

방향족 화합물의 요오드화(Iodination)를 위한 다관식 반응기(multi-tubular reactor)의 최적 설계

김한석*

SK케미칼 주식회사 공정개발 연구실

(einstein@sk.com*)

벤젠 또는 나프탈렌과 같은 방향족 화합물에 할로젠(브롬, 염소, 요오드 등)을 반응시켜 방향족 할로젠(Halogenated aromatics) 화합물을 제조하는 기술은 여러 상업적 분야에서 그 가치를 인정 받아왔다. 최근 그 용도가 폭넓게 전개되고 있는 p-DIB(para-diiodobenzene)는 PPS (Polyphenylenesulfide), OLED chemicals, Pharmaceuticals 의 원료로 사용되는 고부가가치의 화합물로서 본 연구에서는 이의 상업적 생산을 위하여, 전환율과 파라 이성질체의 선택도가 높으면서 촉매의 활성이 안정적으로 유지되도록 반응기를 최적 설계하는 데 그 목적이 있다. 본 연구에서 대상으로 한 벤젠의 요오드화 반응은 제올라이트 촉매를 이용하여 산소 분위기 하에서 기상반응(Vapor phase reaction)으로 수행되었으며, 산화반응에 의한(Oxyiodination) 발열반응이다. 따라서 반응기 내에서 발생하는 반응열을 효율적으로 제거하지 않으면 폭주반응을 야기하게 되고 이는 유기물의 급격한 산화반응과 같은 이차 부반응을 촉진시킴으로써, 폭발과 같은 위험한 결과를 초래할 수도 있다. 이에 본 연구에서는 반응 및 열교환 관련 예측은 gPROMS (PSE사, 영국)를, Shell side의 유동현상 예측은 CFD를 각각 이용하여 개별 모델을 구성한 후, 이들을 결합한 Hybrid reactor model을 개발하여 최고의 생산성을 나타내면서 폭주반응을 방지할 수 있는 안전한 반응기를 설계하게 되었다.