

Modeling and simulation of super absorbent polymer(SAP) polymerization with acrylamide

백승원, 정민영, 이건희, 오 민, 홍성욱<sup>†</sup>

한밭대학교 화학생명공학과

(suhong@hanbat.ac.kr<sup>†</sup>)

고흡수성수지(SAP)란 자신의 무게의 몇 천 배에 이르는 물을 흡수할 수 있는 고분자이며, 유아, 성인용 기저귀 시장의 성장에 따라 고흡수성 수지의 수요는 해마다 증가하고 있다. 본 연구에서는 단량체(acrylamide)와 개시제(sodium persulfate)를 이용한 고흡수성수지(polyacrylamide) 생산 모사 시뮬레이션이 실시되었다. 실험실 스케일에서의 실험자료 분석 및 수학적으로 상세히 설계된 모델을 이용하여 반응 메커니즘의 kinetic parameter 값들을 추정하였으며, 스케일 업을 통한 회분식 반응기에서의 고분자의 특성 및 효율을 예측하였다. 고분자 중합은 개시, 성장, 이동 및 정지의 단위반응을 모두 구현하여 정확한 고분자사슬 성장을 계산하였으며, 반응기의 수학적 모델은 물질수지, 에너지수지 식으로 수립되었다. 냉각튜브를 설치함으로써 발열 반응에 대한 반응기의 온도를 제어하였으며, 이에 내부의 물리-화학적 변화(농도, 온도, 밀도)를 예측할 수 있었다. 설립된 수학적 모델은 고분자 특성에 직접적인 영향을 끼쳐 반응기 특성이 수반된 고분자성질(MW, MWD, PD 등)들을 계산 할 수 있었으며, 이를 통한 고흡수성수지 생산의 최적화 설계기술을 확보할 수 있었다.