

## 메탄올 카보닐레이션 반응의 반응속도 연구 및 초산 제조 공정모사

우동욱, 장진성, 정영민, 한명완<sup>†</sup>

충남대학교

(mwhan@cnu.ac.kr<sup>†</sup>)

초산(Acetic Acid)은 정밀화학 제품의 원료부터 용제, 염료 등까지 다양한 화학 산업에서 광범위하게 사용되는 화학물질이다. 초산을 생산하는 주된 반응으로 CO와 메탄올(Methanol)이 반응하여 초산이 되는 메탄올 카보닐레이션 반응과 메틸 아세테이트와 물이 초산과 메탄올로 반응하는 가역반응으로 이루어진다. 이 반응은 메틸아세테이트 가수분해 반응, 에탄올 카보닐레이션 반응, 메탄화 반응, 수성가스 전환 반응 등의 다양한 부반응들이 존재한다. 하지만, 기존에 메탄올 카보닐레이션의 반응속도 모델들은 부반응에 대한 영향을 고려하지 않았다. 이 부반응은 초산생성 수율을 급격히 낮출 수 있는 반응들로 이 영향에 대한 연구가 반드시 필요하다. 따라서 이 연구에서는 로돕 complex 촉매를 이용한 메탄올 카보닐레이션 반응과 부반응에 대한 kinetics를 구하기 위해 200cc 회분식 반응기를 사용하여 실험을 진행하였으며, 시간에 따라 샘플을 채취하여 부반응과 정반응의 영향을 관찰하였다. 또한 수집한 실험결과를 바탕으로 반응모델을 만들었으며, 다목적 최적화 함수를 이용해 반응속도 모델을 도출하였다. 이를 바탕으로 효율적인 초산제조공정을 제안하였고 공정모사를 통하여 성능을 확인하였다.