

Aspen Plus에 의한 수소린산나트륨의 제조공정모의

한두혁, 리성호, 박세욱

경애하는 최고령도자 김정은동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

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

피로린산나트륨은 식료공업에서 식료품의 수분보존, 향산화, 품질개량제로 리용된다.[3] 고순도피로린산나트륨제조에서 중요한것은 축합반응의 전구체인 수소린산나트륨의 순도를 높이는것이다.

일반적으로 가성소다나 탄산나트륨을 일정한 pH조건에서 린산과 중화반응시킨 다음 여러가지 방법으로 증발농축 및 건조시켜 수소린산나트륨결정을 얻는다.[1, 2] 그러나 이러한 증발농축과 건조공정은 에네르기소비가 많고 불순물제거가 어렵다.

우리는 탄산나트륨과 린산을 반응시켜 재결정화법으로 수소린산나트륨을 얻는 공정을 Aspen Plus로 모의하였다.

1. 공정모형의 확립

공정흐름도작성 린산과 탄산나트륨을 출발원료로 하여 수소린산나트륨을 제조하기 위한 Aspen Plus공정모의에서 리용된 주요단위조작모형들은 Flash2(기액분리기), CFuge(원심력파기), Heater(열교환기)이다.

공정흐름도에서 SOLUTION(Flash2)모형은 원료 H_3PO_4 과 Na_2CO_3 의 중화반응과정을, COOLER(Heater)모형과 CRYSTAL(Flash2)모형은 중화반응기에서 용해된 반응생성물을 방온도로 냉각시킬 때 결정수화물의 침전과정을, SEP(CFuge)모형은 결정화기에서 석출된 수소린산나트륨결정수화물의 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 파라메터결정 전해질평형과정을 모의하는 열력학적모형으로는 ELECNRTL모형이 가장 잘 알려져있다. ELECNRTL모형은 활동도계수를 계산하기 위한 다방면적인 모형으로서 수용성전해질계뿐만아니라 혼합용매전해질계에서도 전체 범위의 전해질농도를 표현할수 있다. 따라서 우리는 물속에서 H_3PO_4 과 Na_2CO_3 의 중화반응과정을 모의하기 위하여 ELECNRTL모형을 리용하였다.

Aspen Plus에는 전해질활동도계수계산에 필요한 수많은 물질들의 ELECNRTL모형파라메터들이 이미 자료기지화되어있다. 우리는 ELECNRTL모형파라메터들을 리용하였다.

표 1. 성분정의

성분ID	성분류형	성분이름	화합식
H ₂ O	일반	WATER	H ₂ O
H ₃ PO ₄	일반	ORTHOPHOSPHORIC — ACID	H ₃ PO ₄
Na ₂ CO ₃	일반	SODIUM — CARBONATE	Na ₂ CO ₃
H ⁺	일반	H ⁺	H ⁺
Na ⁺	일반	Na ⁺	Na ⁺
CO ₂	일반	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 ·2H ₂ O
SALT1	고체	Na ₂ HPO ₄ ·7H ₂ O	Na ₂ HPO ₄ ·7H ₂ O
SALT2	고체	Na ₂ HPO ₄ ·12H ₂ O	Na ₂ HPO ₄ ·12H ₂ O
TRONA(S)	고체	TRONA	Na ₂ CO ₃ ·NaHCO ₃
WEGSC(S)	고체	WEGSCHEIDER	Na ₂ CO ₃ ·3NaHCO ₃
MONOS(S)	고체	MONOSODIUM — PHOSPHATE	NaH ₂ PO ₄
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
SODIU(S)	고체	SODIUM — BICARBONATE	NaHCO ₃
SALT5	고체	SODIUM — CARBONATE	Na ₂ CO ₃
SALT6	고체	SODIUM — CARBONATE — MONOHYDRATE	Na ₂ CO ₃ ·H ₂ O
SALT7	고체	SODIUM — CARBONATE — HEPTAHYDRATE	Na ₂ CO ₃ ·7H ₂ O
SALT8	고체	SODIUM — CARBONATE — DECAHYDRATE	Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O
OH ⁻	일반	OH ⁻	OH ⁻
HCO ₃ ⁻	일반	HCO ₃ ⁻	HCO ₃ ⁻
H ₂ PO ₄ ⁻	일반	H ₂ PO ₄ ⁻	H ₂ PO ₄ ⁻
HPO ₄ ²⁻	일반	HPO ₄ ²⁻	HPO ₄ ²⁻
CO ₃ ²⁻	일반	CO ₃ ²⁻	CO ₃ ²⁻
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
TRISO—01	일반	TRISODIUM — PHOSPHATE	Na ₃ PO ₄

2. 공정 모 의

초기입구값설정 공정 모의에 리용된 초기원료들의 조성은 표 2와 같다.

표 2. 초기원료의 조성

원료이름	규격	함량/(kg·h ⁻¹)
H ₃ PO ₄	85%, 액체	100
Na ₂ CO ₃	99%, 고체	95
물	액체	200

표 2에서 보는바와 같이 초기원료중에서 린산과 탄산 나트륨의 물질량비는 대략 1 : 1.02이며 고액비는 대략 1 : 3.15이다. 여기서 고체는 탄산소다를 포함하고 액체는 물과 린산을 포함한다.

한편 단위조작모형들에서 설정한 초기공정조건들은 표 3과 같다.

표 3. 초기공정조건

No.	단위조작모형	초기공정 조건
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)

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 ₂ O	227.521	3.219	43.446	43.435	0.011	38.796	2.621
H ₃ PO 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
H ₂ PO 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 수소린산나트륨결정수화물 (Na₂HPO₄·12H₂O)의 순도는 99%이며 거둬들은 97%이다.

이로부터 우리가 확립한 공정조건에서 높은 순도의 수소린산나트륨을 높은 거둬들로 얻을수 있다는것을 알수 있다.

맺 는 말

재결정화법으로 탄산나트륨과 린산으로부터 수소린산나트륨을 얻기 위하여 Aspen Plus로 공정을 모의하였다. 모의결과 재결정화법으로 99%의 수소린산나트륨을 97%의 거둬들로 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