

## Zinc Titanate의 황화반응 특성 및 미반응핵 모델에 의한 반응속도

나재익 · 박소진<sup>†</sup> · 위영호\* · 이창근\*\* · 이태진\*\*\*

충남대학교 공과대학 화학공학과

\*한국전력연구원

\*\*한국에너지기술연구소 에너지환경연구부

\*\*\*영남대학교 공과대학 화학공학과

(1998년 9월 8일 접수, 1999년 3월 22일 채택)

## Sulfidation Reactivity of Zinc Titanate Sorbent and Reaction Kinetics by Unreacted Core Model

Jae-Ik Na, So-Jin Park<sup>†</sup>, Young-Ho Wi\*, Chang-Keun Yi\*\* and Tae-Jin Lee\*\*\*

Department of Chemical Engineering, Chungnam National University

\*Korea Electric Power Research Institute

\*\*Energy & Environmental Research Dept., Korea Institute of Energy Research

\*\*\*Department of Chemical Engineering, Yeungnam University

(Received 8 September 1998; accepted 22 March 1999)

### 요 약

1.5 ZnO : 1.0 TiO<sub>2</sub>로 구성되어진 탈황제와 H<sub>2</sub>S의 황화반응은 전체반응속도가 물질전달저항, 내부확산저항, 화학반응저항에 의해 지배된다는 미반응핵모델을 사용하여 설명할 수 있다. 그러나 600 °C이하의 낮은 온도범위에서의 반응은 전체반응속도가 화학반응저항만으로 지배되는 특별한 미반응핵모델에 의해 설명될 수 있다. 본고에서 반응속도상수를 전체반응속도가 화학반응저항에 의해 지배되는 미반응핵 모델식에 의해 계산하였으며, 겉보기 활성화에너지를 Arrhenius식에 의해 계산하였다. 그 결과 ZT01의 겉보기 활성화에너지는 9,010 cal/mol이었고, ZT02의 겉보기 활성화에너지는 10,350 cal/mol이었다.

**Abstract** – The sulfidation reaction between H<sub>2</sub>S and a desulfurization sorbent composed of 1.5 ZnO : 1.0 TiO<sub>2</sub> can be described by the unreacted core model in which the global reaction rate is controlled by mass transfer, product layer diffusion and chemical reaction resistance. But at a low temperature like below 600 °C, sulfidation reaction can be described by the special case of the unreacted core model which assumes that the global reaction rate is controlled only by the chemical reaction resistance. In this work, the reaction rate constants were determined by using this special case of unreacted core model and apparent activation energy was calculated by the Arrhenius equation. Apparent activation energies were 9,010 cal/mol(ZT01) and 10,350 cal/mol(ZT02).

Key words: Desulfurization Sorbent, Zinc Titanate, IGCC, TGA, H<sub>2</sub>S

### 1. 서 론

석탄은 다른 화석연료에 비해 세계적으로 충분한 매장량, 저렴한 가격 및 공급의 안정성 등으로 화력발전의 근간 연료로 사용되어 오고 있으며, 현재의 증가 추세로 미루어 2000년대초에는 현재보다 30% 이상 소비가 증가할 것으로 예상된다. 그러나 현재의 미분탄 연소방식으로는 화력발전소의 입지선정 및 환경측면에서 매우 불리하며, 점진적으로 강화되고 있는 환경규제로 인한 문제점 등으로 석탄가스화복합발전 등 환경오염을 저감할 수 있는 석탄이용기술의 개발이 세계적인 추세이다.

현재 미국 등 선진국에서 상업화를 시도하고 있는 석탄가스화복합발전은 기존의 석탄 직접 연소 방식에 비하여 발전 열효율이 높고, 환경오염 방지가 가능한 차세대 전력생산기술로 각광을 받고 있다. 석탄가스화 반응은 환원조건에서 이루어지므로 석탄 속의 유황성분은 H<sub>2</sub>S 또는 COS의 형태로 변한다. 따라서 전력생산을 위한 주요한 설비인 가스터빈의 부식을 방지하기 위하여 석탄가스 중의 H<sub>2</sub>S와 COS는 반드시 제거되어야 하며, 이를 위해 기존의 200 °C 미만에서 사용하는 습식법에 비해서, 고온에서 H<sub>2</sub>S를 제거한 후 그 고온청정가스를 곧바로 가스터빈에 이용함으로써 2-5%의 열효율을 상승시킬 수 있는 고온건식 탈황기술에 대한 연구가 진행되고 있다[1, 2].

석탄가스화복합발전은 크게 석탄가스화로, 가스정제 및 발전부분으로 구성되어 있으며, 이 중 탈황공정은 가스정제 부분에 속하는 것으로

<sup>†</sup>E-mail : sjpark@hanbat.chungnam.ac.kr

로 고체상의 금속산화물 탈황제를 사용하여 가스화로부터 생성되어 나오는 석탄연료가스 중  $H_2S$  또는  $COS$ 를 선택적으로 흡수, 제거하는 탈황공정, 황화합물을 흡수한 탈황제를 재생시켜 본래의 성능으로 재사용할 수 있게 만드는 재생공정, 그리고 재생공정에서 발생하는  $SO_2$ 를 원소황으로 변환시켜 회수하는 유황회수공정으로 구성되어 있다. 그러므로 고온건식 탈황에 관련된 핵심기술은 적절한 탈황제의 개발과 탈황탑 및 재생탑의 공정기술로 나누어 볼 수 있다.

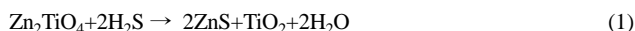
고온건식 탈황법에서 탈황제의 황화, 재생 반응은 비촉매 기-고 반응이며, 비촉매 기-고 반응은 많은 화학 공정 산업에서 접하게 된다. 이 비촉매 기-고 반응의 주된 응용은 추출아금, 대기오염물의 조절, 석탄 가스화 공정, 고체 연료의 연소, 촉매의 제조 등에서 찾아 볼 수 있으며, 이러한 비촉매 기-고 반응속도의 수학적 모사는 실험 데이터의 설명, 공정의 설계 그리고 scale-up에 있어서 매우 중요한 정보가 된다[3].

본 연구에서는 내구성이 우수하고 황화반응의 온도범위를 높게 유지할 수 있으며 높은 환원성 연료가스 조성에서도 견딜 수 있는 장점이 있는 zinc titanate의 황화 반응을 관찰하고 황산화 에너지를 구하여 반응성을 평가하였으며, zinc titanate와  $H_2S$ 의 비촉매 기-고반응을 미반응핵 모델에 적용하여 반응속도를 예측하였다.

## 2. 이론적 고찰

### 2-1. 화학적 반응기구

Zinc titanate 탈황제는  $ZnO$ 와  $TiO_2$  분말을 고온에서 소결하여 합성되며,  $ZnO/TiO_2$ 의 비에 따라서  $Zn_2TiO_4$ (zinc ortho-titanate),  $ZnTiO_3$ (zinc meta-titanate), 그리고  $Zn_2Ti_3O_8$ (zinc sesquit-titanate) 등의 세 가지 종류의 결정구조로 합성된다[4]. 세 가지 zinc titanate 중에서 zinc/titanate의 비가 가장 높은  $Zn_2TiO_4$ 가 황 수용능력이 가장 높으며, 석탄가스로부터 황화반응이 일어나는 총괄반응식은 다음과 같다.



Zinc titanate의 황화반응은 복잡한 단계로 반응하는 철계 탈황제와 비교해 볼 때 반응이 양면적으로 진행되기 때문에 쉽게 계산되어진다. 이 산화물의 황화반응은 티타늄과 상관없이 아연에 의해서만 반응이 일어나므로 아래의 식 (2)와 같이 표현할 수 있다.



황화반응이 일어나는 동안에 부반응으로는 수소와 일산화탄소에 의해서 zinc titanate의 환원이 일어나 금속 아연이 생성되며, 반응이 더 진행되면 고온에서 증발에 의한 아연의 손실이 일어난다[5].

### 2-2. 미반응핵 모델

고온건식 탈황제와  $H_2S$  등 황화합물과의 반응은 비촉매 기고 반응이며, 일반적인 형태는 다음과 같다.



이 반응의 전체 반응속도를 결정하기 위한 미반응핵 모델에 의하면 반응 중에 다음의 5단계가 차례로 일어난다. 첫 번째 단계는 기체상 반응물 A가 입자를 둘러싸고 있는 막을 통하여 고체 표면으로 확산하는 단계이며, 두 번째 단계는 반응물 A가 ash층을 통과하여 미반응핵 표면으로 침투 및 확산하는 단계이다. 또한 세 번째 단계는 반응 표면에서 기체상의 A와 고체가 반응하는 단계이고, 네 번째 단계는 기체상 생성물이 ash층을 통과하여 고체 바깥표면으로 확산되는 단계이며, 다섯 번째 단계는 기체상 생성물이 기체막을 통하여 유체본체로 확산되는 단계이다. 그러나 기체상의 생성물이 생기지 않거나 비가역 반응인 경우 네 번째와 다섯 번째 단계는 반응에 대한 저항으로서의 직접

적인 영향이 없다. 또한 각 단계의 저항의 크기는 대체로 상당히 다르므로 이 경우 가장 저항이 큰 단계가 속도 지배단계가 된다[6].

미반응핵 모델은 1955년에 Yagi와 Kunii[7]에 의해서 처음 개발되었고 비촉매 기-고 반응 모델들 중 가장 단순한 형태로 많이 사용되고 있다. 미반응 고체 물질의 공극률이 작은 경우 반응기체가 입자내부까지 침투하면서, 반응은 입자의 외표면 근방에서 일어나며, 이 반응표면은 점점 입자내부로 향해서 이동하여 간다. 미반응핵 모델은 반응고체와 생성물 사이의 경계면에서 반응이 일어난다고 가정하고, 1개의 고체입자가 일정한 농도를 갖는 기체와 접촉하여 식 (3)과 같은 기-고 반응이 일어날 때, 시간변화에 따른 고체의 전환율( $X_s$ )을 유도하는 것이다[8].

### 2-3. 황화반응의 수학적 모사

고온건식 탈황법에서 탈황제의 황화반응은 비촉매 기-고 반응이며, 전체 반응속도를 결정하는 방법은 열전달과 물질전달의 상호작용과 반응경로에 따른 고체 물질 변화의 영향과 가변성질에 대한 설명이 필요하기 때문에 매우 복잡하다. 본고에서는 우선 가장 단순한 미반응핵 모델을 적용하여 zinc titanate 탈황제의 탈황반응을 해석하고자 한다.

구형 탈황제의 황화반응시 반응고체와 생성물사이의 경계면에서 반응이 일어난다는 가정하에 1개의 고체입자가 일정한 농도를 갖는 기체와 접촉하여 식 (3)과 같은 기-고 반응이 일어날 때, 시간변화에 따른 고체의 전환율( $X_s$ )은 미반응핵 모델에 의해 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} t_{total} &= \alpha X_s + \beta f(X_s) + \gamma g(X_s) \quad (4) \\ \text{여기서, } f(X_s) &= 1 - 3(1 - X_s)^{2/3} + 2(1 - X_s) \\ g(X_s) &= 1 - (1 - X_s)^{1/3} \\ \alpha &= \frac{C_{SO}R}{3bk_{mA}C_{AO}}, \quad \beta = \frac{C_{SO}R^2}{6bD_eC_{AO}}, \quad \gamma = \frac{C_{SO}R}{bkC_{AO}} \end{aligned}$$

식 (4)의 우변 첫 번째 항은 경막확산을 표현한 것이며, 두 번째 항은 ash층을 통한 확산, 세 번째 항은 화학반응을 표현한 것이다[6, 9].

고온에서는 황화반응이 진행됨에 따라 저항들의 반응속도에 미치는 영향은 상당히 복잡한 단계를 거쳐 이루어진다. 즉, 고온반응에서는 전 구간에서 한 단계만이 반응속도를 지배하지 않고, 경막확산과 ash층을 통한 확산 저항이 동시에 반응속도를 지배한다. 따라서 고온반응을 모사하기 위해서는 유효확산계수와 물질전달계수 등을 고려하여 반응속도를 모사해야 할 필요가 있다. 그러나 600°C이하의 낮은 온도에서는 화학반응 저항이 전체 반응속도를 지배하므로 물질전달계수와 유효확산계수는 무시되며, 식 (4)는 다음과 같이 간단히 표현된다[10].

$$t = \frac{C_{SO}R}{bk_sC_{AO}} \left| 1 - \left| 1 - X_s \right|^{1/3} \right| \quad (5)$$

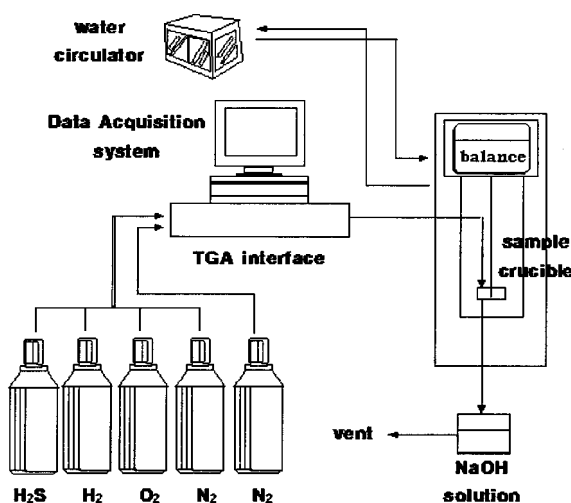
식 (5)를 이용하여 TGA 실험에 의한 중량변화 데이터와 상관시켜 반응속도 상수를 계산한다.

## 3. 실험

### 3-1. 시료

Zinc titanate탈황제는  $ZnO$ 와  $TiO_2$ 의 혼합물비를 1.5로 하여  $ZnO$ 와  $TiO_2$ 를 100  $\mu m$ 이하의 미분말로 분쇄한 후 전체 시료량에 대하여 2 wt%의 bentonite 또는 2 wt%의 kaoline을 첨가하여 성형압축기에 넣어 실린더형 입자를 만들었다. 이렇게 만들어진 입자를 800°C에서 2시간 동안 소성하고, 분쇄한 후 150-300  $\mu m$  크기로 체가름하였다[11].

### 3-2. 실험장치



**Fig. 1. Shcematic diagram of STA(Rheometric Scientific Ltd.).**

탈황제의 황화반응시 무게감량에 의한 반응정도를 측정하기 위해 사용한 수직형 TGA로 개략적인 구성도를 Fig. 1에 나타내었다. 이 장치는 반응기체를 최대 87 cm<sup>3</sup>/min까지 흘려 보낼 수 있는 수직형 TGA (Rheometric Scientific STA)로 DSC를 동시에 사용할 수 있는 기종이며, furnace의 냉각방식은 수냉방식이다. 시료의 무게는 최대 400 mg까지 측정할 수 있으며, 반응기체를 2개까지 자동으로 교환할 수 있다. TGA 반응기의 제어 및 특징치의 저장은 Data Acquisition System에 의해 이루어진다. 이 Data Acquisition System에 의해 TGA furnace를 0.2-60 °C/min 범위의 속도로 가열할 수 있으며, 최고 1,500 °C 까지 노내 온도를 변화시킬 수 있다. TGA와 Data Acquisition System 사이에 system interface가 있어 Data Acquisition System의 Program이 실제 동작되며, 가스가 자동으로 교환된다. 또한 컴퓨터에 저장된 결과를 시간, 온도, 무게 감량, 감량속도 등으로 도시할 수 있다. 불활성 기체로 99.999%의 질소 가스를 사용하였으며, 실험용 모사가스는 한국표준연구원에서 주문 생산된 것으로 H<sub>2</sub>S 13.3%(N, balance)였다.

### 3-3. 실험방법

탈황제의 황 흡작량과  $\text{H}_2\text{S}$ 의 전환율을 보기 위하여 질소로 purge 하여 TGA를 안정시킨 후 TGA 반응기의 온도가 등온에 도달된 다음 1.88 vol%의  $\text{H}_2\text{S}(\text{N}_2 \text{ balance})$ 를 주입시키면서 시간에 따른 흡작제의 무게변화를 관찰하였다. 이때 반응가스의 유량은 80 ml/min로 고정하였고, 반응을 진행시켜 TGA의 무게증가가 더 이상 일어나지 않는 시간까지 반응시켜  $\text{H}_2\text{S}$  전환율과 탈황능력을 비교 관찰하였다.

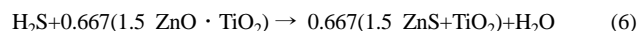
**Table 1. Experimental conditions and physical properties of zinc titanate sorbent**

Properties	Condition			
Designation	ZT01	ZT02	Flow rate (ml/min)	80
Composition	1.5 ZnO/TiO <sub>2</sub>	1.5 ZnO/TiO <sub>2</sub>		
Additive	Kaoline 2.0%	Bentonite 2.0%	Gas composition (vol%)	H <sub>2</sub> S 1.88 N <sub>2</sub> Balance
Particle mean size(cm)	$225 \times 10^{-4}$	$225 \times 10^{-4}$		
BET surface area(m <sup>2</sup> /g)	2.51	3.19	Pressure (atm)	1
Pore volume(cc/g)	$3.95 \times 10^{-3}$	$4.66 \times 10^{-3}$	Temperature (°C)	550-600
Density(g/cm <sup>2</sup> )	3.02	4.20		

또한 모델식의 변수를 반응속도 상수로 고정하기 위하여 반응온도를 550-600 °C의 낮은 온도범위에서 변화시키며 실험을 수행하였다. Table 1에 실험조건 및 시료의 기초물성을 나타내었다.

#### 4. 결과 및 고찰

Zinc titanate의 황화반응은 복잡한 단계로 반응하는 철계탈황제와 비교해 볼 때 반응이 1단계로 진행되기 때문에 반응식은 간단하게 표현할 수 있다. 즉, 1.5 ZnO : 1.0 TiO<sub>2</sub>로 구성되어진 탈황제와 H<sub>2</sub>S 반응의 경우 황화반응이 일어나는 총괄반응식은 식 (6)과 같이 표현할 수 있다[9].

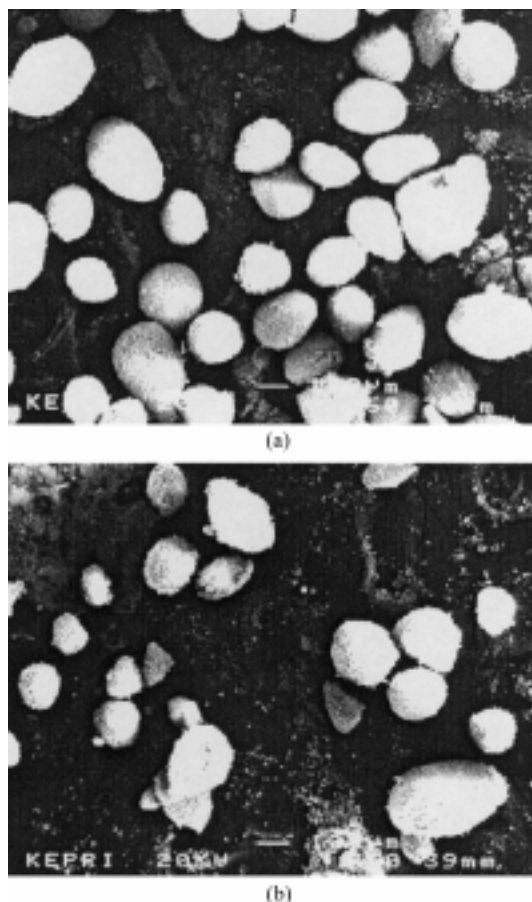


식 (6)과 연결하여 zinc titanate가 황화합물로 반응하는 전환율을 식 (7)에 정의하였다.

$$X_s = \frac{W(t) - W_0}{W_f - W_0} \quad (7)$$

$W_0$ 는 탈황제의 초기무게이고,  $W_f$ 는 최종무게이며,  $W(t)$ 는 시간에 따른 탈황제의 무게를 나타낸다.

탈황제의 황화반응 실험 데이터를 입자의 형상에 따른 미반응핵 모델식에 적용하기 위하여 SEM분석해 본 결과 Fig. 2에서 보는 바와 같이 구형에 가까운 형태를 띠고 있었다. 따라서 실험 데이터를 구형 입자의 미반응핵 모델식인 식 (4)에 적용하므로써 탈황제의 반응속도



**Fig. 2. Scanning electron microscopy of fresh zinc titanate.**  
(a) ZT01, (b) ZT02

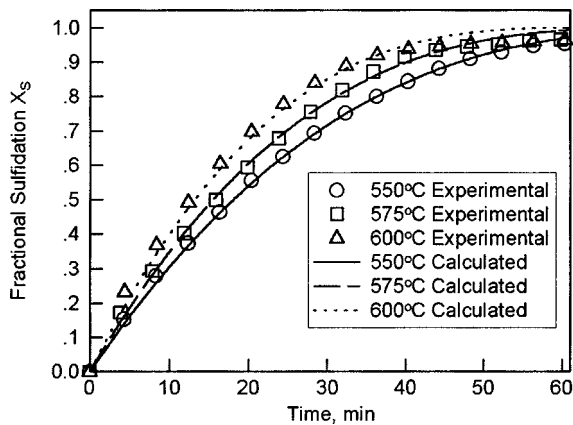


Fig. 3. Comparison of calculated conversion curves by unreacted core model with the experimental data for sulfidation reaction of ZT01.

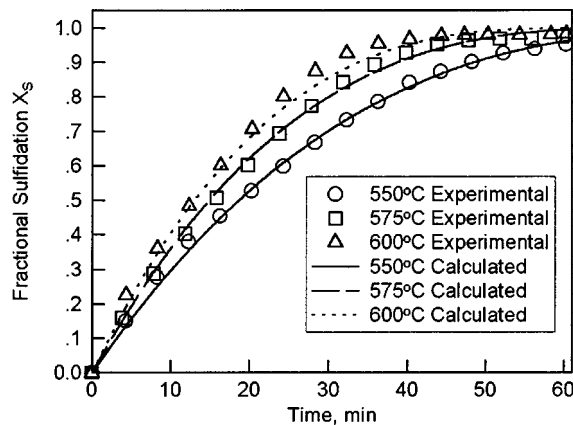


Fig. 4. Comparison of calculated conversion curves by unreacted core model with the experimental data for sulfidation reaction of ZT02.

상수( $k$ ), 물질전달계수( $k_m$ ), 유효확산계수( $D_e$ ) 등을 계산할 수 있다.

식 (7)에 의해 계산된 zinc titanate의 온도에 따른 전환율을 Fig. 3-4에 나타내었다. Fig. 3-4에서 보는 바와 같이 반응시간의 경과에 따라 온도가 높을수록 황화 전환율이 증가하였다. 그러나 최종 전환율은 온도에 상관없이 거의 같은 값을 나타냈다. 이는 온도에 따라 최종 질량변화가 심한 철계탈황제 보다 zinc titanate가 온도에 따라 영향을 적게 받음을 의미한다. 또한 황화반응 실험결과 평균 황화반응 종결시간은 60분 정도가 소요되었으며, sulfur capture 능력은 약 13 wt%로 나타났다.

황화반응이 진행됨에 따라 저항들의 반응속도에 미치는 영향은 상당히 복잡한 단계를 거쳐 이루어진다. 그러나 Woods 등이 보고한 바에 의하면 입자의 크기가 작은 경우 입자 내부에서의 확산은 반응의 저항으로 관여하지 않으며, 낮은 온도에서는 화학반응 저항이 전체 반응속도를 지배한다고 하였다. 따라서 식 (5)를 사용하여 반응속도 상수( $k$ )를 구하였다[11].

실험데이터를 앞에서 언급한 가정에 따라 모델식에 적용하여 시간( $t$ )과 전환율( $X_s$ )에 대하여 도식한 결과를 Fig. 3-4에 실선과 점선으로 나타내었다.

Fig. 3-4에서 보는 바와 같이 반응온도가 증가할수록 황화반응의 종결시간이 짧아졌으며, 낮은 온도에서의 상관결과가 실험값에 더 근접함을 알 수 있다.

미반응핵 모델을 사용하여 계산된 각 온도에 따른 반응속도 상수를

Table 2. Reaction rate constants of zinc titanate sorbents calculated by unreacted core model

Designation	ZT01(cm/min)	ZT02(cm/min)
550 °C	$4.0022 \times 10^{-2}$	$3.8642 \times 10^{-2}$
575 °C	$4.6673 \times 10^{-2}$	$4.8423 \times 10^{-2}$
600 °C	$5.4874 \times 10^{-2}$	$5.5474 \times 10^{-2}$

Table 2에 나타내었으며, 온도의 변화에 따라 반응속도 상수가 다르므로, 식 (8)로 표현되는 Arrhenius식을 이용하여 온도와 반응속도 상수의 관계를 나타낼 수 있다.

$$k = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (8)$$

식 (8)의 양변에 대수를 취하여 정리하면,

$$\ln k = -\left(\frac{E}{R}\right)\left(\frac{1}{T}\right) + \ln A \quad (9)$$

식 (9)를 이용하여 각 탈황제의 겉보기 활성화에너지( $E$ )와 빈도계수를 구할 수 있으며,  $\ln k$ 와  $1/T$ 에 대한 결과를 Fig. 5-6에 나타내었으며, 각 탈황제의 겉보기 활성화에너지와 빈도계수를 계산하여

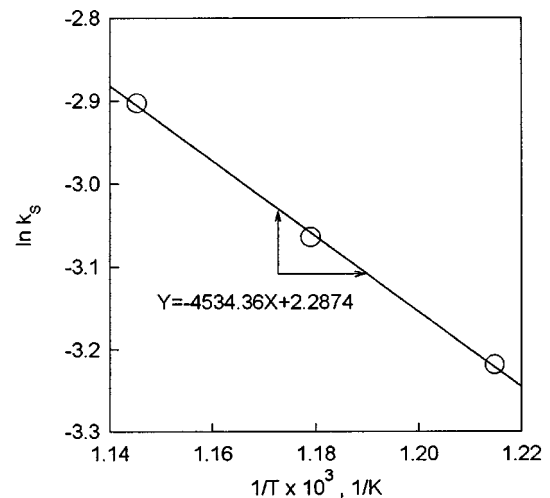


Fig. 5. Temperature dependence of the reaction rate constants for ZT01.

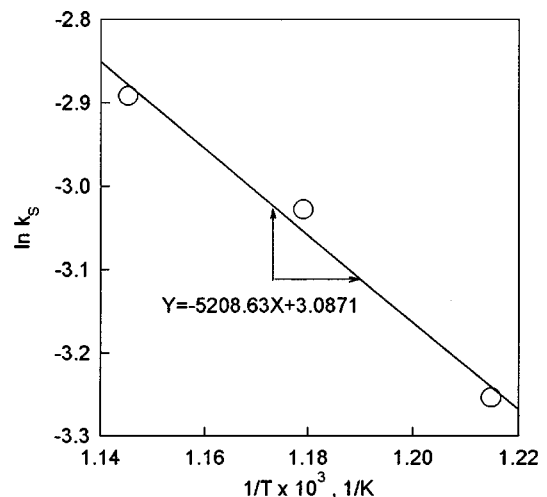


Fig. 6. Temperature dependence of the reaction rate constants for ZT02.

**Table 3. Comparison of apparent activation energy and pre-exponential factor calculated by unreacted core model**

	ZT01	ZT02
Apparent activation energy(cal/mol)	9,010	10,350
Pre-exponential factor(cm/min)	9.85	21.91

**Table 4. Comparison of reaction rate constants calculated by unreacted core model and mass transfer coefficients calculated by Frossling eq.**

	ZT01	ZT02	Mass transfer
	Reaction rateconstant(cm/min)		coefficient(cm/min)
550 °C	$4.0022 \times 10^{-2}$	$3.8642 \times 10^{-2}$	5,518
575 °C	$4.6673 \times 10^{-2}$	$4.8423 \times 10^{-2}$	5,801
600 °C	$5.4874 \times 10^{-2}$	$5.5474 \times 10^{-2}$	6,089

Table 3에 나타내었다. 또한 앞서 낮은 온도에서는 화학반응 저항이 전체 반응속도를 지배한다는 가정의 타당성을 검토하기 위해 Frossling식[12]을 사용하여 물질전달계수를 계산하였으며, 이를 Table 4에 나타내었다. Table 4에 의하면 물질전달계수가 반응속도 상수에 비해 상대적으로 현격하게 큼을 알 수 있다. 이는 입자의 크기가 작고 유속이 느림으로 인해 나타나는 현상이며, 이로부터 물질전달계수는 반응의 저항으로 작용하지 않음을 알 수 있었다.

따라서 미반응핵 모델에 의해 계산된 ZT01의 반응속도 상수(k)는 식 (10)과 같이 표현되며,

$$k=9.85 \times e^{-9,010/RT}, \text{ cm/min} \quad (10)$$

ZT02의 반응속도 상수는 식 (11)과 같이 표현된다.

$$k=21.91 \times e^{-10,350/RT}, \text{ cm/min} \quad (11)$$

## 5. 결 론

고온건식 탈황반응에 있어 zinc titanate 탈황제는 탈황반응 후 온도에 관계없이 최종무게비가 일정하게 나타났으며, 이는 온도에 따라 최종 질량변화가 심한 철계탈황제 보다 zinc titanate가 온도에 따라 영향을 적게 받음을 의미한다. 또한 550-600 °C 비교적 낮은 실험온도 범위에서는 반응온도가 증가할수록 황화반응의 종결시간이 짧았으며, 황화반응이 율속단계인 미반응핵 모델로 표현할 수 있었다.

황화반응의 모델링으로부터 반응속도 상수를 온도의 함수로 표현하여, 이 결과로부터 겉보기 활성화에너지가 작은 ZT01의 반응성이 우수함을 확인하였다.

## 감 사

본 연구는 대체에너지 선도기술개발(G7)사업의 일환으로 수행되었습니다. 연구비 지원에 감사드립니다.

## 사용기호

A : pre-exponential factor  
A(g) : gas reactant  
B(s) : solid reactant

b, c, d : stoichiometric coefficient of reaction  
 $C_{A0}$  : bulk concentration of gaseous reactant [mol/length<sup>3</sup>]  
 $C_{S0}$  : initial concentration of the solid reactant [mol/length<sup>3</sup>]  
 $D_e$  : effective diffusivity of the gas [length<sup>2</sup>/time]  
E : apparent activation energy [cal/mol]  
 $f(X_s)$  : diffusion function defined by Eq. (4)  
 $g(X_s)$  : reaction function defined by Eq. (4)  
 $k_m$  : mass transfer coefficient [length/time]  
k : reaction rate constant [length/time]  
R : radius of particle of pellet [length]  
T : temperature [K]  
t : time  
 $X_s$  : fractional conversion [dimensionless]  
W(t) : mass of sorbent pellet  
 $W_0$  : initial mass of sorbent pellet  
 $W_f$  : final mass of sorbent pellet

## 그리스 문자

$\alpha$  : diffusion parameter defined by Eq. (4) [time]  
 $\beta$  : mass transfer parameter defined by Eq. (4) [time]  
 $\gamma$  : chemical reaction parameter defined by Eq. (4) [time]

## 참고문헌

- Chen, H. T., Klett, M. G., Rutkowski, M. D. and Zaharchuk, R.: Proceedings of the Coal-Fired Power Systems 93, DOE/METC-93/6131, 359(1993).
- Park, Y. S., Rhee, Y. W. and Son, J. E.: *Chemical Industry and Technology*, **11**, 366(1993).
- Ramachandran, P. A. and Doraiswamy, L. K.: "Modeling of Noncatalytic Gas-Solid Reactions," *AIChE J.*, **28**, 881(1982).
- Dulin, F. H. and Rase, D. E.: *J. Am. Ceram. Soc.*, **43**, 125(1960).
- Gangwal, S. K., Wood, M. C., Harrison, D. P., Groves, F. R. and Jothimurugesan, K.: In Proceedings of the 8th Annual Gasification and Gas Stream Cleanup System Contractor's Review Meeting, ed. Kothari, V. P., Longanbach, J. R., **1**, 181(1988).
- Szekely, J., Evans, J. W. and Sohn, H. Y.: "Gas-Solid Reaction," Academic Press, New York(1976).
- Yagi, S. and Kunii, D.: "Fifth International Symposium on Combustion Reinhold," New York(1955).
- Levenspiel, O.: "Chemical Reaction Engineering," John Wiley & Sons, Inc., 2nd ed., 357(1972).
- Jothimurugesan, K. and Harrison, D. P.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **29**, 1167(1990).
- Woods, M. C., Leese, K. E., Gangwal, S. K., Harrison, D. P. and Jothimurugesan, K.: "Reaction Kinetics and Simulation Models for Novel High-Temperature Desulfurization Sorbents," Final Report to DOE/METC, DOE/MC/24160-2671(1989).
- Lee, T. J., Park, N. K., Kim, J. H., Kim, K. S., Park, Y. W. and Yi, K. K.: *HWAHAK KONGHAK*, **34**, 435(1996).
- McCabe, W. L., Smith, J. C. and Harriott, P.: "Unit Operations of Chemical Engineering," McGraw-Hill, Inc., 5th ed., 670(1993).