

염화반응법으로 제조된 TaCl₅의 분리공정에 관한 비교 연구

조정호 · 박소진*[†] · 최영윤**[†]

동양대학교 생명화학공학과
750-711 경북 영주시 풍기읍 교촌동 1
*충남대학교 바이오응용화학부
750-711 대전시 유성구 궁동 220
**한국지질자원연구원 자원활용연구부
305-350 대전시 유성구 가정동 30
(2006년 2월 8일 접수, 2006년 5월 9일 채택)

A Comparison Study on the Separation Process of TaCl₅ from the Chlorinated Reaction Product

Jung-Ho Cho, So-Jin Park*[†] and Young-Yoon Choi**[†]

Department of Chemical Engineering, Dong Yang University, 1, Kyochon-dong, Poongki-eup, Youngju, Kyungbook 750-711, Korea

*Department of Chemical Engineering, Chungnam National University, 220, Gung-dong, Yuseong-gu, Daejeon 305-764, Korea

**Minerals and Materials Processing Division, Korea Institute of Geoscience and Mineral resources,

30, Gajeong-dong, Yuseong-gu, Daejeon 304-350, Korea

(Received 8 February 2006; accepted 9 May 2006)

요 약

염화반응에 의한 TaCl₅의 제조에서 반응생성물 중 NbCl₅, TiCl₄, FeCl₂ 등이 주요 불순물로 존재하게 된다. TaCl₅와 NbCl₅는 증류나 수소 환원법에 의해 쉽게 분리가 되므로, 반응생성물에서 TaCl₅/NbCl₅ 혼합물을 99.9% 이상 순도로 분리하기 위해 2기의 연속식 증류공정을 사용하여 light한 성분과 heavy한 성분을 제거하는 공정을 구성하였다. 본고에서는 순차배열(direct sequence)과 비 순차배열(indirect sequence)으로서의 두 분리공정에 대한 비교연구를 상용성 화학공정모사기인 Aspen Plus 13.1을 이용해서 전산모사를 수행하였다. 비교결과 순차배열이 비 순차배열에 비하여 초기 장치투자비용이나 운전비용에서 좀 더 우수한 것으로 나타났다.

Abstract – The separation and purification of TaCl₅ is indispensable in the synthetic process of TaCl₅ by chlorination of tantalum oxide. The reaction products are mainly TaCl₅, NbCl₅, TiCl₄ and FeCl₂. However, we need to separate TaCl₅/NbCl₅ mixture from the reaction product, because TaCl₅ and NbCl₅ are easily separated each other by distillation or hydrogen reduction process. In this work, a comparison study was carried out between direct sequence and indirect sequence to obtain TaCl₅/NbCl₅ mixture from the reaction product by removing light component, TiCl₄ and heavy component, FeCl₂ using two distillation columns. It was concluded that the direct sequence gave better results than indirect sequence in the aspect of initial capital costs and the associative operating costs.

Key words: Direct Sequence, Indirect Sequence, Separation Process, TaCl₅, NbCl₅

1. 서 론

탄탈륨 금속은 커패시터나 절단기구와 같은 특수금속의 용도로 전략적으로 사용되는 중요 희귀금속이다[1]. 이것은 주로 K₂TaF₇의 나트륨 환원으로 제조되는데, 이 과정에서 다량의 불소가 환경을 오염시키므로 다른 제조방법이 모색되고 있으며, 하나의 좋은 대안으로는 K₂TaF₇ 대신 탄탈륨 광석을 염화시킨 탄탈륨 염화물을 대체물로 사용하는 것이다. 이것은 주로 탄탈륨 광석을 염화시켜

생산한다. 그러나 이 방법 역시 고온(1173 K)에서 반응시켜야 하는 난제가 있으므로, 최근에 탄탈륨 산화물을 CCl₄로 염화시켜 TaCl₅를 얻는 방법이 모색되고 있다. 이때 반응 생성물로는 TaCl₅와 NbCl₅, TiCl₄, FeCl₂ 등이 주요 불순물로 포함되어 있으며, 따라서 이들로부터 TaCl₅를 분리하는 공정의 개발이 필요하다[2-4].

TaCl₅의 비점(509 K)과 융점(489 K)이 비교적 높은 온도이므로, 효과적인 분리공정으로 TaCl₅를 용매 추출하는 방법을 고려하였으나, CCl₄, 저가 알코올, 케톤 등 가능한 용매에 매우 소량만이 용해되어 적당한 용매를 찾을 수 없었다[5, 6]. 따라서 차선책으로 증류에 의한 분리공정을 선택하였으며, TaCl₅와 NbCl₅는 973 K 이

[†]To whom correspondence should be addressed.
E-mail: sjpark@cnu.ac.kr and yychoi@kigam.re.kr

Table 1. The basic properties of TiCl₄, FeCl₂, TaCl₅ and NbCl₅

Properties	TiCl ₄	FeCl ₂	TaCl ₅	NbCl ₅
Molecular weight	189.6908	126.7524	358.2114	270.1699
Normal boiling temperature (°C)	135.85	1023.85	233.25	246.05
Critical pressure (bar)	46.6095	87.2	N/A	N/A
Critical volume (cm ³ /gmole)	340	100	N/A	N/A
Critical compressibility factor	0.299	0.2	N/A	N/A
Acentric factor	0.283732	0.527052	N/A	N/A
Heat of formation (kJ/gmole)	-181.919	-33.6773	N/A	N/A
Free energy of formation (kJ/gmole)	-173.569	-37.1585	N/A	N/A

상에서 수소 환원하면 NbCl₅만 환원이 되어 상호 고순도로 분리되며[6], TaCl₅와 NbCl₅의 비점 차이가 12 K 정도로 증류로도 분리가 가능하므로, 우선 TaCl₅/NbCl₅ 혼합물을 염화반응생성물로부터 99.99% 이상 순도로 얻는 분리공정의 설계모사를 수행하였다.

TaCl₅와 NbCl₅, FeCl₂ 등과의 상평형도는 이 물질들의 비점이 높고 고체인 관계로 DDB(dortmund data bank) 검색결과 발표된 자료가 없고[7], 공기 중의 수분과 격렬히 반응하여 실제 실험이 거의 불가능한 관계로, 상용성 화학공정모사기인 Aspen Plus 13.1을 이용해서 전산모사를 수행하였으며, 순차배열(direct sequence)과 비 순차배열(indirect sequence)로서의 두 분리공정에 대한 비교연구를 수행하였다. 각 성분의 기본적인 물성치는 Table 1과 같으며, 표에서와 같이 기본적인 물성치들도 거의 알려져 있지 않다. 특히 임계 물성치들이 거의 알려져 있지 않기 때문에 모사에 있어 삼차형 상태방정식을 사용할 수 없다. 또한, Ta와 Nb 성분에 대한 group contribution 물성이 알려져 있지 않기 때문에 UNIFAC group contribution[8]에 의한 액체 활동도계수 모델식도 사용할 수 없다.

따라서 본 연구에서는 상용성 화학공정 모사기인 Aspen technology사의 Aspen Plus Release 13.1[9]에 내장되어 있는 ideal method[10]를 사용하여 증류공정만을 모사하였다. 특히 Aspen Plus에 TaCl₅와 NbCl₅ 성분들의 밀도 및 전달물성에 대한 물성치가 내장되어 있지 않기 때문에 주요 장치에 대한 사이징을 할 수 없음에 따라, 증류공정의 장치 투자비용에 대한 비교연구는 수행하지 않았다.

2. 이론적 고찰

통상적으로 원료 혼합물이 삼성분계로 구성되어 있을 때 연속식 증류공정을 이용해서 각각의 성분을 고 순도로 얻어내기 위해서는 두 가지 증류배열이 가능하다. 상대휘발도가 제일 높은 성분이 각각의 증류탑의 상부 제품으로 얻어지는 것을 순차배열이라고 하며, 상대휘발도가 제일 낮은 성분이 각각의 증류탑의 탑저에서 얻는 방법을 비 순차배열이라고 한다[11]. 통상적으로 이들 두 순서 사이에는 장치비용과 조업비용에서 중대한 차이가 있을 수 있다. 본 연구에서는 Table 1에서 나타낸 바와 같이 총 4개의 성분이 존재하고 편의상 끓는점 순서대로 성분을 각각 A, B, C 및 D로 구분하였을 때, 끓는점이 중간 영역에 있는 B와 C 성분을 같이 얻어내고 하면 Fig. 1(a)와 Fig. 1(b)에 나타낸 바와 같이 두 가지 증류공정의 조합이 가능하다. Table 2에는 주요 불순물 수에 따른 가능한 증류공정의 조합 수를 나타낸 것이다. 분리대상 목적물이 4성분 계이므로, 증류 목적물 중 가장 끓는점이 낮은 성분 A를 분리하고, 끓는점이 중간 영역에 있는 B와 C를 같이 얻어낸 다음 끓는점이

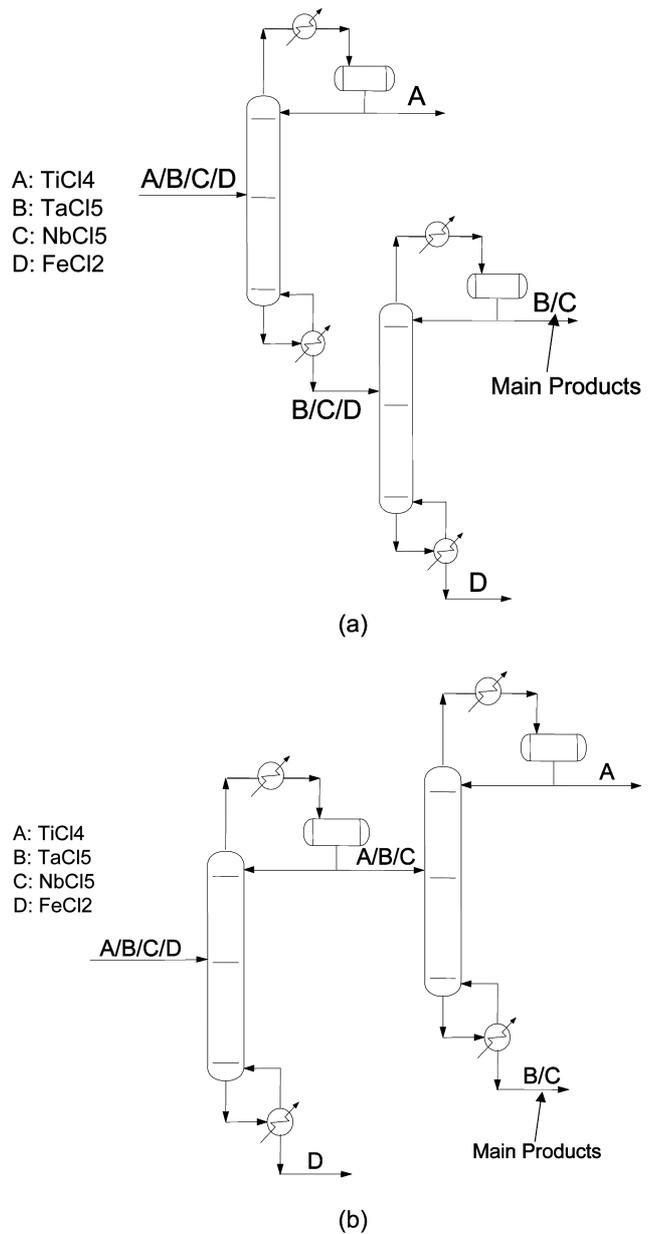


Fig. 1. (a) A Schematic diagram for a direct sequence, (b) A schematic diagram for an indirect sequence.

제일 높은 성분인 D를 마지막으로 얻어내므로 총 3개의 제품을 얻어내기 때문에 가능한 증류공정의 조합은 Fig. 1(a)와 Fig. 1(b)에

Table 2. Feedstock information

Component	Mole flow (K-mole/hr)
TiCl ₄	12.617
FeCl ₂	17.383
TaCl ₅	36.075
NbCl ₅	33.925
Temperature (°C)	25.0
Pressure (bar)	3.5
Flow rate (K-mole/hr)	100.0
Flow rate (Kg/hr)	22,666.568

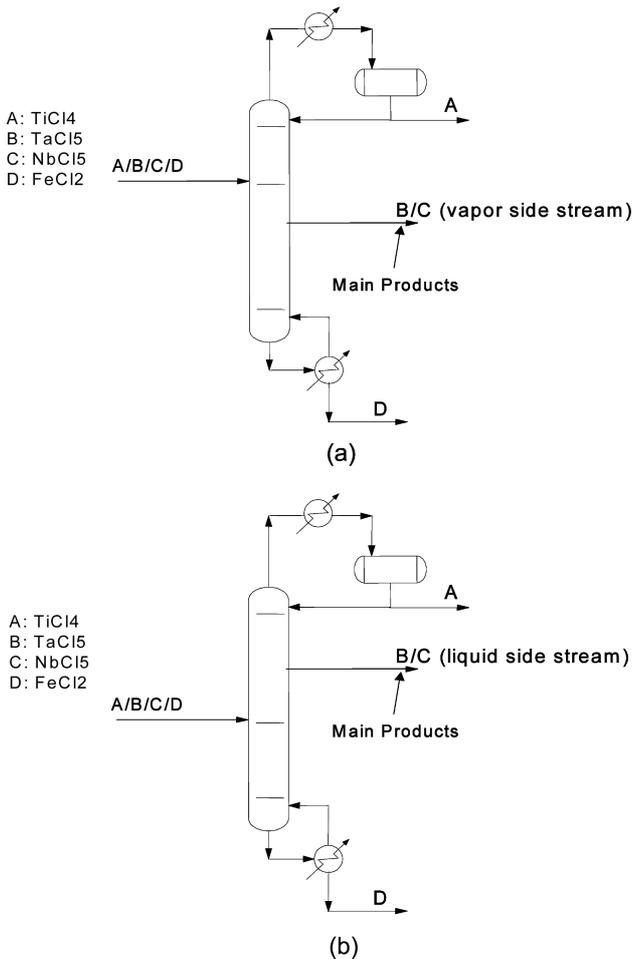


Fig. 2. (a) One feed and three products scheme: (Main products will be obtained as a vapor side stream.), (b) One feed and three products scheme: (Main products will be obtained as a liquid side stream.).

나타낸 2개의 조합만이 가능하다.

여기서, 두 개의 단순한 증류탑 사용에 대한 첫 번째 방법으로는 Fig. 2(a)에 보인 증류공정 배열이 우선 가능한 대안이 될 수 있다. 이 방법은 3개의 반응 생성물이 한 기의 증류탑으로부터 얻어진다. 통상적인 증류공정 배열과 비교할 때 어떤 조건범위에 대해서는 사실 위의 설계가 타당할 뿐만 아니라 초기 장치투자비용이나 운전비용 측면에서도 효율적이 될 수 있다. 만약 본 분리공정의 모델성분비와 같이 공급 원료가 분리목적물인 중간 끓는점 성분이

50% 이상이고, 가장 무거운 물질이 소량으로 존재한다면 Fig. 2(a)에서 보인 배열이 훌륭한 선택이 될 수 있다.

반면에 원료의 중간 성분이 지배적이고 가장 가벼운 성분이 소량으로 존재한다면 Fig. 2(b)에서 보인 배열이 훌륭한 선택이 될 수 있다. 이때는 가벼운 물질이 측면흐름을 지나서 탑정으로 올라가야 한다. 그러나 Fig. 2(a) 및 Fig. 2(b)와 같이 하나의 증류탑에서 3개의 제품을 얻어내는 경우는 기존의 작은 증류탑에 같은 크기의 증류탑을 하나 새로 추가하는 경우와 같이 기존 공정에 대한 증설 시에는 초기 장치 투자비용이 증가하기 때문에 오히려 비경제적이 될 수 있다. 따라서 본 연구에서는 Fig. 1(a)와 Fig. 1(b)의 증류배열만을 논의대상에 포함하였다.

3. TaCl₅와 NbCl₅ 분리공정 모델링

2기의 연속식 증류탑을 사용하여 99.99% 이상의 고 순도의 TaCl₅와 NbCl₅의 혼합제품을 생산해 내기 위한 공정 개요도는 언급한 바와 같이 Fig. 1(a)와 Fig. 1(b)에 나타난 바와 같다. 원료의 조성 과 온도, 압력 및 유량 조건은 Table 2에 정리한 것을 사용하였다. 또한, Table 3에는 Fig. 1(a)에 나타난 증류탑 배열과 Fig. 1(b)에 나타난 증류탑 배열에 대한 전산모사 조건 등을 나타내었다. Table 3에서 보는 바와 같이, 각각의 증류탑은 응축기와 재비기를 포함하여 methanol-H₂O 계의 예비실험에 의해 15단의 이론단수를 가정하였다. 또한, 각각의 증류탑은 상압 근처에서 조업하기 위해서 Overhead reflux drum의 운전압력은 1.1 bar로 정하였으며, 탑상의 운전압력은 1.3 bar로 정하였고, 증류탑 전체의 압력강하는 0.1 bar로 가정하였다. 또한, Overhead reflux drum의 운전온도는 냉각수로 충분히 응축시킬 수 있는 온도인 45 °C로 정하였다. 각각의 증류탑의 환류비를 몰 단위로 3.5로 운전하도록 설계하였으며, 냉각수의 공급온도는 32 °C로 회수온도는 40 °C로 정하였다. Fig. 3(a)

Table 3. Input conditions for simulation

	Direct sequence	Indirect sequence
First column		
Theoretical Stages	15	15
Stage1 pressure (bar)	1.1	1.1
Top pressure (bar)	1.3	1.3
Column pressure drop (bar)	0.1	0.1
Reflux drum temperature (°C)	45	45
Reflux ratio by mole	3.5	3.5
Distillate rate (k-mole/hr)	50	50
Feed tray location	7	7
Cooling water supply temperature (°C)	32	32
Cooling water return temperature (°C)	40	40
Second column		
Theoretical Stages	1.5	15
Stage1 pressure (bar)	1.1	1.1
Top pressure (bar)	1.3	1.3
Column pressure drop (bar)	0.1	0.1
Reflux drum temperature (°C)	45	45
Reflux ratio by mole	3.5	3.5
Distillate rate (k-mole/hr)	10	50
Feed tray location	7	7
Cooling water supply temperature (°C)	32	32
Cooling water return temperature (°C)	40	40

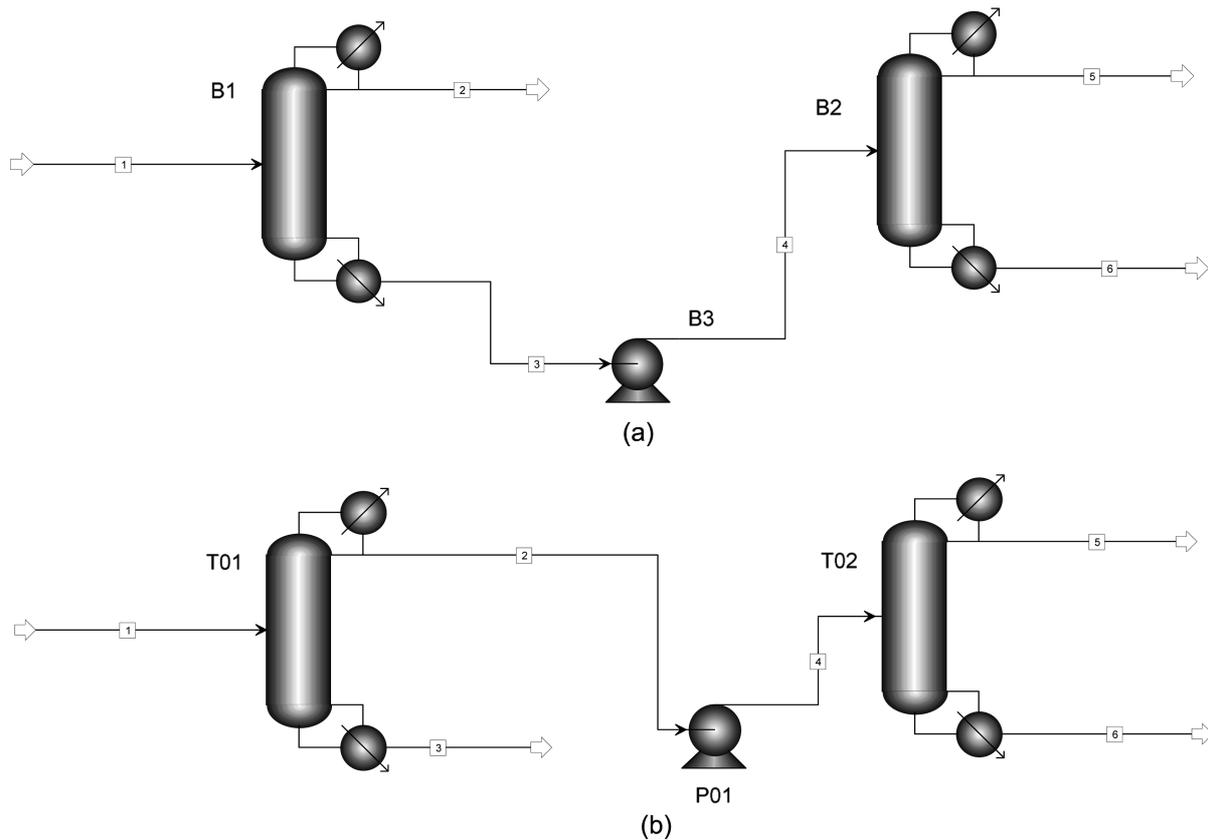


Fig. 3. (a) Flow sheet for direct sequence using Aspen Plus 13.1, (b) Flow sheet for indirect sequence using Aspen Plus 13.1.

와 Fig. 3(b)에는 Aspen Plus 13.1을 이용해서 본 연구에서 수행한 순차배열과 비 순차배열에 대해서 도시한 것을 나타내었다.

4. 결과 및 고찰

원료 혼합물로부터 상대휘발도가 가장 큰 $TiCl_4$ 와 상대휘발도가 가장 작은 $FeCl_2$ 로부터 원하는 성분인 $TaCl_5$ 와 $NbCl_5$ 를 분리해 내기 위해서 본 연구에서 사용한 순차배열과 비 순차배열에 대한 열 및 물질수지 결과를 Table 4와 Table 5에 각각 나타내었다. Table 4에

의하면 순차배열에 의한 $TaCl_5$ 와 $NbCl_5$ 의 순도는 99.99 wt% 이상이며 원료에 대한 회수율은 $TaCl_5$ 는 98.005%이고, $NbCl_5$ 는 99.692%로 나타났다. 또한, Table 5에 의하면 비 순차배열에 대한 $TaCl_5$ 와 $NbCl_5$ 의 순도는 99.99 wt% 이상이며, 원료에 대한 회수율은 $TaCl_5$ 는 98.028%이고, $NbCl_5$ 는 99.681%로 나타났다. 제품의 순도는 순차배열과 비 순차배열에서 차이가 없었으며, 원료에 대한 회수율은 $TaCl_5$ 에 대해서는 비 순차배열이 다소 좋게 나타났으며, $NbCl_5$ 에 대해서는 순차배열이 다소 높게 나타났다. Table 6은 순차배열과 비 순차배열에 대한 공정모사 결과를 요약한 것이

Table 4. Heat and material balance for direct sequence

	1	2	3	4	5	6
Temperature (°C)	25.0	45.0	271.5	271.7	45.0	691.6
Pressure (bar)	2.5	1.1	1.4	2.5	1.1	1.3
Mole Flow (k-mole/hr)	100.0	13.0	87.0	87.0	53.0	34.0
Mass Flow (kg/hr)	22,666.568	2,527.3205	20,139.2470	20,139.247	15,818.912	4,320.3351
Enthalpy (10^6 kcal/hr)	-14.6741	-2.4842	-11.4556	-11.4551	-9.8928	-1.9138
Mass Flow (kg/hr)						
$TiCl_4$	2,393.2951	2,393.2931	0.0020	0.0021	0.0020	0.0000
$TaCl_5$	6,226.8524	1,224.1001	6,102.7523	6,102.7523	6,102.6275	0.1248
$NbCl_5$	9,746.3153	9.9273	9,736.3880	9,736.3880	9,716.2825	20.1055
$FeCl_2$	4,300.1048	0.0000	4,300.1048	4,300.1048	0.0000	4,300.1048
Mass Percent						
$TiCl_4$	10.5587	94.6969	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
$TaCl_5$	27.4715	4.9103	30.3028	30.3028	38.5780	0.0029
$NbCl_5$	42.9986	0.3928	48.3453	48.3453	61.4219	0.4654
$FeCl_2$	18.9711	0.0000	21.5319	21.3519	0.0000	99.5317

Table 5. Heat and material balance for indirect sequence

	1	2	3	4	5	6
Temperature (°C)	25.0	45.0	701.1	45.2	45.0	250.0
Pressure (bar)	2.5	1.1	1.4	2.5	1.1	1.3
Mole Flow (k-mole/hr)	100.0	66.0	34.0	66.0	13.0	53.0
Mass Flow (kg/hr)	22,666.568	18346.234	4320.3338	18,346.2340	2526.9727	15819.2611
Enthalpy (10 ⁶ kcal/hr)	-14.6741	-12.3771	-1.9089	-12.3766	-2.4842	-9.3896
Mass Flow (kg/hr)						
TiCl ₄	2,393.2951	2393.2951	0.0000	2393.2951	2393.2942	0.0010
TaCl ₅	6,226.8524	6226.7330	0.1194	6226.7330	122.6871	6104.0459
NbCl ₅	9,746.3153	9726.2057	20.1096	9726.2057	10.9951	9715.2143
FeCl ₂	4,300.1048	0.0000	4300.1048	0.0000	0.0000	0.0000
Mass Percent						
TiCl ₄	10.5587	13.0452	0.0000	13.0452	94.7099	0.0000
TaCl ₅	27.4715	33.9401	0.0028	33.9401	4.8551	38.5862
NbCl ₅	42.9986	53.0147	0.4655	53.0147	0.4350	61.4138
FeCl ₂	18.9711	0.0000	99.5318	0.0000	0.0000	0.0000

Table 6. Process simulation results summary for direct sequence and indirect sequence

	Direct sequence	Indirect sequence
First Column		
Condenser heat duty (10 ⁶ Kcal/hr)	-0.7357	-5.7328
Reboiler heat duty (10 ⁶ Kcal/hr)	1.4701	6.1209
Top temperature (°C)	140.2	203.9
Bottom temperature (°C)	258.0	262.9
Reboiler return temperature (°C)	271.5	701.1
Second Column		
Condenser heat duty (10 ⁶ Kcal/hr)	-4.9121	-0.7319
Reboiler heat duty (10 ⁶ Kcal/hr)	4.5606	1.2347
Top temperature (°C)	244.1	140.2
Bottom temperature (°C)	261.6	249.0
Reboiler return temperature (°C)	691.6	250.0
Products		
Main product stream number	5	6
Main product purity (wt%)	100.0	100.0
TaCl ₅ recovery percent	98.005	98.028
NbCl ₄ recovery percent	99.692	99.681

다. Table 6에서 보는 바와 같이, 순차배열의 경우에는 첫 번째 증류탑의 heat duty가 응축기는 -0.7357×10^6 Kcal/hr이고 재비기는 1.4701×10^6 Kcal/hr로 적은 반면에 두 번째 증류탑의 heat duty는 응축기가 -4.9121×10^6 Kcal/hr이고 재비기는 4.5606×10^6 Kcal/hr 이므로 첫 번째 증류탑보다 두 번째 증류탑의 크기가 상대적으로 더 커야 함을 알 수 있다. 이는 순차배열에서는 끓는점이 가장 낮은 성분을 첫 번째 증류탑의 상부에서 먼저 제거하기 때문이다. 한편, 비 순차배열에서는 순차배열에서와는 반대로 첫 번째 증류탑의 heat duty가 응축기는 -5.7328×10^6 Kcal/hr이고 재비기는 6.1209×10^6 Kcal/hr로 매우 큰 반면에 두 번째 증류탑의 heat duty는 응축기가 -0.7319×10^6 Kcal/hr이고 재비기는 1.2347×10^6 Kcal/hr로 작다. 따라서 이는 비 순차배열에서는 첫 번째 증류탑이 두 번째 증류탑보다 크기가 상대적으로 더 커야 함을 알 수 있다. 이는 비 순차배열에서는 끓는점이 가장 높은 성분을 첫 번째 증류탑의 하부로 제거하기 때문에 가장 끓는점이 높은 성분을 제외하고 나머지 성분을 모두 첫 번째 증류탑의 상부로 끌어 올려야 하므로, 첫 번째 증

류탑이 상대적으로 커지게 되는 것을 알 수 있다. 순차배열과 비 순차배열을 상대적으로 비교하기 위해서 각각의 sequence에서 첫 번째 증류탑과 두 번째 증류탑의 응축기와 재비기의 heat duty의 합을 각각 비교해 보면, 순차배열에서는 응축기의 heat duty의 합은 -5.6478×10^6 Kcal/hr이고 재비기의 heat duty의 합은 6.0307×10^6 Kcal/hr이다. 한편, 비 순차배열에서는 응축기의 heat duty의 합은 -6.4647×10^6 Kcal/hr이고 재비기의 heat duty의 합은 7.3556×10^6 Kcal/hr임을 알 수 있다. 이는 제품의 순도와 회수율이 거의 비슷한 상황에서 비 순차배열이 순차배열에 비해서 응축기의 heat duty는 약 14% 이상 크게 소모되고, 재비기의 heat duty는 약 22% 가량 커짐을 알 수 있다. 따라서, 동일한 제품 성능을 낼 때 두 공정 사이의 비교는 순차배열이 비 순차배열에 비해서 우수함을 알 수 있다.

Fig. 4에는 순차배열에 대하여 두 번째 증류탑에서 주요 성분에 대하여 액상의 조성을 각 단의 함수로 도시하였다. Fig. 4에 의하면 가장 가벼운 성분인 TiCl₄는 전 증류단에 걸쳐서 액상의 몰 조성이 10^{-7} 에서 10^{-18} 범위에 걸쳐서 있으므로 무시할 수 있을 정도

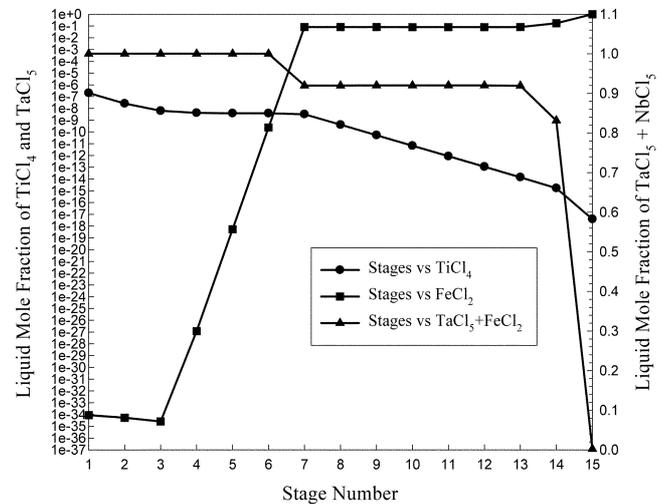


Fig. 4. Plot of liquid mole fraction of each component vs. stage number for direct sequence.

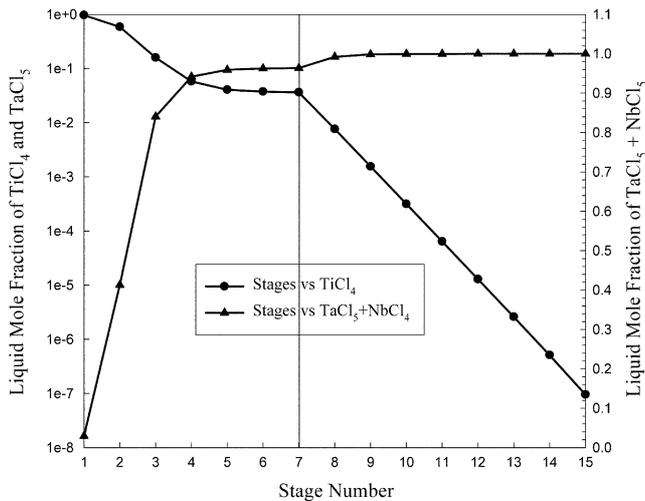


Fig. 5. Plot of liquid mole fraction of each component vs. stage number for indirect sequence.

로 적인 양으로 분포함을 알 수 있다. 이는 순차배열에서는 가장 가벼운 성분이 첫 번째 증류탑의 탑상부로 가장 먼저 제거되기 때문이다. 또한, 가장 무거운 성분인 $FeCl_2$ 는 원료 주입 단인 7단을 기준으로 탑상부로 갈수록 성분의 조성이 급격하게 줄어들며, 탑하부로 갈수록 성분의 조성이 거의 1에 가깝게 유지됨을 알 수 있다. 또한, 본 증류공정에서 원하는 성분인 $TaCl_5$ 와 $NbCl_5$ 의 조성을 더한 값은 원료 주입 단을 기준으로 하여 탑상부로 갈수록 값이 증가하여 탑상부에서는 거의 1에 가깝게 유지됨을 알 수 있다. 이는 원하는 성분들의 끓는점이 중간 범위에 속하기 때문에 두 번째 증류탑의 탑상부에서 얻어지기 때문이다. 그리고 Fig. 5는 비 순차배열에 대하여 두 번째 증류탑에서 가장 가벼운 성분인 $TiCl_4$ 와 원하는 성분인 $TaCl_5$ 와 $NbCl_5$ 성분의 조성을 더한 것을 증류탑의 단의 함수로 도시한 것이다. 비 순차배열에서는 첫 번째 증류탑의 탑저로 가장 무거운 성분인 $FeCl_2$ 를 제거하기 때문에 두 번째 증류탑에서는 거의 검출되지 않으므로 그림에 도시하지 않았다. 두 번째 증류탑의 탑상제품으로 가장 가벼운 성분인 $TiCl_4$ 를 얻어내기 때문에 탑상에서 $TiCl_4$ 조성이 거의 1이 되며 탑저에서는 거의 검출되지 않는 것으로 나타났다. 한편, 두 번째 증류탑의 탑저로 원하는 성분인 $TaCl_5$ 와 $NbCl_5$ 가 얻어지기 때문에 원료 주입 단인 제 7단을 기준으로 해서 탑저로 갈수록 조성이 점점 증가하여 탑저에서 $TaCl_5$ 와 $NbCl_5$ 혼합액의 조성은 거의 1이 되었다.

5. 결 론

본 연구에서는 전자산업 및 초전도 산업에서 주로 사용되고 있는 99.99 wt% 이상의 고 순도의 $TaCl_5$ 와 $NbCl_5$ 를 2기의 증류탑

을 통해서 분리해 내기 위한 전산모사 작업에 대한 비교 연구를 수행하였다. 비교연구 결과 순차배열과 비 순차배열에 대하여 제품의 순도는 모두 거의 100% 근처의 값을 얻었으나, 응축기의 heat duty는 약 14% 이상, 재비기의 heat duty는 약 22% 가량이 비 순차배열이 순차배열에 비하여 크기 때문에 순차배열이 좀 더 우수함을 알 수 있었다.

감 사

이 연구는 한국지질자원연구원에서 한국산업기술평가원 핵심개발연구사업으로 수행하는 과제의 위탁연구보고서입니다.

참고문헌

1. Tantalum Ore & Power: From Rocks to Cell phones: Feature, *Passive Component Industry* Jan/Feb(2000).
2. Zhulanov, O. N., Titov, A., Yukov, A. G., Martinov, V. and Malyshchev, A., "New Aspects in Development of the Chloride Process for Tantalum-niobium Raw Materials," *Russian J. Non-Ferrous Metals*, **38**(10), 33-37(1997).
3. Gonzalez, J., Gennari, G., Bohe, A., Ruez, D. C., Rivarola, J. and Pasquevich, D. M., "Chlorination of Niobium and Tantalum Ore," *Thermochimica Acta*, **311**, 61-69(1998).
4. Kim, B. S. and Choi, Y. Y., "Kinetics of the Chlorination Reaction of Tantalum Pentoxide with Carbon Tetrachloride Gas," *Materials transactions*, **46**(9), 2102-2106(2005).
5. Gupta, C. K., "Extractive Metallurgy of Niobium, Tantalum, and Vanadium," *Int. Metals Riview*, **29**(6), 401-444(1984).
6. Agulyansky, A., *The Chemistry of Tantalum and Niobium Fluoride Compounds*, Elsevier(2004).
7. Dortmund Data Bank (DDB), DDBST Software & Separation technology GmbH(2006).
8. Fredenslund, A., Jones, R. L. and Prausnitz, J. M., "Group Contribution Estimation of Activity Coefficients in Nonideal Liquid Mixtures," *AIChE J.*, **21**(6), 1086-1099(1975).
9. Aspen Plus, Release 13.1 User Manual(2004).
10. Aspen Plus, Release 13.1 Reference Manual: Physical Property Methods and Models(2004).
11. Barniki, S. D. and Fair, J. R., "Separation System Synthesis: A Knowledge-Based Approach. 1. Liquid Mixture Separations," *Ind. Eng. Chem. Res.*, **29**(31), 1679-1694(1992).