배준수*, 유윤종*, 한문희*
연세대학교 화학공학과, 한국 에너지기술 연구소*

Design of adsorption database for design factor of adsorbate

H.J.Kim, S.S.Lee, Y.G.Shul, H.S.Kim*, K.T.Chu*, C.S.Bae*, Y.J.Yoo* and M.H.Han*
Dept. of Chem. Eng. Yonsei Univ., KIER*

서론

산업구조가 고도화되고, 인구가 도시로 집중됨에 따라 환경이 급속한 속도로 오염되고 있다. 뿐만 아니라, 쾌적한 환경을 요구하는 사회적 인식이 고조되고 있어 환경오염문제에 대한 대책이 매우 시급한 편이다. 최근 이러한 환경오염물질로 가장 보편적으로 거론되고 있는 것이 휘발성 유기화합물(Volatile Organic Compounds : VOC)이다. VOC는 벤젠, 할로젠 화탄화수소 등을 포함하고 있어 호흡기 질환, 암 등의 질병을 유발시킬 수 있으며, 토양 및 수질의 오염마저 일으키고 있다. 게다가, 오존의 전구물질로 작용하여 오존에 의한 산림 고사나 질병 등의 피해를 가속화시키고 있다.

현재 VOC 물질을 제거하기 위해 가장 많이 사용되고 있는 방법이 흡착법으로, 촉매 산화법이나 직접 연소법에 비하여 낮은 설비비와 운전비로 비교적 낮은 온도의 공정에 설치되고 있다. 흡착법은 활성탄과 같은 무극성흡착제를 주로 쓰며 물리적흡착에 의하여 VOC 물질을 제거하는 물리적흡착과 침착탄과 같이 촉매 등과 접촉시켜 어떤 화학반응을 진행하는 화학적 흡착작용을 이용하는 경우가 있는 등 광범위하게 이용되고 있다. 또한, 이 방법은 배출가스 중 오염물질의 농도가 극히 낮거나 오염물질이 비가연성일 경우에도 사용할 수 있으며, 상온에서 처리가 가능하기 때문에 에너지 절약 및 운전비용, 설비투자비 등의 관점에서 매우 바람직한 제거기술이다.

본 연구는 이러한 VOC 제거용 흡착제의 효과적인 선정을 위하여 Data base를 구축하고, 이를 바탕으로 VOC 배출 조건에 적당한 흡착제 및 공정을 제안할 수 있도록 한하는 것을 목적으로 한다. 사용된 Data base 프로그램으로는 Microsoft사의 Access95를 사용하였으며, 문헌에 의한 결과와 실험에 의한 결과로 구성되어 흡착제 선정 및 개발을 위한 주요 설계인자를 제시하고자 한다.

데이터베이스의 구조

MS Access는 Windows 환경을 충분히 소화하는 동시에 다른 프로그램들과 파일이나 자료를 공유하게 설계되어 있다. 특히 멀티스레드, Jet 3.0 엔진과 함께 진정한 32비트 데이터베이스 관리 시스템으로 데이터간의 관계형 모델을 가장 강력하게 지원하는 것으로 알려져 있다. MS Access의 주요 특징은 다음과 같다.

- 기존의 대화식 database를 custom database application
- 유연성있는 Custom database application
- 용이한 Data structure 구성
- Visual database 구축
- Internet에서의 data 편집 가능
- 설계 프로그램과의 높은 호환성

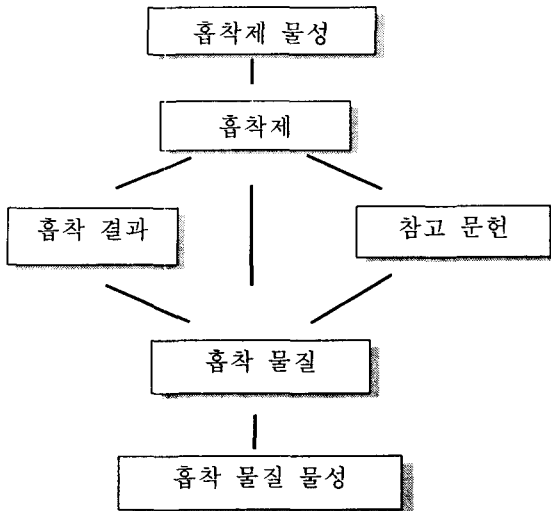


그림 1. VOC Rotor 설계용 Data Base 구조

MS Access로 제작된 흡착 데이터베이스는 Visul Basic 형태의 Form을 이용하여 사용자 편의의 Search Engine을 구축하였고, 데이터 입력을 위한 Table에서는 그림 형태의 데이터와 문자 형태의 데이터가 모두 입력 가능하도록 하였다. 전체적인 Data structure는 그림 1과 같다.

결과

Main Menu는 그림 2와 같이 흡착제와 흡착물 두 개의 검색어를 넣을 수 있도록 되어 있으며, Search Query 옆의 단추를 통해 흡착제 혹은 흡착물의 물성 자료를 볼 수 있다.

흡착제(Adsorbent) Query에서 검색어를 사용하여 흡착제에 대한 structure, pore diameter, composition 그리고, usage 등에 대한 정보를 얻을 수 있다. 최종적인 흡착 데이터와 연결되어 있어 최종 흡착 데이터베이스에서 관련 흡착제의 기본적인 구조 및 기공 크기 등을 동시에 얻을 수 있다. 흡착물(Adsorbate) Query에서는 흡착에 영향을 줄 수 있는 인자뿐만 아니라, 끓는점 및 임계점 등의 일반적인 특성에 대한 정보를 함께 제공된다. 흡착제의 경우와 마찬가지로 최종적인 흡착 데이터와 연결되어 흡착물의 주요 성질을 흡착 특성과 연관지어 확인할 수 있다.



그림 2. Adsorption database의 start up 화면

흡착제와 흡착물의 물성에 대한 결과는 'Adsorption Detail'에서 흡착제와 흡착물의 흡착에 미치는 영향 등을 살펴보기 위한 것이다. 흡착 특성을 비교하기 위한 가장 일반적인 데이터로 등은 흡착 평형선과 이론적인 흡착식, 흡착 용량 등을 표시하였으며, 데이터 입력시 중요한 사항이라면 'Etc'를 활용하도록 하였다. 이미 언급한 바와 같이 흡착제 및 흡착물의 물성은 흡착 특성 데이터와 연결되어 있으며, 흡착 특성과 관계된 물성을 제공하도록 하였다. 흡착 특성과 물성을 비교함으로써, 흡착제 및 흡착물의 어떠한 특성이 흡착에 영향을 미치는지 확인할 수 있다. 따라서, 흡착물에 대한 흡착제 선정의 기준을 제공해줄 수 있으며, 이에 대한 흡착 등온선 등의 데이터를 활용할 수 있다.

흡착 설계인자의 제시

본 연구에서 구축한 Adsorption Database는 특정 물질의 흡착을 위한 흡착제의 설계인자 제시를 목적으로 한다. 따라서, 위에서 설명한 각각의 데이터보다는 이 데이터들을 통해 어떻게 최적 흡착제를 선정 및 설계할 수 있는가 하는 것에 더 초점이 맞춰져야 할 것이다. 그림 3은 흡착제의 설계인자 제시를 위한 흐름도이다.

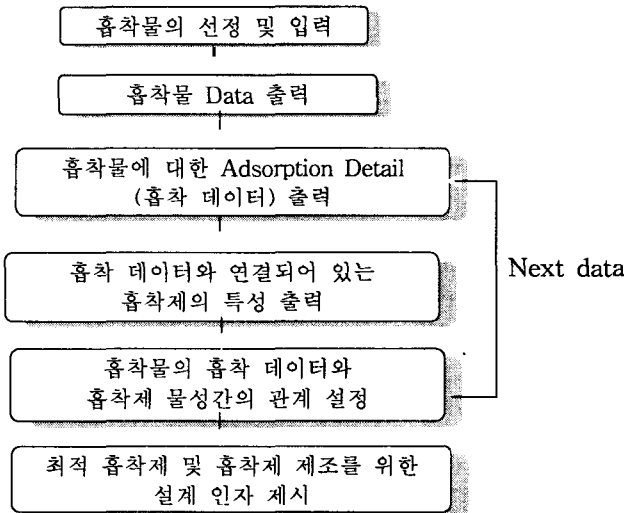


그림 3. 흡착제의 설계인자 제시를 위한 Adsorption Database의 흐름도

실행예: xylene 흡착

먼저, 'Main Menu'에서 xylene의 물성을 살펴본다. ortho, meta, para에 대한 자료가 나오고, 각각의 분자량, 끓는점, kinetic length 등이 나온다. 각각에 대한 결과는 표 1과 같다.

표1. xylene의 물리화학적 물성

| Name | Chemical Composition | MW (g/mol) | Minimum Diameter (nm) | Length (nm) | BP (oC) | MP (oC) | Critical Temp (oC) | Critical Pressure (atm) | Flash Point (oC) |
|----------|---|------------|-----------------------|-------------|---------|---------|--------------------|-------------------------|------------------|
| o-xylene | C ₆ H ₄ (CH ₃) ₂ | 106.16 | 0.625 | 0.84 | 144.41 | -25.19 | 357.15 | 36.8 | 17 |
| m-xylene | C ₆ H ₅ (CH ₃) ₂ | 106.16 | 0.625 | 0.85 | 139.1 | -47.87 | 343.85 | 34.89 | 25 |
| p-xylene | C ₆ H ₅ (CH ₃) ₂ | 106.16 | 0.575 | 0.89 | 138.35 | 13.26 | | | |

xylene에 대하여 Adsorption Detail을 검색해보면, Y-Zeolite, X-Zeolite, ZSM-5 세 종류의 흡착제에 대한 데이터가 있으며, 각각은 모두 흡착 등온선에 대한 실험 결과를 포함하고 있다. 온도에 따라 흡탈착량이 변화하는 것과 동일 온도에서 p-xylene과 m-xylene 사이에 흡탈착 곡선에 차이가 있는 것을 확인할 수 있다. X-zeolite의 경우 150℃에서 m-xylene의 흡착량이 더 크지만, Y-Zeolite의 경우 250~300℃에서 p-xylene의 흡착량이 더 크게 나타나고 있어 흡착제 종류에 따라 흡착 특성이 바뀌는 것을 볼 수 있다. X-Zeolite는 낮은 상대 압력에 대하여 높은 흡착량을 가지나, 고압으로 가더라도 흡착량의 증가는 두드러지지 않는다. 반면, Y-Zeolite는 250℃에서 p-xylene과 m-xylene의 흡착량 사이에 차이가 크게 나타난다. 따라서, 주어진 흡착 데이터로부터 다음과 같은 흡착 인자를 얻을 수 있다.

- ① 공정의 xylene 상대 압력이 낮은 경우 X-Zeolite가 유리하다.
- ② 높은 선택도를 원하는 경우 250℃, 높은 압력에서 Y-Zeolite가 유리하다.

위의 경우, Zeolite의 형태와 조업 온도 및 압력이 xylene 흡착을 위한 흡착제 선정의 주요 인자가 될 것으로 보인다. 지속적인 데이터의 보충을 통해 보다 발전된 흡착제의 설계가 가능할 것으로 기대된다.

참고문헌

1. C.Mellot, E.Pilverdier, J.Bellat, D.Espinat, Langmuir, 11, 1726 (1995)
2. J.Bellat, M.Simonot, Zeolites, 15, 219 (1995)
3. C.Nguyen, C.G.Sonwane, S.K.Bhatia, D.D.Do, Langmuir, 14, 4950 (1998)
4. "Inside secrets Access 97: Developer's handbook", P.Litwin, K.Getz, Mike Gilbert, 삼각형 (1997)
5. "Access 97 Macro & VBA handbook", Novalis Susan, 삼각형 (1997)