

PC-SAFT 상태방정식을 이용한 산성가스와 아민 수용액 계의 기액 상평형 연구

신윤수^{1,2}, 조정호², 박종기^{1,*}, 빈영욱¹, 이재연¹, 박진아¹

¹한국에너지기술연구원; ²공주대학교

(jngkprk@kier.re.kr*)

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. 근래에 이산화탄소 포집기술에 대하여 관심이 집중되고 있으며 이산화탄소 포집 기술 중 하나인 아민 수용액을 이용한 흡수공정에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 아민 흡수공정 설계를 위하여 산성가스 (주로 이산화탄소 및 황화수소)와 아민 수용액 계의 상거동을 해석할 수 있는 모델이 필요하다. 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 PC-SAFT 모델을 이용하여 해당 계의 상평형 계산을 시도하였다. 또한 계의 열적물성(엔탈피) 및 밀도도 예측하였으며 문헌에 나타난 실험자료와 비교하였다.