

Multi-scale 모사방법을 이용한 n-헥산 흡착공정의 개발

손혜정, 임영일*, 유경선¹
한경대학교; ¹광운대학교
(limyi@hknu.ac.kr*)

본 연구는 분자규모에서 시작하여 공정규모에 이르는 흡착공정의 설계 및 개발을 위한 모사방법을 제시한다. 이때 모사방법은 분자수준의 모사, 유체역학 모사, 공정 모사의 세 단계로 이루어지며, 각 단계는 다음과 같이 수행한다.

분자수준의 모사는 Materials Studio 4.2 중 Sorption 모듈의 GCMC (Grand Canonical Monte Carlo) 방법을 이용하여 등온흡착계수를 예측한다.

유체역학 모사는 COMSOL Multiphysics 3.4 를 사용하고, 분자수준의 모사를 통해 얻은 등온흡착계수를 이용하여 흡착 컬럼 내의 유동상의 속도와 농도를 2차원으로 보여준다.

앞선 두 단계에서 수행한 모사결과를 바탕으로, 공정모사단계에서는 자체 개발한 FAST-Chrom/SMB 를 사용하여 공정의 설계인자를 찾고 운전조건을 최적화한다.

Multi-scale 모사결과는 활성탄 흡착컬럼에서 n-헥산의 흡착거동 실험결과를 만족할 만한 수준에서 예측하였으며, 따라서 multi-scale 모사방법의 활용가능성을 확인하였다. 본 연구는 한국과학재단 특정기초연구 (R01-2006-000-10786-0) 지원으로 수행되었다.