

이온성액체 1-Alkyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate ($[C_n\text{-mim}][\text{TfO}]$) 에서 이산화탄소의 고압 상거동 측정 및 모델링

신은경, 이병철*

한남대학교 나노생명화학공학과

(bclee@hannam.ac.kr*)

이온성 액체를 반응 매체나 용매로 사용하는 화학반응 공정과 초임계유체를 사용한 분리 공정이 결합된 이온성액체-초임계유체 hybrid 그린 공정의 개발을 위한 기초 연구로서 이온성 액체에 대한 고압 상태의 이산화탄소의 상거동을 실험적으로 측정하고 모델링을 하는 연구를 수행하였다. 사용된 이온성액체는 $[C_4\text{-mim}][\text{TfO}]$, $[C_6\text{-mim}][\text{TfO}]$, $[C_8\text{-mim}][\text{TfO}]$ 이며, 고압용 상평형 장치를 사용하여 온도 (30 - 70°C)와 CO_2 의 조성을 변화시켜가면서 bubble point pressure 및 cloud point pressure를 측정함으로써 이온성액체에 녹는 CO_2 의 용해도를 측정하였다. 이온성액체에서 CO_2 농도가 증가함에 따라 평형 압력은 급격히 증가하였으며, 온도가 증가함에 따라 용해도는 감소하였다. 이온성액체의 양이온에 존재하는 알킬기의 크기가 증가함에 따라 CO_2 의 용해도는 증가하였다. Peng-Robinson 상태방정식을 사용하여 실험 데이터에 대한 모델링 연구를 수행하였다. 그룹기여방법을 사용하여 이온성액체의 임계성질과 이심인자를 추정하였고, 실험 데이터와 상관시켜 각각의 시스템과 온도에 대하여 최적의 binary interaction parameter를 구하였다. Peng-Robinson 상태방정식은 저압으로부터 임계압력 이상의 고압까지의 넓은 압력 범위에서 이온성액체에 대한 CO_2 의 상거동을 성공적으로 모델링할 수 있었다.