

### 통합적 물질흐름분석을 통한 폐 TNT유래 고부가가치 화합물 전환공정의 동역학 모사 및 최적화 설계

정재원, 이준석, 조재훈, 조진구, 김상용\*  
한국생산기술연구원  
(sykim@kitech.re.kr\*)

본 연구에서는 폐탄약으로부터 추출된 TNT를 시작물질로 하여 의약품 중간체인 Phloroglucinol의 합성 반응공정을 연구 대상 공정으로 정하였으며, 이 중 3 관능기 전환반응인 TNBA로부터 TABA로의 합성 공정의 제시를 통해 결정된 반응속도 상수로부터 시간에 따른 화학물질들의 농도 변화를 예측함으로써 공정의 동역학적 모사 및 그 결과로부터의 해석을 진행하였다. 이러한 해석을 바탕으로 lab-scale의 공정을 pilot-scale로 scale-up할 수 있는 근간을 제공하였으며, 그 때의 공정 제한변수들을 제어함으로써 공정 정체요인(bottleneck) 분석을 4가지 시나리오에 따라 제안하여 최적화된 공정을 설계할 수 있었다. 또한 경제성 평가분석을 도입하여 최적화된 공정에서의 생산물의 예상단가를 추정해낼 수 있었으며, 추가적으로 TNT를 시작물질로 한 내마모성 코팅제(TFB, DAFB)에 대한 공정모사 역시 가능하였다. 이러한 최적 공정의 확립으로부터 폐 TNT를 시작물질로 한 고부가가치 화합물의 생성을 유도함으로써 폐기물 처리의 청정성 확보 및 합성 전환과정의 공정에 사용되는 에너지□자원을 최적화 하는 것을 목표로 하였다.