

## 이온액체추출정류에 의한 초산에틸에스테르-에타놀 혼합물분리공정의 모의계산

리영생, 박영남

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《최신과학기술에 기초하여 나라의 경제를 현대화, 정보화하기 위한 투쟁을 힘있게 벌려야 합니다.》(《김정일선집》증보판 제22권 22페이지)

이온액체는 선택성이 높고 환경에 유리한 녹색용매인것으로 하여 분리공정에서 용매로 리용하기 위한 연구[1-3]가 활발히 진행되고있으나 Aspen Plus에서 이온액체추출정류공정을 모의한 결과는 발표된것이 없다.

우리는 Aspen Plus를 리용하여 초산에틸에스테르와 에타놀혼합물의 이온액체추출정류공정을 모의하고 합리적인 분리공정의 조작조건을 밝혔다.

### 1. 이온액체용매의 선택

추출정류에서 용매의 선택은 분리공정의 에너지절약과 분리효과와 관련된것으로 하여 중요한 문제로 나선다. 우리는 먼저 4개의 이온액체 [Emim][MeSO<sub>3</sub>], [Emim][MeSO<sub>4</sub>], [Bmim][CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>], [Emim][BF<sub>4</sub>]을 선택하고 상대휘발도가 제일 큰 1개의 이온액체를 용매로 선택하였다.

4개 이온액체의 물분율이 각각 0.2일 때 초산에틸에스테르-에타놀혼합물의 기-액상평형변화를 Aspen Plus에서 UNIFAC모형으로 계산한 결과는 그림 1과 같다. 이때 모의파라미터들은 선행연구[4, 5]에서와 같이 설정하였다.

그림 1에서 보는바와 같이 선택한 이온액체들은 모두 초산에틸에스테르-에타놀공비점을 파괴할수 있다는것을 알수 있다.

Aspen Plus로 모의한 초산에틸에스테르의 물분율에 따르는 상대휘발도변화는 그림 2와 같다.

그림 2에서 보는바와 같이 이온액체로

[Emim][MeSO<sub>3</sub>]을 첨가할 때 혼합물속에서 초산에틸에스테르의 상대휘발도가 현저하게 커진다는것을 알수 있다.

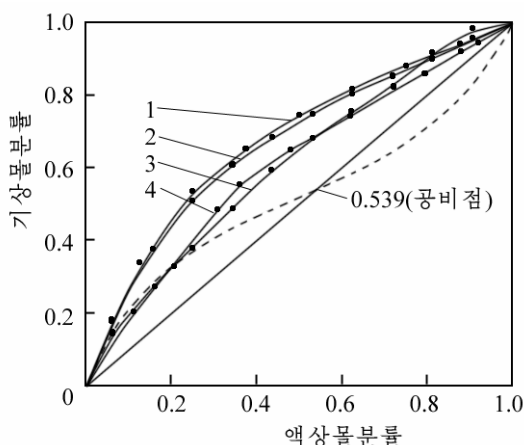


그림 1. 초산에틸에스테르-에타놀혼합물의 기-액상평형변화

1-4는 이온액체가 각각 [Emim][MeSO<sub>3</sub>], [Emim][MeSO<sub>4</sub>], [Bmim][CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>], [Emim][BF<sub>4</sub>]인 경우

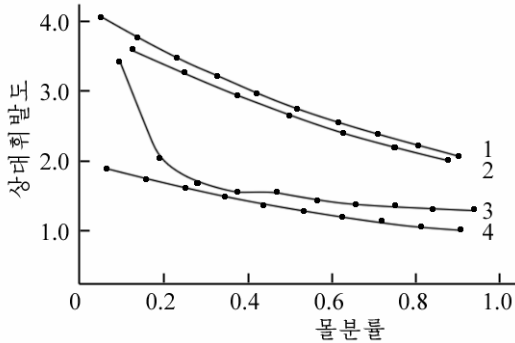


그림 2. 초산에틸에스테르의 물분율에 따르는 상대휘발도변화  
1-4는 이온액체가 각각 [Emim][MeSO<sub>3</sub>], [Emim][MeSO<sub>4</sub>], [Bmim][CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>], [Emim][BF<sub>4</sub>]인 경우

## 2. 이온액체추출정류공정의 모의

추출정류탑의 원료주입단을 2개로 설정하였는데 하나는 용매주입단이고 다른 하나는 주원료주입단이다. 용매주입단은 탑중간에서 옷부분에 배치하며 여기로 이온액체를, 주원료주입단으로는 초산에틸에스테르함량이 50mol%인 에타놀혼합물을 100kmol/h의 류속으로 주입한다.

Aspen Plus에서 모의한 추출정류탑조건과 초산에틸에스테르의 순도 및 보이라의 에너지소비량사이관계는 그림 3과 같다.

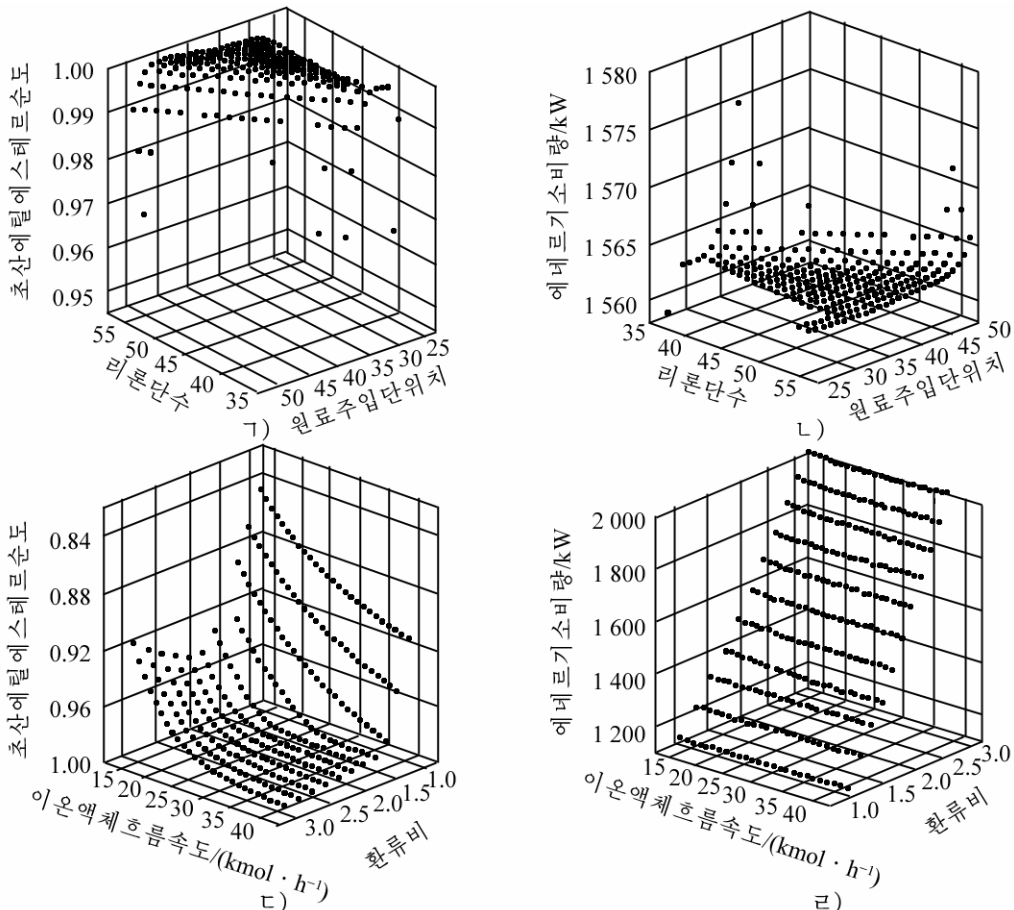


그림 3. 추출정류탑조건과 초산에틸에스테르의 순도 및 보이라의 에너지소비량사이관계

㉠, ㉡)는 리론단수, 원료주입단위치와 초산에틸에스테르순도 및 에너지소비량사이관계,

㉢, ㉣)는 이온액체흐름속도, 환류비와 초산에틸에스테르순도 및 에너지소비량사이관계

탑의 리론단수가 50단인 경우 원료주입단위치가 올라갈 때 초산에틸에스테르의 순도가 서서히 높아지다가 40단이상에서는 급격히 낮아지며(그림 3의 ㉠) 에너지소비량도 급격히 커졌다.(그림 3의 ㉡) 또한 이온액체흐름속도가 빨라짐에 따라 초산에틸에스테르의 순

도가 높아지며 이온액체흐름속도가 30kmol/h이상이고 환류비가 2.0이상일 때 크게 변하지 않았다.(그림 3의 c))

그림 3의 c)에서 보는바와 같이 이온액체흐름속도가 변할 때 보일러의 에네르기소비량은 거의 변하지 않지만 환류비가 커짐에 따라 에네르기소비량이 많아졌다.

표. 초산에틸에스테르추출정류공정의 모의계산결과

추출정류탑조건	조건 1	조건 2	조건 3
탑리론단수	45	50	55
용매주입단	3	3	3
원료주입단	37	38	45
직경/m	1.12	1.03	1.03
환류비	2.5	2.0	2.0
랭각기에네르기소비량/kW	1 568	1 343	1 344
보일러에네르기소비량/kW	1 789	1 565	1 566

따라서 이온액체흐름속도가 30kmol/h이고 환류비가 2.0일 때 에네르기소비를 줄이면서도 높은 순도를 보장할수 있다.

초산에틸에스테르추출정류공정의 모의계산결과는 표와 같다.

표에서 보는바와 같이 조건 2 즉 탑리론단수가 50단, 용매주입단이 3단, 원료주입단이 38단인 경우 에네르기소비가 제일 작다.

## 맺 는 말

Aspen Plus에서 이온액체의 첨가량에 따라 초산에틸에스테르성분의 상대휘발도변화를 모의하고 상대휘발도가 제일 높은 이온액체인 [Emim][MeSO<sub>3</sub>]을 용매로 선택하였다.

Aspen Plus의 공정감도분석기능을 리용하여 모의계산한 결과 탑의 리론단수가 50단이고 용매주입단이 3단이며 원료주입단이 38단일 때 랭각기와 보일러의 에네르기소비가 제일 작고 초산에틸에스테르의 순도가 제일 높았다.

## 참 고 문 헌

- [1] N. Ramirez Corona et al.; Chem. Eng. Proc., **87**, 1, 2014.
- [2] P. Nancarrow et al.; Ind. Eng. Chem. Res., **54**, 10843, 2015.
- [3] A. E. Andreatta et al.; ACS Sustain. Chem. Eng., **3**, 3435, 2015.
- [4] Z. Lei et al.; Ind. Eng. Chem. Res., **61**, 1117, 2016.
- [5] Z. Lei et al.; Ind. Eng. Chem. Res., **48**, 2697, 2009.

주체106(2017)년 8월 5일 원고접수

## Simulation Calculation of Separation Process of Ethyl Acetate-Ethanol Mixture by Ionic Liquid-based Extractive Distillation

Ri Yong Saeng, Pak Yong Nam

We added the several thermodynamic and physical property parameters of four ILs [Emim][MeSO<sub>3</sub>], [Emim][MeSO<sub>4</sub>], [Bmim][CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>] and [Emim][BF<sub>4</sub>] to Aspen Plus database via the UNIFAC model. From the simulation results, we selected [EMIM][MeSO<sub>3</sub>] as the proposed solvent in the separation purification of ethyl acetate.

The optimum conditions are as follows: the number of theoretical stage is 50, the solvent feed stage is 3 and the feed stage is 38. Then the energy requirement is the least and the purity of ethyl acetate is the highest.

Key words: Aspen Plus, extractive distillation