일반강연 2-4

막을 이용한 상이동 촉매 반응기의 성능해석

송철한, 홍창식*, 최창균
서울대학교 공과대학 화학공학과
* (주) 동양시멘트 공정개발 연구실

Performance Analysis for Phase Transfer Catalyzed Reactor Using Membrane

Song, C.H., Hong, C.S. and Choi, C.K.

1. 서론

상호 불용성인 용매에 녹아있는 반응물들 간의 반응은 각 물질이 상 경계면을 뛰어 넘기가 어려워 매우 느린 속도로 진행된다. 그러나 상호 불용성인 비균질계에 상이동 촉매라는 제 3의 물질을 첨가하면 반응은 급격히 향상된다[1, 2]. 따라서 본 연구에서는 클로로벤젠 상의 브로모 옥탄이 TBABr(Tetra Butyl Ammonium Bromide) 이온 촉매의 존재 하에 수용액상의 요오드 이온과 반응하는 평판형 막반응기를 대상으로 수치모사를 수행하여 그 결과를 Stanley와 Quinn[3]의 실험값 및 수치모사치와 비교하였으며, 막 반응기의 모듈 선택, 설계 및 운영, scale-up 시 고려되어야 할 사항들을 탐색연구하여 보았다.

2. 수치모사

지배 방정식과 초기-경계 조건들은 특성변수들을 통해 무차원화되고, 이렇게 얻어진 편미분-상미분 방정식 및 초기-경계 조건들은 정규 섭동(regular perturbation) 법에 의해 상미분 방정식의 해를 구한 후, 수치해석 방법인 MOL(Method Of Line) 법에 의해 편미분 방정식들의 해를 구하므로써 전체적인 해를 구할 수 있다[4]. 본 연구에서는 IMSL Library의 DGEAR 루틴을 이용하여 미분 방정식들을 적분하였다.

3. 결과 및 검토

본 연구에서는 Stanley와 Quinn의 모델을 포함한 몇 개의 보다 정교한 모델들을 사용하여 그 결과들을 그들의 실험값 및 수치해석치와 비교하였다. Figure 1은 본 연구에서 고려된 모델들에 의해 얻어진 결과와 Stanley와 Quinn의 수치모사치 및 실험값들과의 비교를 보여준다. 본 연구에서 고려된 모델들은 다음과 같다.

(a) 채널에서 확산저항이 있는 가역반응
(b) 채널에서 확산저항이 없는 가역반응
(c) 채널에서 확산저항이 있는 비가역반응
(d) 채널에서 확산저항이 없는 비가역반응

(e) Stanley와 Quinn의 모델

Stanley와 Quinn의 수치해석값들은 본 연구의 결과와 많은 차이를 나타냈으며 본인의 실험값과도 상당한 차이를 보이는 것이었다.

수치모사를 통해 막반응기 모듈 선택 및 설계, 운영 조건의 탐색, scale-up 시 고려되어야 할 몇 개의 무차원 수들(체류시간 ω, 막의 두께 Da, 수용액상-유기상 공급유량비 FR*, 막의 면적 및 채널의 깊이 Λ 등)을 변화시키며 그 영향을 조사하였다. Figure 2는 막 면적과 채널 깊이의 특성을 나타내는 무차원수 $\Lambda(D^{ip}\varepsilon A/q^{org}H\alpha)$가 어떤 값을 가질 때, 막의 두께를 나타내는 무차원수 $Da(\alpha^2 k_f [RX_o] \delta^2/D^{ip})$가 증가함에 따라 전환율이 증가될 수 있음을 보여준다. 다시 말해 촉매의 물질전달이 활발할 경우 막 자체가 효과적인 반응기의 역할을 하므로 체류시간을 일정하게 할 때, 막의 면적을 늘리고 채널의 깊이를 줄이면 전환율은 증가된다. 또한 수용액상-유기상 공급유량비 FR*에도 최적값이 존재하였다.

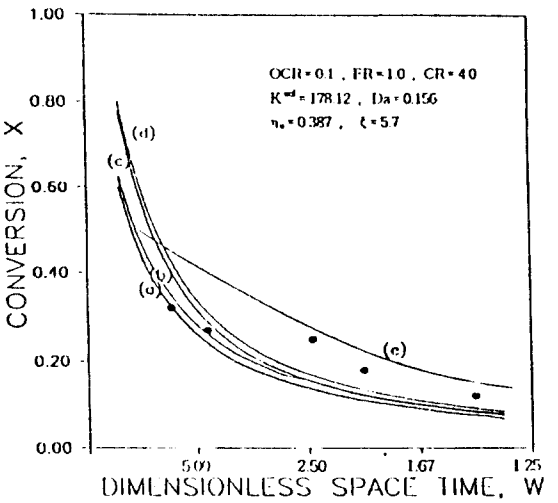

Fig. 1. Performance of the reactor for various models.

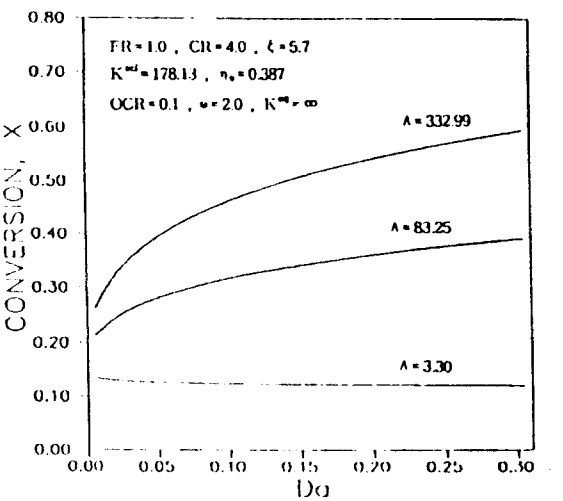

Fig. 2. Performance of the reactor with variable dimensionless membrane thickeness at some fixed dimensionless channel depth.

참 고 문 헌

1. C.M. Starks, *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 93, 195 (1971).
2. K.J. Evans and H.J. Palmer, *AICHE Symp. Ser.*, Vol. 77, 202 (1981).
3. T.J. Stanley and J.A. Quinn, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 42. 2313 (1987).
4. M.E. Davis, *"Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers"*, John Wiley & Sons (1984).