

초산 생산을 위한 반응증류 공정 모델링 및 시뮬레이션

우동욱, 장진성, 한명완[†]

충남대학교

(mwhan@cnu.ac.kr[†])

초산(Acetic Acid)은 정밀화학 제품의 원료로 부터 용제, 염료 등까지 다양한 화학 산업에서 광범위하게 사용되는 화학물질이다. 초산을 생산하는 주된 반응은 CO와 메탄올(MeOH)이 반응하여 초산이 되는 메탄올 카보닐레이션 반응과 메틸 아세테이트와 물이 초산과 메탄올로 반응하는 가역반응으로 이루어진다. 메탄올 카보닐레이션 반응은 촉매와 메틸요오드의 농도에 비례하는 것으로 알려져 있다. 또한 평형 반응은 낮은 반응 평형상수를 갖기 때문에 일반적으로 높은 초산 수율을 얻기 위해서는 큰 체류시간이 필요하다. 반응증류 공정은 반응과 증류가 동시에 일어나기 때문에 반응영역에서 메틸요오드의 농도를 높게 유지하여 빠른 반응속도를 얻을 수 있다. 같은 이유로 반응영역에서 메틸 아세테이트의 농도를 높게 유지하여 반응 평형점이 초산 생성 방향으로 이동시키는 것이 가능하다. 반응증류는 강한 발열반응인 메탄올 카보닐레이션의 반응열을 증류에 이용할 수 있기 때문에 에너지 효율 면에서도 유리하다. 본 연구에서는 로돕 complex 촉매를 사용한 실험으로부터 얻어진 두 반응의 kinetics를 바탕으로 다양한 반응증류 구조에 대한 공정 모델링 및 모사를 진행하였다.