

Phase equilibrium and reaction kinetic study for continuous diphenyl carbonate(DPC) manufacturing process

이중기, 정성택*

인하대학교 화학공학과 청정기반기술 연구소
(stchung@inha.ac.kr*)

본 연구에서는 Non-phosgene 공정을 이용하여 폴리카보네이트를 제조하는데 있어 중간물질인 Diphenyl carbonate(DPC)를 연속적으로 제조하는 공정 설계에서 필요한 열역학적 모델 선정 및 파라미터를 예측하였으며, 반응 속도에 관한 연구도 수행하였다. DPC공정은 5가지 성분(Methanol, Phenol, dimethyl carbonate(DMC), methylphenyl carbonate(MPC), diphenyl carbonate(DPC))으로 구성되어 있기 때문에 Binary mixture에서 Multi-components로 확장 할 수 있는 Non-Random Two Liquid(NRTL) 모델을 선정하였다. 하지만 위의 성분들에 대한 NRTL binary 파라미터 값들은 아직까지 알려져 있지 않으므로 MPC(1)-DPC(2), MPC(1)-Phenol(2), Methanol(1)-DMC(2), Phenol(1)-DMC(2)에 대해서는 참고문헌에 나와 있는 기/액 평형 데이터로부터 NRTL binary 파라미터 값을 예측하였고, MPC(1)-Methanol(2), MPC(1)-DMC(2), DPC(1)-Phenol(2), DPC(1)-Methanol(2), DPC(1)-DMC(2), 에 대해서는 기/액 평형 데이터가 존재하지 않으므로 Aspen Properties software(Ver. 12.1.1)을 사용하여 PR방정식으로부터 Txy diagram을 예측한 후 NRTL binary 파라미터로 바꾸어 주었다. 반응 속도 연구에 필요한 열역학 정보 중 DMC, MPC, DPC 성분에 대해서는 Aspen Properties software(Ver. 12.1.1)로부터 예측하였으며 온도에 따른 평형상수(K) 값의 변화를 확인 할 수 있었다.