

## 초산 생산을 위한 루프 반응기 모델링 및 시뮬레이션

우동욱, 정영민, 박종현, 장진성, 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. 루프 반응기는 기체, 액체, 고체간의 접촉 효율이 높고, 교반장치가 필요없으며, 반응열을 쉽게 제거하여 반응온도를 정밀하게 제어할 수 있는 장점이 있다.

본 연구에서는 로듐 complex 촉매를 이용한 메탄올 카보닐레이션 반응의 kinetics를 구하기 위해 200cc 회분식 반응기를 사용하여 실험을 진행하였으며, Aspen을 이용한 모사결과와 비교하여 반응속도식을 구하였다. 또한 루프 반응기를 모델링하였고 모사를 반응기의 특성을 파악하였다.