Aspen Plus에 의한 수소린산나트리움의 제조공정모의

한두혁, 리성호, 박세옥

경애하는 최고령도자 김정은동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《수학, 물리학, 화학, 생물학과 같은 기초과학부문에서 과학기술발전의 원리적, 방법론적기초를 다져나가면서 세계적인 연구성과들을 내놓아야 합니다.》

피로린산나트리움은 식료공업에서 식료품의 수분보존, 항산화, 품질개량제로 리용된다.[3] 고순도피로린산나트리움제조에서 중요한것은 축합반응의 전구체인 수소린산나트리움의 순도를 높이는것이다.

일반적으로 가성소다나 탄산나트리움을 일정한 pH조건에서 린산과 중화반응시킨 다음 여러가지 방법으로 증발농축 및 건조시켜 수소린산나트리움결정을 얻는다.[1, 2] 그러나 이 러한 증발농축과 건조공정은 에네르기소비가 많고 불순물제거가 어렵다.

우리는 탄산나트리움과 린산을 반응시켜 재결정화법으로 수소린산나트리움을 얻는 공 정을 Aspen Plus로 모의하였다.

1. 공정모형의 확립

공정흐름도작성 린산과 탄산나트리움을 출발원료로 하여 수소린산나트리움을 제조하기 위한 Aspen Plus공정모의에서 리용된 주요단위조작모형들은 Flash2(기액분리기), CFuge(원 심려과기), Heater(열교환기)이다.

공정흐름도에서 SOLUTION(Flash2)모형은 원료 H₃PO₄과 Na₂CO₃의 중화반응과정을, COOLER(Heater)모형과 CRYSTAL(Flash2)모형은 중화반응기에서 용해된 반응생성물을 방온도로 랭각시킬 때 결정수화물의 침전과정을, SEP(CFuge)모형은 결정화기에서 석출된 수소 린산나트리움결정수화물의 원심분리과정을 모의한다.

성분의 정의 H_3PO_4 과 Na_2CO_3 , H_2O 를 일반성분으로 정의한다. 한편 H_3PO_4 , Na_2CO_3 , H_2O 는 전해질형식으로 존재하는것으로 하여 Aspen Plus가 제공하는 Electrolyte Wizard기능을 리용하여 전해질해리평형 및 염형성과정에 얻어지는 기타 모든 성분들을 정의한다. 성분정의는 표 1과 같다.

물성방법의 선택과 파라메러결정 전해질평형과정을 모의하는 열력학적모형으로는 ELECNRTL모형이 가장 잘 알려져있다. ELECNRTL모형은 활동도곁수를 계산하기 위한 다 방면적인 모형으로서 수용성전해질계뿐아니라 혼합용매전해질계에서도 전체 범위의 전해 질농도를 표현할수 있다. 따라서 우리는 물속에서 H_3PO_4 과 Na_2CO_3 의 중화반응과정을 모의하기 위하여 ELECNRTL모형을 리용하였다.

Aspen Plus에는 전해질활동도결수계산에 필요한 수많은 물질들의 ELECNRTL모형파라 메터들이 이미 자료기지화되여있다. 우리는 ELECNRTL모형파라메터들을 리용하였다.

ᄑ	1 성부정이

성분ID 성분류형 성분이름 화학식 HyO 입반 WATER HyO HyPO4 입반 WATER HyO HyPO4 입반 ORTHOPHOSPHORIC—ACID HyPO4 NayCO3 입반 SODIUM—CARBONATE NayCO3 H H QU	표 1. 성문성의							
H ₃ PO ₄ 일반 SODIUM—CARBONATE Na ₂ CO ₃ 임반 H ⁺ SODIUM—CARBONATE Na ₂ CO ₃ 임반 H ⁺ H ⁺ H ⁺ H ⁺ H ⁺ H ⁺ Na ⁺ 일반 Na ⁺ Na ⁺ CO ₂ 임반 CARBON—DIOXIDE CO ₂ DISOD(S) 교체 DISODIUM—PHOSPHATE Na ₂ HPO ₄ Na ₂ HPO ₅ Na ₂ HPO ₆ 2H ₂ O Na ₂ HPO ₄ 2H ₂ O Na ₂ DO ₃ NaHCO ₃ NWEGSC(S) 교체 WEGSCHEIDER Na ₂ CO ₃ NaHCO ₃ NMONOS(S) 교체 MONOSODIUM—PHOSPHATE NaH ₂ PO ₄ NaOH(S) 교체 SODIUM—HYDROXIDE NaOH NAH ₂ PO ₄ 2H ₂ O NaOH(S) 교체 SODIUM—HYDROXIDE NaOH NAH ₂ PO ₄ 2H ₂ O SODIU(S) 교체 SODIUM—BICARBONATE Na ₂ CO ₃ NaHCO ₃ SALT3 교체 SODIUM—CARBONATE Na ₂ CO ₃ Na ₂ O ₃ Na ₂	성분ID	성분ID 성분류형 성분이름		화학식				
Na ₂ CO ₃ 일반 SODIUM—CARBONATE Na ₂ CO ₃ H ⁺ 입반 H ⁺ Na ⁺ Q ⁺ 만 Na ⁺ Na	H ₂ O		WATER	H ₂ O				
H ⁺ 일반 H ⁺ Na ⁺ Na ⁺ Na ⁺ Na ⁺ Na ⁺ CC ₂ 일반 CARBON DIOXIDE CO ₂ DISOD(S) 교체 DISODIUM — PHOSPHATE Na ₂ HPO ₄ PH ₂ O Na ₂ O Na ₂ NaHCO ₃ NaHCO ₃ NaHONOS(S) 교체 WEGSCHEIDER Na ₂ CO ₃ NaHCO ₃ NaHONOS(S) 교체 MONOSODIUM — PHOSPHATE NaH ₂ PO ₄ PH ₂ O NaOH(S) 교체 SODIUM — HYDROXIDE NaOH NaH ₂ PO ₄ PH ₂ O NaOH(S) 교체 SODIUM — HYDROXIDE NaOH NaH ₂ PO ₄ PH ₂ O NaH ₂ O NAH ₂ PO ₄ PH ₂ O NAH ₂ O NAH ₂ PO ₄ PH ₂ O NAH ₂ O NA ₂ O NAHCO NA ₂ CO NA ₂ CO NAHCO NA ₂ CO NA ₂ CO NAHCO NA ₂ CO NA ₂ CO	H_3PO_4		ORTHOPHOSPHORIC – ACID	H_3PO_4				
Na ⁺ Q 만 CARBON - DIOXIDE CO ₂ DISOD(S) 고체 DISODIUM - PHOSPHATE Na ₂ HPO ₄ Na ₂ HP(S) 고체 Na ₂ HPO ₄ ·2H ₂ O Na ₂ HPO ₄ ·12H ₂ O Na ₂ O ₃ ·NaHCO ₃ NWEGSC(S) 고체 WEGSCHEIDER Na ₂ CO ₃ ·3NaHCO ₃ NONOS(S) 고체 MONOSODIUM - PHOSPHATE Na ₄ PO ₄ ·4P ₂ O NaH ₂ PO ₄ ·4P ₂ O NaOH ₂ O Na								
CO2 일반 CARBON – DIOXIDE CO2 DISOD(S) 고체 DISODIUM – PHOSPHATE Na2HPO4 Na2HP(S) 고체 Na2HPO4-2H2O Na2HPO4-2H2O SALT1 고체 Na2HPO4-7H2O Na2HPO4-7H2O SALT2 고체 Na2HPO4-7H2O Na2HPO4-7H2O TRONA(S) 고체 TRONA Na2PO4-7H2O TRONA(S) 고체 WEGSCHEIDER Na2CO3-3NaHCO3 WEGSC(S) 고체 WEGSCHEIDER Na2CO3-3NaHCO3 MONOS(S) 고체 MONOSODIUM – PHOSPHATE NaH2PO4 NaH2PO3 NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaUT3 SODIUM – HYDROXIDE NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-1H2O NaH2PO4-2H2O NaH2PO4-2H2O SODIU(S) 고체 SODIUM – CARBONATE Na2CO3-3 SALT5 고체 SODIUM – CARBONATE – HEPTAHYDRATE Na2CO3-10H2O								
DISOD(S) 고체 DISODIUM - PHOSPHATE Na2HPO4 Na2HP(S) 고체 Na2HPO4·2H2O Na2HPO4·2H2O SALT1 고체 Na2HPO4·12H2O Na2HPO4·2H2O SALT1 고체 Na2HPO4·12H2O Na2HPO4·12H2O TRONA(S) 고체 TRONA Na2CO3·NaHCO3 WEGSC(S) 고체 WEGSCHEIDER Na2CO3·NaHCO3 MONOS(S) 고체 MONOSODIUM - PHOSPHATE NaH2PO4 NaH2P(S) 고체 NAH2PO4·12H2O NaH2PO4·12QO NaOH(S) 고체 SODIUM - PHOSPHATE NaH2PO4·12QO NaOH(S) 고체 SODIUM - PHOSPHATE NaH2PO4·12QO NaOH(S) 고체 SODIUM - HYDROXIDE NaOH SALT3 고체 SODIUM - BICARBONATE NaHCO3 SALT5 고체 SODIUM - CARBONATE Na2CO3·14QO SALT6 고체 SODIUM - CARBONATE Na2CO3·14QO SALT7 고체 SODIUM - CARBONATE - HEPTAHYDRATE Na2CO3·14QO SALT8 고체 SODIUM - CARBONATE - DECAHYDRATE Na2CO3·10H2O OH 일반 HCO3 HCO3 H2PO4 일반 HCO3 HCO3 H2PO4 일반 H2PO4 H2PO4 H2PO4 HPO4 일반 H2PO4 H2PO4 H2PO4 SALT4 고체 SODIUM - CARBONATE - DECAHYDRATE Na2CO3·10H2O OH SALT5 UP H2PO4 H2PO4 NAGCO3·10H2O OH SALT4 UP H2PO4 H2PO4 NAGCO3·10H2O OH SALT5 UP H2PO4 NAGCO3·10H2O OH NAGCO3·10H2O			Na ⁺	Na ⁺				
Na ₂ HP(s) 교체 Na ₂ HPO ₄ ·2H ₂ O Na ₂ HPO ₄ ·2H ₂ O SALT1 교체 Na ₂ HPO ₄ ·7H ₂ O Na ₂ HPO ₄ ·12H ₂ O Na ₂ HPO ₄ ·12H ₂ O Na ₂ HPO ₄ ·12H ₂ O Na ₂ CO ₃ ·NaHCO ₃ WEGSC(S) 교체 WEGSCHEIDER Na ₂ CO ₃ ·NaHCO ₃ MONOS(S) 교체 MONOSODIUM PHOSPHATE NaH ₂ PO ₄ NaH ₂ PO ₄ NaH ₂ PO ₃ ·1H ₂ O NaOH(S) 교체 SODIUM PHOSPHATE NaOH NAH ₂ PO ₄ ·1H ₂ O NaOH(S) 교체 SODIUM PHOROXIDE NaOH SALT3 교체 SODIUM BICARBONATE NaH ₂ PO ₄ ·2H ₂ O NaH ₂ PO ₃ ·1H ₂ O SALT5 교체 SODIUM CARBONATE Na ₂ CO ₃ NaH ₂ CO ₃ SALT6 교체 SODIUM CARBONATE HEPTAHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·1H ₂ O SALT7 교체 SODIUM CARBONATE — HEPTAHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·1H ₂ O OH 일반 OH OH HCO ₃ 일반 HCO ₃ HCO ₃ HCO ₃ HCO ₃ HCO ₃ HCO ₃ HCO ₄ QU HCO ₃ QU HCO ₃	_			-				
SALT1 고체 Na2HPO4·7H2O Na2HPO4·7H2O SALT2 고체 Na2HPO4·7H2O Na2HPO4·7H2O SALT2 고체 Na2HPO4·12H2O Na2HPO4·12H2O TRONA(S) 고체 TRONA Na2CO3·NaHCO3 WEGSC(S) 고체 WEGSCHEIDER Na2CO3·NaHCO3 MONOS(S) 고체 MONOSODIUM—PHOSPHATE NaH2PO4 NaH2PO4 NaH2PO4 NaH2PO4·H2O NaOH(S) 고체 SODIUM—HYDROXIDE NaOH SALT3 고체 SODIUM—HYDROXIDE NaH2PO4·H2O NaOH(S) 고체 SODIUM—BICARBONATE NaH2O3 SALT5 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3 SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3·H2O SALT7 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3·H2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—HEPTAHYDRATE Na2CO3·H2O OH— 일반 OH— OH— HCO3 일반 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 H2PO4 HCO3 HCO3 HCO3 H2PO4 HCO3 HCO3 H2PO4 HCO3 HCO3 H2PO4 HCO3 HCO3 HCO3 H2PO4 HCO3 HCO3 H2PO4 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 H2PO4 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3				= '				
SALT2 고체 Na2HPO4·12H2O Na2HPO4·12H2O TRONA(S) 고체 TRONA Na2CO3·NaHCO3 WEGSC(S) 고체 WEGSCHEIDER Na2CO3·3NaHCO3 MONOS(S) 고체 MONOSODIUM—PHOSPHATE NaH2PO4 NaH2P(S) 고체 NaH2PO4·H2O NaH2PO4·H2O NaOH(S) 고체 SODIUM—HYDROXIDE NaOH SALT3 고체 SODIUM—BICARBONATE NaH2PO4·2H2O SODIU(S) 고체 SODIUM—BICARBONATE Na2CO3·7H2O SALT5 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3·7H2O SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3·7H2O SALT7 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3·7H2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3·10H2O OH 일반 OH OH OH HCO3 일반 HCO3 H2PO4 HPO4 일반 HCO3 HCO3 H2PO4 HPO4 UP HCO3 HCO3 SALT4 교체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3·10H2O OH SUP HCO3 HCO3 SALT9 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3·10H2O OH UP UP OH NA2CO3·10H2O OH SUP HCO3 HCO3 SALT8 UP HCO3 HCO3 SALT8 UP HCO3 HCO3 SALT8 UP HCO3 HCO3 SALT9 UP HCO3 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3·10H2O OH UP UP HCO3 HCO3 SALT4 UP UP HCO3 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3·10H2O OH UP UP TO4 SALT9 UP TO4A SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3·10H2O SALT9 UP TOAM SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3·10H2O SALT9 UP TRONA NA2CO3·10H2O NA3PO4 UP TRISODIUM—PHOSPHATE NA2CO3·3NAHCO3 NAOH(S)1 UP TRISODIUM—PHOSPHATE NA2CO3·3NAHCO3 NAOH(S)1 UP TRISODIUM—PHOSPHATE NA2CO3·3NAHCO3 NAOH(S)1 UP TRISODIUM—PHOSPHATE NA2PO4	$Na_2HP(S)$			= ' =				
TRONA(S) 고체 TRONA Na2CO3·NaHCO3 WEGSC(S) 고체 WEGSCHEIDER Na2CO3·3NaHCO3 MONOS(S) 고체 MONOSODIUM—PHOSPHATE NaH2PO4 NaH2P(S) 고체 NaH2PO4·H2O NaH2PO4·H2O NaOH(S) 고체 SODIUM—HYDROXIDE NaOH SALT3 고체 NaH2PO4·2H2O NaHCO3 SODIU(S) 고체 SODIUM—BICARBONATE NaHCO3 SALT5 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3 SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3 SALT7 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3·H2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3·H2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3·10H2O OH 일반 HCO3 HCO3 H2PO4 일반 HCO3 HCO3 H2PO4 일반 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4 CO3- 일반 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4 SALT4 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3·10H2O OH SUD HA2PO4 NA2CO3·10H2O SALT5 NA2CO3·10H2O NA3PO4 고체 TRONA NA2CO3·3NaHCO3 NAOH(S)1 고체 WEGSCHEIDER Na2CO3·3NaHCO3 NAOHH2O NA3PO4 고체 TRISODIUM—PHOSPHATE Na2CO3·3NaHCO3 NAOHH2O NA3PO4	SALT1	•	$Na_2HPO_4\cdot7H_2O$	$Na_2HPO_4\cdot7H_2O$				
WEGSC(S) 고체 WEGSCHEIDER Na2CO3·3NaHCO3 MONOS(S) 고체 MONOSODIUM—PHOSPHATE NaH2PO4 NaH2P(S) 고체 NaH2PO4·H2O NaH2PO4·H2O NaOH(S) 고체 SODIUM—HYDROXIDE NaOH SALT3 고체 NaH2PO4·2H2O NaH2PO4·2H2O SODIU(S) 고체 SODIUM—BICARBONATE NaHCO3 SALT5 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3 SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3·H2O SALT7 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3·H2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—MONOHYDRATE Na2CO3·TH2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3·10H2O OH— 일반 OH— OH— HCO3 일반 HCO3 H2PO4 일반 HCO3 HCO3 H2PO4 일반 HPO4 CO3- 일반 HPO4- HPO4- HPO4- CO3- 일반 TO3- PO4- Na2CO3·10H2O SALT4 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3·10H2O SALT5 TO3- NACCO3·10H2O NA2CO3·10H2O NA2CO								
MONOS(S) 고체 MONOSODIUM—PHOSPHATE NaH2PO4 NaH2PO4 NaH2P(S) 고체 NaH2PO4·H2O SODIU(S) 고체 SODIUM—BICARBONATE NaHCO3 SALT5 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3· SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3· SALT7 고체 SODIUM—CARBONATE—MONOHYDRATE Na2CO3· TH2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—HEPTAHYDRATE Na2CO3· TH2O OH— 일반 OH— OH— HCO3- 일반 HCO3- PO4- 일반 HCO3- HCO3- HCO3- HCO3- HCO3- PO4- SALT4 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3· 10H2O OH— SALT4 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3· 10H2O NA2CO3- SALT4 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3· 10H2O SALT4 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE NA2CO3· 10H2O NA2CO3· NaHCO3 NA2CO3· N	* *							
NaH ₂ P(S) 고체 NaH ₂ PO ₄ ·H ₂ O NaH ₂ PO ₄ ·H ₂ O NaOH(S) 고체 SODIUM—HYDROXIDE NaOH SALT3 고체 NaH ₂ PO ₄ ·2H ₂ O NaH ₂ PO ₄ ·2H ₂ O NaH ₂ PO ₄ ·2H ₂ O SODIU(S) 고체 SODIUM—BICARBONATE NaHCO ₃ SALT5 고체 SODIUM—CARBONATE Na ₂ CO ₃ · NaCO ₃ SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE—MONOHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·H ₂ O SALT7 고체 SODIUM—CARBONATE—HEPTAHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·TH ₂ O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·Tlo ₂ O OH 일반 OH OH OH OH HCO ₃ UPU HCO ₃ UPU HCO ₃ HCO ₃ HCO ₃ HCO ₃ HCO ₃ HCO ₃ CO ₃ - UPO ₄ UPU HPO ₄ - UPO ₄ - HPO ₄ - HPO ₄ - UPO ₄ - HPO ₄ - UPO ₄ - PO ₄ - P	WEGSC(S)			Na ₂ CO ₃ ·3NaHCO ₃				
NaOH(S) 고체 SODIUM—HYDROXIDE NaOH SALT3 고체 NaH2PO4'2H2O NaH2PO4'2H2O SODIU(S) 고체 SODIUM—BICARBONATE NaHCO3 SALT5 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3' SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3' SALT7 고체 SODIUM—CARBONATE—MONOHYDRATE Na2CO3'7H2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3'7H2O OH 일반 OH OH OH HCO3 일반 HCO3 HCO3 H2PO4 일반 H2PO4 H2PO4 H2PO4 HPO4 일반 CO3- CO3- CO3- CO3- CO3- SALT4 SALT4 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3'10H2O OH SUUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3'10H2O OH TOH TOH TOH TOH TOH TOH TOH TOH TOH T								
SALT3 고체 NaH2PO4·2H2O NaH2PO4·2H2O SODIU(S) 고체 SODIUM—BICARBONATE NaHCO3 SALT5 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3 SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE—MONOHYDRATE Na2CO3·H2O SALT7 고체 SODIUM—CARBONATE—HEPTAHYDRATE Na2CO3·7H2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3·10H2O OH 일반 OH OH OH HCO3 일반 HCO3 HCO3 H2PO4 일반 H2PO4 H2PO4 H2PO4 HPO4 일반 CO3 CO3- CO3- PO4 일반 PO4 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4 SALT4 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3·10H2O Na3PO4 고체 TRONA Na2CO3·10H2O NaOH(S)1 고체 WEGSCHEIDER Na2CO3·3NaHCO3 NaOH(S)1 고체 NaOH·H2O Na3PO4								
SODIU(S) 고체 SODIUM—BICARBONATE NaHCO3 SALT5 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3 Na2CO3 SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3 Na2CO3 SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE—MONOHYDRATE Na2CO3·H2O SALT7 고체 SODIUM—CARBONATE—HEPTAHYDRATE Na2CO3·7H2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3·10H2O OH 일반 OH OH OH HCO3 일반 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3	NaOH(S)							
SALT5 고체 SODIUM—CARBONATE Na2CO3 SALT6 고체 SODIUM—CARBONATE—MONOHYDRATE Na2CO3·H2O SALT7 고체 SODIUM—CARBONATE—HEPTAHYDRATE Na2CO3·H2O SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3·10H2O OH 일반 OH OH OH HCO3 일반 HCO3 HCO3 H2PO4 일반 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4 CO3- 일반 CO3- CO3- CO3- CO3- CO3- SALT4 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na2CO3·10H2O Na2CO3·3NaHCO3 NaOH(S)1 고체 WEGSCHEIDER Na2CO3·3NaHCO3 NaOH(S)1 고체 NaOH·H2O NaOH·H2O Na3PO4 고체 TRISODIUM—PHOSPHATE Na2CO3·NaOH·H2O Na3PO4								
SALT6 교체 SODIUM—CARBONATE—MONOHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·H ₂ O				•				
SALT7 교체 SODIUM—CARBONATE—HEPTAHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·7H ₂ O Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O OH								
SALT8 고체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O OH OH OH OH OH OH OH HCO ₃ 일반 HCO ₃ HCO ₄ Ult HPO ₄ APA HPO ₄ H								
OH 일반 OH OH OH OH HCO3 UPU HCO3 UPU HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3 HCO3								
HCO3 일반 HCO3 HCO3 H2PO4 일반 H2PO4 H2PO4 H2PO4 HPO4 일반 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4 HPO4								
H ₂ PO ₄ 일반 H ₂ PO ₄ H ₂ PO ₄ H ₂ PO ₄ H ₂ PO ₄ HPO ₄ ²⁻ Q반 HPO ₄ ²⁻ CO ₃ ²⁻ Q반 CO ₃ ³⁻ CO ₃ ³⁻ PO ₄ ³⁻ Q반 PO ₄ ³⁻ PO ₄ ³⁻ PO ₄ ³⁻ PO ₄ ³⁻ SALT4 고체 SODIUM-CARBONATE-DECAHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O SALT9 고체 TRONA Na ₂ CO ₃ ·NaHCO ₃ SALT10 고체 WEGSCHEIDER Na ₂ CO ₃ ·3NaHCO ₃ NaOH(S)1 고체 NaOH·H ₂ O NaOH·H ₂ O Na ₃ PO ₄ 고체 TRISODIUM-PHOSPHATE Na ₃ PO ₄	OH^-	일반	OH^-	OH^-				
HPO ₄ ²⁻ 일반 HPO ₄ ²⁻ HPO ₄ ²⁻ CO ₃ ²⁻ CO ₃ ²⁻ QUU CO ₃ ²⁻ PO ₄ ³⁻ QUU PO ₄ ³⁻ PO ₄ ³⁻ PO ₄ ³⁻ PO ₄ ³⁻ SALT4 교체 SODIUM—CARBONATE—DECAHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O SALT9 교체 TRONA Na ₂ CO ₃ ·NaHCO ₃ SALT10 교체 WEGSCHEIDER Na ₂ CO ₃ ·3NaHCO ₃ NaOH(S)1 교체 NaOH·H ₂ O NaOH·H ₂ O Na ₃ PO ₄ 교체 TRISODIUM—PHOSPHATE Na ₃ PO ₄	HCO_3^-	일반	HCO_3^-	HCO_3^-				
CO3- 일반 CO3- CO3- CO3- CO3- CO3- CO3- CO3- CO3-	$\mathrm{H_2PO_4^-}$	일반	$\mathrm{H_2PO_4^-}$	$\mathrm{H_2PO_4^-}$				
PO ₄ ³⁻ 일반 PO ₄ ³⁻ PO ₄ ³⁻ SALT4 고체 SODIUM-CARBONATE-DECAHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O SALT9 고체 TRONA Na ₂ CO ₃ ·NaHCO ₃ SALT10 고체 WEGSCHEIDER Na ₂ CO ₃ ·3NaHCO ₃ NaOH(S)1 고체 NaOH·H ₂ O NaOH·H ₂ O Na ₃ PO ₄ 고체 TRISODIUM-PHOSPHATE Na ₃ PO ₄	$\mathrm{HPO_4^{2-}}$	일반	HPO_4^{2-}	$\mathrm{HPO_4^{2-}}$				
SALT4 고체 SODIUM-CARBONATE-DECAHYDRATE Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O SALT9 고체 TRONA Na ₂ CO ₃ ·NaHCO ₃ SALT10 고체 WEGSCHEIDER Na ₂ CO ₃ ·3NaHCO ₃ NaOH(S)1 고체 NaOH·H ₂ O NaOH·H ₂ O Na ₃ PO ₄ 고체 TRISODIUM-PHOSPHATE Na ₃ PO ₄	CO_3^{2-}	일반	CO_3^{2-}	CO_3^{2-}				
SALT9 고체 TRONA Na ₂ CO ₃ ·NaHCO ₃ SALT10 고체 WEGSCHEIDER Na ₂ CO ₃ ·3NaHCO ₃ NaOH(S)1 고체 NaOH·H ₂ O NaOH·H ₂ O Na ₃ PO ₄ 고체 TRISODIUM-PHOSPHATE Na ₃ PO ₄	PO_4^{3-}	일반	PO_4^{3-}	PO_4^{3-}				
SALT10 고체 WEGSCHEIDER Na ₂ CO ₃ ·3NaHCO ₃ NaOH(S)1 고체 NaOH·H ₂ O NaOH·H ₂ O Na ₃ PO ₄ 고체 TRISODIUM-PHOSPHATE Na ₃ PO ₄	SALT4	고체	SODIUM-CARBONATE-DECAHYDRATE	Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O				
NaOH(S)1 고체 NaOH·H ₂ O NaOH·H ₂ O Na ₃ PO ₄ 고체 TRISODIUM-PHOSPHATE Na ₃ PO ₄	SALT9	고체	TRONA	Na ₂ CO ₃ ·NaHCO ₃				
Na ₃ PO ₄ 고체 TRISODIUM-PHOSPHATE Na ₃ PO ₄	SALT10	고체	WEGSCHEIDER	Na ₂ CO ₃ ·3NaHCO ₃				
	NaOH(S)1	고체	$NaOH \cdot H_2O$	NaOH·H ₂ O				
TRISO-01 일반 TRISODIUM-PHOSPHATE Na ₃ PO ₄	Na_3PO_4		TRISODIUM-PHOSPHATE	Na_3PO_4				
	TRISO-01	일반	TRISODIUM – PHOSPHATE	Na_3PO_4				

2. 공정모의

초기입구값설정 공정모의에 리용된 초기원료들의 조성은 표 2와 같다.

표 2. 초기원료의 조성 원료이름 규격 함량/(kg·h⁻¹) H₃PO₄ 85%, 액체 100 Na₂CO₃ 99%, 고체 95 물 액체 200 표 2에서 보는바와 같이 초기원료중에서 린산과 탄산 나트리움의 물질량비는 대략 1:1.02이며 고액비는 대략 1:3.15이다. 여기서 고체는 탄산소다를 포함하고 액체는 물 과 린산을 포함한다.

한편 단위조작모형들에서 설정한 초기공정조건들은 표 3과 같다.

표 3. 초기공정조건

No.	단위조작모형	초기공정조건				
1	SOLUTION(Flash2)	온도 60℃, 압력 100kPa				
2	COOLER(Heater)	온도 20℃, 압력 100kPa				
3	CRYSTAL(Flash2)	온도 20℃, 압력 100kPa				
4	SEP(CFuge)	잔여수분함량 0.01				

공정모의결과 및 해석 표 2, 3에서와 같은 초기공정조건에서 공정모의를 진행하고 주요 물질흐름들에서 성분들의 조성을 분석한 결과는 표 4와 같다.

표 4. 공정모의로부터 얻어진 주요물질흐름들에서 성분조성(kg/h)

					`	<u> </u>	
구분	PRODUCT1	VAPOR	PRODUCT2	PRODUCT3	VAPOR2	FILTRATE	Na ₂ HPO ₄
온도/℃	60	60	20	20	20	20	20
압력/kPa	100	100	100	100	100	100	100
증기상분률	0	1	0.008	0	1	0	0
고체상분률	0	0	0.25	0.252	0	0	0.846
총흐름량/(kg·h ⁻¹)	355.737	39.263	355.737	354.533	1.204	45.719	308.815
H_2O	227.521	3.219	43.446	43.435	0.011	38.796	2.621
H_3PO_4	흔적	흔적	흔적	흔적	흔적	흔적	흔적
H^+	흔적		흔적	흔적		흔적	흔적
Na ⁺	40.799		1.55	1.55		2.091	0.141
CO_2	0.085	36.044	1.233	0.04	1.192	0.037	0.003
SALT2			305.727	305.727			305.727
OH^-	< 0.001		흔적	흔적		< 0.001	흔적
HCO_3^-	3.915		2.433	2.433		1.905	0.129
$\mathrm{H_2PO_4^-}$	2.887		0.088	0.088		0.123	0.008
HPO_4^{2-}	80.3		1.232	1.232		2.703	0.183
CO_3^{2-}	0.136		0.029	0.029		0.06	0.004
PO ₄ ³⁻	0.095		< 0.001	< 0.001		0.004	< 0.001

표 4에서 보는바와 같이 원심분리기에서 분리된 수소린산나트리움결정수화물 (Na₂HPO₄·12H₂O)의 순도는 99%이며 거둠률은 97%이다.

이로부터 우리가 확립한 공정조건에서 높은 순도의 수소린산나트리움을 높은 거둠률 로 얻을수 있다는것을 알수 있다.

맺 는 말

재결정화법으로 탄산나트리움과 린산으로부터 수소린산나트리움을 얻기 위하여 Aspen Plus로 공정을 모의하였다. 모의결과 재결정화법으로 99%의 수소린산나트리움을 97%의 거 둠률로 얻을수 있었다.

참 고 문 헌

- [1] 吴建军; 磷酸盐工业, 3, 14, 2005.
- [2] 魏玉鹏; 磷酸盐工业, 1, 17, 2001.
- [3] 赖丽娜; 粮食加工, 35, 3, 38, 2010.

주체108(2019)년 4월 5일 원고접수

Simulation for Synthesis Process of Disodium Hydrophosphate by Aspen Plus

Han Tu Hyok, Ri Song Ho and Pak Se Ok

The synthesis process of disodium hydrophosphate from sodium carbonate and phosphoric acid by using recrystallization is simulated by Aspen Plus.

The purity of disodium hydrophosphate synthesized by recrystallization is 99% and the yield is 97%.

Key words: disodium hydrophosphate, sodium pyrophosphate, Aspen plus