

Dynamic simulation of loop reactor for polypropylene

김신혁¹, 백승원^{1,2}, 홍성욱¹, 오민^{1,2,†}¹한밭대학교; ²화학생명공학과(minoh@hanbat.ac.kr[†])

폴리올레핀계 고분자의 수요는 해마다 증가하고 있으며, 그 수요에 맞춘 공급지는 아시아시장으로 편향되고 있는 가운데, 시뮬레이션을 통한 고분자공정의 최적화된 설계기술확보는 항상 요구되었다. 이에 본 연구는 가장 보편적인 폴리프로필렌 루프반응기를 수학적으로 상세히 설계하고 동적모사를 실시하여 반응기 내부거동과 생성되는 고분자의 특성 및 효율을 예측하였다. 대상반응기는 지글러-나타 촉매를 사용하는 액상고분자중합 반응기로서 얇고 긴 루프반응기에 높은 순환비를 부여하고, 냉각튜브를 설치하여 고분자 중합에 의한 높은 반응열과 압력강하를 제어한다. 이러한 물리적 표현을 위해 반응기는 1차원 플러그흐름반응기로 가정되었고, 냉각장치는 반응기를 감싸는 병류식 열 교환기로 묘사되었다. 또한 반응기 앞 단에 혼합기를 배치하여 순환비를 적용하였으며, 고분자중합은 개시 및 성장, 이동, 정지의 단위반응을 모두 구현하여 정확한 고분자사슬성장을 계산하였다. 반응기의 수학적 모델은 물질수지 및 에너지수지, 운동량수지 식으로 수립되었고, 이에 내부의 물리-화학적 변화(농도, 온도, 밀도, 유속)를 예측할 수 있었다. 수학적 모델은 고분자 특성이 직접적으로 영향을 끼쳐 반응기특성이 수반된 고분자성질들을(MW, MWD) 계산할 수 있었다.

감사의 글: 본 연구는 한밭대학교 LINC사업단의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다.