

## 낮은 분압의 VOCs의 흡착에 관한 연구

송현택<sup>1</sup> · 강성원<sup>1</sup> · 민병훈<sup>2</sup> · 서성섭<sup>†,1</sup>

<sup>1</sup> 우) 121-791 서울 마포구 상수동 72-1 홍익대학교 화학공학과

<sup>2</sup> 경기도 화성군 봉담읍 와우리 산 2-2 수원대학교 화학공학과

(접수일자 : 2003. 9. 15 / 채택일자 : 2003. 10. 20)

## A Study on VOCs Adsorption at Low Pressure

Hun-Taek Song<sup>1</sup> · Sung-Won Kang<sup>1</sup> · Byong-Hun Min<sup>2</sup> · Sung-Sup Suh<sup>†,1</sup>

<sup>1</sup> Dept. of Chem. Eng., Hongik University, Seoul 121-791, Korea

<sup>2</sup> Dept. of Chem. Eng., University of Suwon, Kyonggi 445-743, Korea

### 요 약

벤젠과 톨루엔을 활성탄에 흡착하는 공정을 개발하기 위한 기초 실험을 수행하였다. 정적흡착실험은 온도와 압력의 변화에 따른 벤젠과 톨루엔의 흡착특성을 연구하였다. 흡착제로는 활성탄 12~20mesh와 20~40mesh를 사용하였으며 흡착질로는 벤젠, 톨루엔, 질소를 사용하였다. 실험결과는 Langmuir isotherm으로 fitting하였고, 온도의존성을 계산하였고, 흡착열과 흡착상수를 얻었다. 이성분 정적흡착실험에서는 Langmuir isotherm parameter들이 Extended Langmuir isotherm에 일반적으로 적용할 수 있는지를 확인하였다. 이때 사용한 실험기법은 기존의 방법에서처럼 흡착 전후의 기상의 물분율을 측정하여 실험하는 방법이 아닌 압력변화만을 측정하는 정용적법에 기초한 방법을 사용하였다. 동적흡착실험을 수행하여 실험결과를 전사모사로부터 얻어진 결과와 비교하였다. 본 연구에서는 공정에서 흡착조건을 결정할 수 있는 기본 데이터를 획득할 수 있었다.

주제어 : 이성분, 흡착, 벤젠, 톨루엔, 랑무어등온식

**ABSTRACT :** This study was carried out as a basic experiment for development of adsorption process in which benzene and toluene was adsorbed on activated carbon. In the static adsorption experiment, Adsorption character of benzene and toluene was studied by change of temperature and pressure. Activated carbon 12~20mesh and activated carbon 20~40mesh was used as adsorbents, Benzene, toluene and nitrogen as adsorbates. Experimental data were obtained to fitted to Langmuir isotherm and dependence was acquired. Parameters of adsorption heat and adsorption constant was obtained. Static adsorption experiment for binary mixtures confirmed that Langmuir isotherm parameters could be applicable to Extended Langmuir isotherm. Experimental technique used in this study only requires pressure measurement and this technique is different from the conventional method which measures gas mole compositions before adsorption and after adsorption. The dynamic adsorption experiment was carried out and the experimental results was compared with the computer simulation results. In this study, basic data was acquired to decide adsorption conditions in the process.

**keywords :** binary mixture, adsorption, benzene, toluene, Langmuir isotherm

† corresponding author : suhss@www.hongik.ac.kr

청정기술 제9권 제4호

## 1. 서 론

휘발성유기화합물(VOCs)은 증기압이 높아 대기 중으로 쉽게 증발되고, 대기중에서 질소산화물과 공존 시 태양광의 작용을 받아 광화학반응을 일으켜 오존 및 PAN 등 광화학 산화성 물질을 생성시켜 광화학스모그를 유발하는 물질의 총칭이다. 그 발생원은 산업체에서 많이 사용되고 있는 용매와 화학 및 제약공장 플라스틱의 건조공정에서 배출되는 유기가스 등까지 매우 다양하며, 저비점 액체연료, 파라핀, 올레핀, 방향족화합물등 우리 생활주변에서 흔하게 사용되는 탄화수소류들이 거의 VOCs이다.

급속한 경제 발전 과정 속에 등한시되었던 VOCs의 배출 문제에 대한 중요성이 사용량의 증가와 배출 원의 다양화에 의해 부각되기 시작하면서 정부와 각 생산 현장에서의 대책마련이 시급하다. 그러나 국내 VOCs 규제 관리는 시작단계로써, VOCs 관련법은 2001년 대기환경보전법에 규제 규정을 신설한 후 배출억제 및 방지시설의 설치 등 합리적인 개선을 위해 2002년 7월 '악취방지법'을 별도로 제정하여 시행하기 시작했다.

VOCs를 처리하기 위한 기술로 현재 주로 사용하는 방법은 연소, 흡수, 응축, 흡착 등의 방법이 있다. 이러한 처리기술들 가운데 처리 설비를 설치하고자 하는 현장의 조건에 따라 적합한 처리기술을 선택하여야 하며, 이중 주로 사용되고 있는 방법은 연소방법이고, 흡착 방법은 가장 경제적인 방법으로 중간 크기의 공정에 많이 사용되고 있다. 특히 VOCs의 처리 범위가 저농도이며 배출량이 많은 경우, 고농도이며 배출량이 적은 경우, 농도범위가 넓은 경우, 비점이 낮은 경우 등 폭넓은 분야에서 사용될 수 있으며, 값비싼 유기용제를 회수할 수 있으므로 운전비용면에서 경제적 효과를 얻을 수 있는 매우 효과적인 처리기술이다.

그러므로 본 연구는 VOCs 물질을 활성탄(AC)에 흡착하여 제거하거나 회수하는 공정을 개발하기 위한 기초실험으로써 진행하였다. 이를 위하여 배출량이 가장 많은 벤젠과 툴루엔을 흡착질로 선정하여 우선 단일 성분 정적흡착실험을 수행하여 기본적인 흡착성질을 연구하였다. 한편 산업현장에서 VOCs가

배출될 때 질소를 주성분으로 하는 기체의 혼합물의 형태로 배출되기 때문에 질소와 벤젠 및 질소와 툴루엔의 이성분 혼합기체에 대한 정적흡착실험도 수행하였다. 단일성분에 대하여 얻어진 흡착상수들이 이성분 혼합기체에서도 사용가능한지를 확인하여 이성분 혼합기체에 대하여 적용할 수 있는 확장된 평형흡착식을 확립하였다. 여기에서 얻어진 평형흡착파라미터를 이용하여 전산모사를 수행하면서 실제 동적흡착실험의 경향을 예측하는지 확인하여 보았다.

## 2. 이론

본 연구에서 흡착평형을 알아보는데는 속도론적 접근방법을 사용하였는데, 이는 간단한 형태의 식으로 표현할 수 있기 때문에 흡착을 이용한 분리공정의 모사에 많이 사용된다. [1-4]

### 2.1. Langmuir isotherm

Langmuir isotherm은 다음과 같다.

$$q = \frac{b q_{\max} P}{1 + bP} \quad (1)$$

Langmuir 상수인  $b$ 와 최대흡착량을 나타내는  $q_{\max}$ 는 경험적인 상수로 처리된다. 또한  $b$ 의 온도에 대한 의존성은 아래의 Arrhenius 식으로 표현된다.

$$b = b_0 \exp(-\frac{\Delta H}{RT}) \quad (2)$$

식(2)를 정리하여 도식적으로 해석하면  $b_0$ 과  $-\Delta H$ 를 구할 수 있다. 이때 흡착은 발열반응이므로  $\Delta H$ 는 음수가 되며  $b$ 값은 온도가 증가할수록 감소한다. 또한  $q_{\max}$ 의 온도의존성은 아래의 실험식으로 표현 할 수 있다.

$$q_{\max} = \frac{q_0}{T^m} \quad (3)$$

여러 압력에서 수행된 실험결과를 식(1)에 적용하여  $b$ 와  $q_{\max}$ 를 구하고, 각각 다른 온도에서 반복 실험하여 구해지는  $b$ 와  $q_{\max}$ 로부터 식(2)와 식(3)에 의하여  $b_0$ 와  $q_0$ 을 구할 수 있다. 이것으로부터 다른 온도에서의  $b$ ,  $q_{\max}$ 값들을 추정할 수 있다. [5],[6]

## 2.2. Extended Langmuir isotherm

혼합기체흡착을 위한 모형은 조작온도 및 압력의 주어진 범위 내에서 혼합물 중의 각 성분에 대한 순수기체의 흡착 평형량도 추정할 수 있어야 한다. 본 연구에서는 Langmuir isotherm을 식(4)과 같이 다성분 흡착에 관한 식으로 확장하여 사용하였다.

$$q_i = \frac{b_i q_{\max,i} P_i}{1 + \sum_{j=1}^n b_j P_j} \quad (4)$$

식 (4)는 Extended Langmuir(EL) isotherm이라고도 하며, 어떤 성분의 흡착은 다른 성분들이 흡착하지 않은 표면적에서만 일어난다고 가정하고 유도하였으며, 각 흡착질 분자들 사이의 상호작용이 없다는 가정하에 사용된다. [7],[8]

## 3. 실험

### 3.1. 흡착제와 흡착질

실험에 사용한 흡착제는 darco사에서 제조한 입상 형태의 활성탄이며, 비표면적분석기(BET Surface Area Analyzer)를 사용하여 측정한 비표면적은 AC 12~20mesh는  $549 \text{ m}^2/\text{g}$ 이고, AC 20~40mesh는  $633 \text{ m}^2/\text{g}$ 이다. 흡착질로는 VOCs 중에서 대기중에 배출되는 양이 큰 벤젠과 톨루エン을 사용하였으며, 단일성분 정적흡착실험에서는 질소, 이성분 정적흡착실험과 동적흡착실험에는 질소에 벤젠과 톨루엔을 혼합하여 사용하였다.

### 3.2. 단일성분 정적흡착실험

본 연구에서 정적흡착실험은 먼저 단일성분 정적흡착실험을 한 후 얻은 데이터를 Langmuir isotherm

에 맞추어서 파라미터를 구하고, 이를 이성분으로 확장하여 실험을 하였다. 정용적법(Constant-Volume Method)으로 흡착량을 구하였으며 이는 기체 혼합물을의 양과 조성을 흡착이 일어나기 전과 후에 측정한 다음 적절한 P-V-T 관계식을 이용하여 압력, 부피, 온도를 계산하는 방법이다. 본 실험에서는 이상기체가 아닌 실제 기체에서 활용할 수 있는 van der Waals equation인 식(5)를 흡착량을 계산하는 과정에 사용하였다.

$$\left( P + \frac{n^2 a}{V^2} \right) (V - n b) = n R T \quad (5)$$

실험방법은 Figure 1에 나타낸 실험장치의 기준용기(vessel #1)의 부피를 증류수를 이용하여 측정한 후 헬륨을 이용하여 나머지 vessel의 부피를 정확히 측정한다. 단일성분 정적흡착실험의 경우 흡착제를 채운 vessel #6을 진공상태에서 가열기구를 사용하여 250°C 이상으로 24시간 이상 가열하여 탈착을 시킨다. Vessel #8에 흡착질을 채운 다음 vessel #2~#5로 기화시켜서 원하는 압력만큼 채웠다. 온도와 압력이 정상상태에 도달하면 vessel #6으로 흡착을 시킨 후 12시간 이상 지난 다음 온도와 압력을 측정하였다. [9],[10]

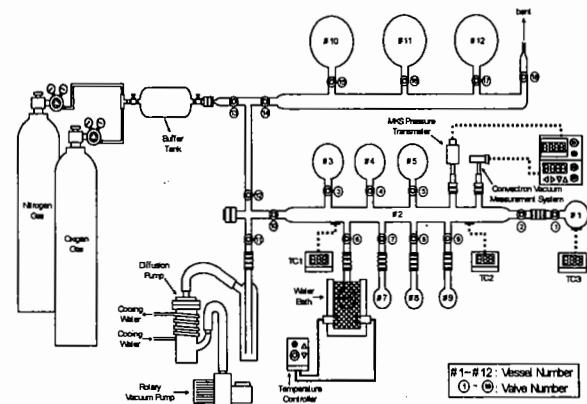


Figure 1. Static adsorption apparatus.

### 3.3. 이성분 정적흡착실험

기존의 이성분 정적흡착실험에서는 흡착이 시작되기 전과 시작한 후에 기상의 조성을 직접 분석하

기 위하여, 기체를 채취하여 GC나 기타 분석장치를 이용하여 조성을 분석하였다. 이 방법은 실험장치에 추가적인 설비가 필요하고 대기압보다 낮은 저압에서는 수행하기에 까다로운 점들이 있고, 기체를 채취하는 과정에서 오차가 발생할 가능성이 있는 방법이었다. 이에 본 연구에서는 직접 조성을 측정하는 방법 대신에 단일성분에 대하여 사용하였던 실험장치를 그대로 사용하는 실험방법을 고안하여 EL식의 적용여부를 확인하는 방법을 채택하였다.

이성분 정적흡착실험은 흡착질을 vessel #3에 기화를 시켜서 원하는 압력으로 채운 다음, valve 3을 닫고, vessel #2를 완전진공상태로 만든다. vessel #3에 채운 흡착질의 물수를 계산하여 vessel #2에 채울 질소의 물수를 계산하고 이를 압력으로 환산하여 질소를 채운다. 압력과 온도를 기록하고 valve 3을 열어서 흡착질과 질소를 혼합한 후 정상상태에 도달하면 vessel #6에 흡착시킨다. [11]

### 3.3. 동적흡착실험

Figure 2.에 보여지는 동적흡착실험장치는 원료공급부, 반응부, 제어부, 분석부의 4부분으로 이루어졌다. 원료공급부는 실험에 사용되는 기체를 공급하기 위하여 운반 기체인 질소와 MFC(Mass Flow Controller), 액체성분인 VOCs를 기화하는 기체기화병으로 구성되어 있다. 반응부에서는 운반기체인 질소와 VOCs 기체가 흡착제 안으로 들어가서 흡착 및 탈착을 한다. 그리고 제어부는 원료 공급부 및 반응

부를 전체적으로 제어하며, 분석부는 반응부에서 나오는 기체의 VOCs 농도를 측정하기 위해 감도가 높은 F.I.D(Flame Ionization Detector)가 장착된 GC(Gas Chromatography)가 있어서 실험의 결과를 분석, 저장하는 역할을 한다. 실험방법은 벤젠을 기화시킨 후 흡착탑으로 질소와 함께 흘려보내서 흡착을 한다. 이때 나오는 기체를 GC를 이용해서 2분마다 흡착탑의 농도를 측정하여 기록하고, 이를 이용하여 파과곡선(Breakthrough curve)을 구하였다. [12], [13]

## 4. 결 과

### 4.1. 단일성분정적흡착실험

본 실험에서 획득한 실험데이터를 도시한 후, Langmuir isotherm으로 맞추어 본 결과를 Figure 3.~Figure 5.에 도시하였다.

벤젠과 틀루엔의  $q_{max}$ 값을 비교해 보면 벤젠의  $q_{max}$ 값이 틀루엔의  $q_{max}$ 값보다 더 높게 나타났다. 즉, 분자량이 상대적으로 더 작은 벤젠이 메틸기(-CH<sub>3</sub>)를 가지고 있는 틀루엔보다 더 잘 흡착한다고 할 수 있다. 벤젠은 AC 12~20mesh인 경우, 틀루엔은 AC 20~40mesh인 경우가  $q_{max}$ 가 더 큰 것을 확인하였고 벤젠의 경우는 저압에서는 AC 20~40mesh가 더 흡착량이 많다. 이것은 흡착제의 물리적 성질을 비교해보면 AC 20~40mesh가 비표면적이 더 큰 것에 기인한 것으로 보이며, 고압에서는 흡착제 표면에 단층 흡착이 완결된 상태에 다가가면서 흡착제의 micropore안에서 다층흡착이나 응축 등의 현상이 진행된다고 볼 수 있는데 micropore는 AC 12~20mesh가 더 크기 때문에  $q_{max}$ 가 더 크게 나타나는 것으로 사료된다. 틀루엔의 경우는 벤젠에 비해 분자량도 크고, 분자가 micropore안으로 들어가기에 상대적으로 불리한 구조이므로 기공의 크기에 의한 영향이 적다고 볼 수 있다. 따라서 비표면적이 큰 AC 20~40mesh의  $q_{max}$ 가 더 크게 나온 것이다. 또한 온도에 의한 영향을 살펴보면, 실험온도가 증가할수록  $q_{max}$ 값은 감소하는 경향을 보이는 것을 확인할 수 있다.

Figure 6.은 벤젠과 틀루엔의  $b$ 값에 자연로그를

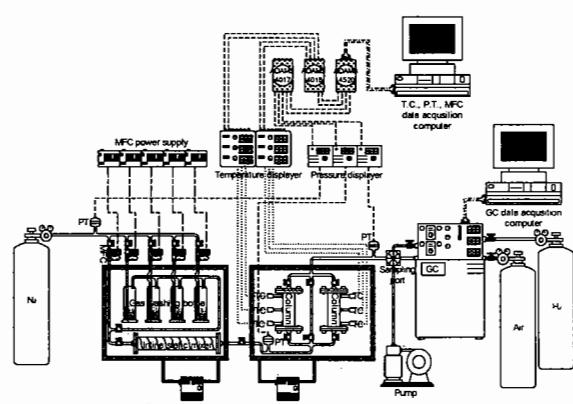


Figure 2. Dynamic adsorption apparatus.

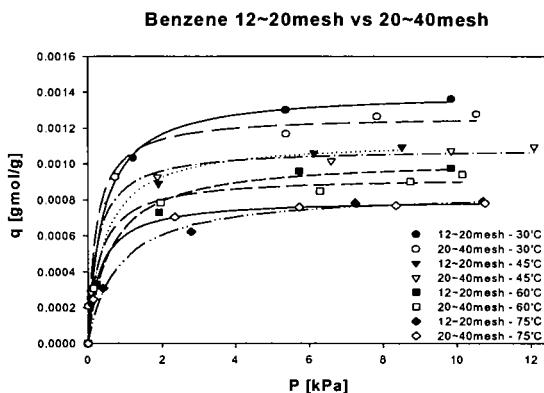


Figure 3. Adsorption amount of Benzene on AC 12~20mesh and AC 20~40mesh.

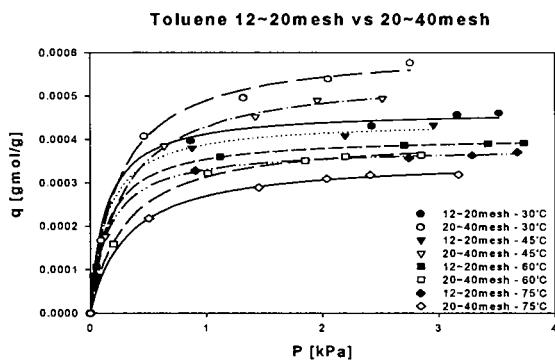


Figure 4. Adsorption amount of Toluene on AC 12~20mesh and AC 20~40mesh.

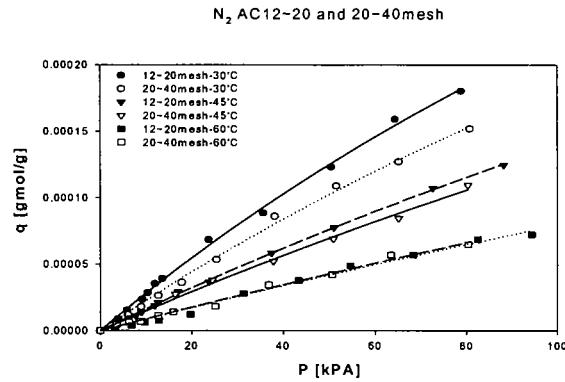


Figure 5. Adsorption amount of Nitrogen on AC 12~20mesh and AC 20~40mesh.

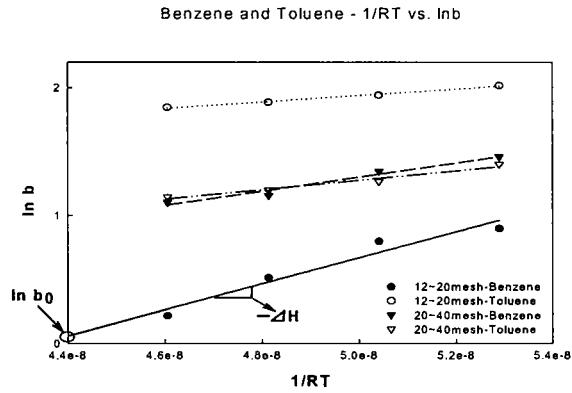


Figure 6. Plot of  $1/RT$  versus  $\ln b$  for Benzene and Toluene.

취한 값과  $1/RT$  사이의 관계를 나타낸 것으로 식(2)에 자연로그를 취하고 정리한 아래의 식(6)에 적용하여 Arrhenius식의 파라미터를 구할 수 있다.

$$\ln b = \ln b_0 + \frac{-\Delta H}{RT} \quad (6)$$

그래프의 기울기는  $-\Delta H$ 를 나타내고 절편은  $\ln b_0$ 이다. Figure 7은  $q_{max}$ 와  $1/T$  사이의 관계를 나타낸 것으로 이 그래프를 식(3)에 적용하면  $q_0$ 과  $m$ 값을 구할 수 있다.

Figure 6에서  $-\Delta H$ 값이 양수라는 사실은  $\Delta H$ 값은 음수임을 나타내며 이것은 흡착반응이 발열과정

임을 나타낸다. 또한 Figure 7에서처럼  $1/T$ 값이 증가할수록, 즉 온도가 감소할수록  $q_{max}$ 값이 증가하는데 이러한 사실들은 일반적인 흡착의 원리와 같다.

이렇게 얻은  $\Delta H$ ,  $b_0$ ,  $q_0$ ,  $m$ 값들을 통해 구해진 Langmuir isotherm을 이용하여, AC 12~20mesh와 AC 20~40mesh를 사용하여 벤젠과 톨루엔의 흡착을 할 때 본 실험에서 직접 측정하지 않은 온도와 압력에 대하여서도 흡착량을 구할 수 있다. 이것은 광범위한 조업조건에서 운전할 수 있는 공정의 설계에 기본조건으로 사용할 수 있다.

#### 4.2. 이성분 정적흡착실험

단일성분 정적흡착실험을 통하여 획득한 Langmuir

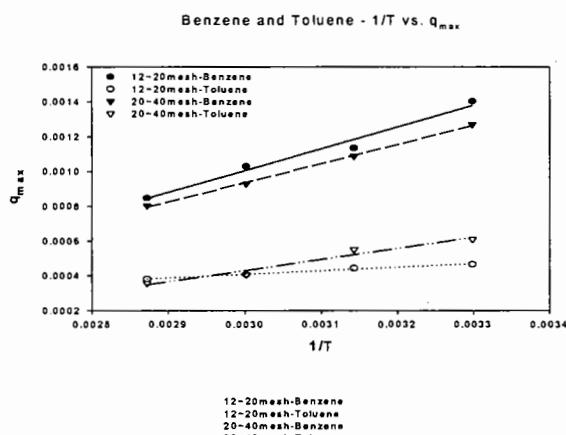


Figure 7. Plot of  $1/T$  versus  $q_{\text{max}}$  for Benzene and Toluene.

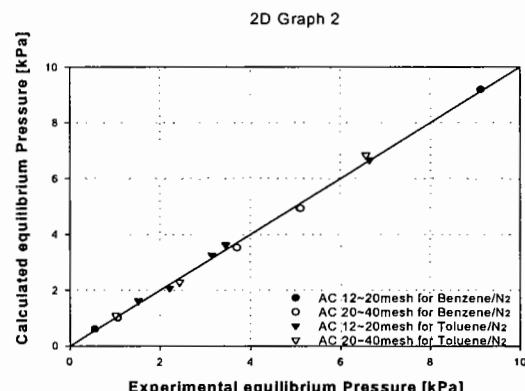


Figure 8. Comparison of experimental and calculated adsorption equilibrium pressure by EL equation.

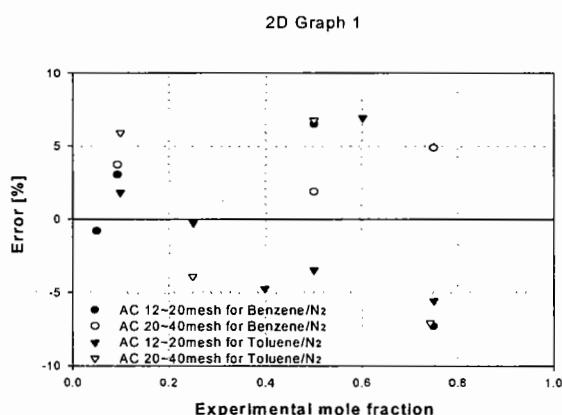


Figure 9. Plot of gas phase mole fraction versus error by EL equation.

isotherm의 파라미터들이 이성분 정적흡착에 적용하여도 무리가 없는지를 확인하기 위하여 이성분 흡착실험을 수행하였다. 실험조건으로 온도는  $30^{\circ}\text{C}$ , 흡착질은 질소에 벤젠과 톨루엔을 혼합하여 사용하였으며, 흡착제는 AC 12~20mesh와 AC 20~40mesh를 이용하여 VOCs의 물분율을 변화시키면서 실험을 하였다. 이렇게 실험한 결과에서 흡착 후 측정된 전체 압력을 실험값으로 규정하였으며, 식(4)인 EL식에 의해 흡착이 이루어진다는 가정하에 계산한 흡착 후 전체 압력을 이론값으로 규정하였다.

Figure 8.은 흡착 후 전체 압력의 이론값을 계산한 것과 실제 측정된 흡착 후 전체 압력의 실험값을 비교한 그래프이다.  $y=x$ 의 그래프에 다가갈수록 이론값과 실험값이 정확히 일치하는 것이다. 실제 그레프를 비교해보면 EL식으로 예측한 값이 실제 실험으로 측정된 값과 잘 일치함을 확인할 수 있다.

Figure 9.는 EL식으로 예측한 이론값과 실험에서 구한 흡착 후 전체 압력의 차이로부터 계산된 오차가 VOCs의 기상 물분율에 따라 어떻게 나타나는지를 보여주는 그래프이다. 오차가 음의 값을 갖는 경우는 실제 실험값이 이론값보다 작게 나온 경우이다. 대부분의 물분율에서 오차 5%를 크게 넘어서지 않음을 명확히 알 수 있으며, 기상의 조성에 따른 오차의 편향성도 관찰되지 않았다. 오차는 주로 실험을 진행하는 동안에 발생하는 것으로 사료되며 벤젠의 경우 평균오차는 4.0%였으며, 톨루엔의 경우 평균오차는 4.6%로써 벤젠이 조금 더 정확한 경향을 보였지만 큰 차이는 나지 않았다.

본 연구에서 실험한 방법인 이성물 혼합물의 흡착 후 압력의 변화를 측정하여 흡착실험을 하는 간접적인 방법이, 기존에 사용되던 흡착 후 조성의 변화를 측정하여 흡착량을 계산하는 직접적인 방법만큼 정확도를 가질 수 있다고 판단하였다. 이것은 이성분 혼합물의 흡착실험에서 1기압 이하의 저압영역에서의 실험에서는 기상의 조성을 측정하는 방법이 실험장치나 분석용 시료채취에서 제약을 받는 경우가 많은데, 본 연구에서는 흡착 전의 압력과 흡착 후의 압력의 변화를 측정하여 실험하는 실험방법을 고안하여 혼합기체에 대하여 제안된 등온흡착식이 적용 가능한지를 성공적으로 확인한 것이다. [14]

### 4.3. 동적흡착실험의 비교

단일성분 흡착실험과 이성분 흡착실험을 통하여 얻은 Langmuir isotherm 파라미터를 이용하여 전산모사를 해본 결과와 실제 동적 흡착실험을 통하여 얻은 결과를 비교하여 두 결과가 어느 정도 유사한지를 확인하고자 실험을 수행하였다. 특히 실제 공정을 설계할 때 중요한 변수인 파과시간과 파과곡선의 기울기를 확인하는데 주안점을 두고 연구를 진행하였다. 전산모사는 등온 흡착탑 안에서 플러그 흐름으로 이상기체 혼합물이 통과할 때의 물질수지식과 평형흡착식 및 선형구동력(LDF)에 의한 물질전달속도식을 결합하여 수치해석적으로 푸는 프로그램을 사용하였다.

정적흡착실험과 같은 등온상태로 실험을 하였고, 흡착제는 AC 12~20mesh를 기준으로 하고 벤젠과 툴루엔을 이용하여 실험을 하였으며, 기상에서 그 물분율은 1%가 넘지 않도록 하였다. 이것은 실제 VOCs가 대기 중으로 배출될 때 ppm단위로 배출되는 것을 고려하여 선정한 실험조건이다.

Figure 10은 벤젠과 질소 혼합물을 고정 흡착탑에 흡착시킨 결과를 표현한 것이다. 실험을 통해 얻은 데이터를 보면, 질소의 유량이 커질수록 파과가 시작되는 시간이 더 짧아지고, 포화흡착에 도달하는 시간도 짧아짐을 알 수 있다. 또한 파과곡선의 기울기도 더 급함을 확인할 수 있다. 전산모사를 통해 얻은 결과도 비슷한 경향을 보이고 있지만 파과곡선의

기울기가 서로 일치하지 않는 것을 알 수 있다. 실제 동적흡착실험의 기울기가 전산모사와 차이가 있는 이유는 전산모사에 사용한 선형구동력(LDF)에 의한 물질전달속도식보다 실제로 일어나는 복잡한 물질전달 메카니즘이 더 복잡하기 때문이다. 동적흡착실험을 통하여 얻은 데이터를 가지고 전산모사를 수행하였을 때, 파과가 시작되는 시간이나 파과가 끝나는 시간은 비교적 잘 예측하는 것으로 나타났다. 다만 파과곡선의 기울기를 예측하는 것은 조금 어려운 것으로 나타나 있다.

Figure 11은 툴루엔과 질소 혼합물에 대한 결과이다. 툴루엔의 경우 질소의 유량이 1.0NL/min의 경우는 전산모사와 실험의 차이가 거의 없이 잘 일치하지만, 0.5NL/min의 경우는 파과가 일어나기 시작하는 시간이 모사값과 실험값이 다소 다를 수 있다. 또한 벤젠의 경우보다 파과곡선의 기울기 비교에서 차이가 많이 나는데 이것은 툴루엔이 벤젠보다 분자량도 크고 분자모양이 다르며 그로 인하여 물질전달속도에서 툴루엔이 벤젠보다 느린 현상에 기인한 것이다. 실제로 툴루엔에 대한 실험을 수행하면 포화흡착량에 도달하는 시간이 매우 길며, 흡착이 완료되었다고 판단되는 시간까지 파과곡선이 길게 늘어지는 현상을 보이는데 이런 현상에 의해서 전산모사와 실험의 결과가 조금 다른 차이를 보이는 것이다.

전산모사를 통해 얻은 파과곡선과 실제 동적흡착실험을 수행하였을 때의 파과곡선을 전체적으로

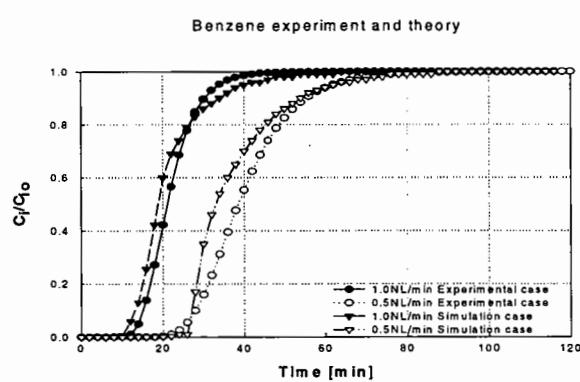


Figure 10. Comparison of experimental and simulated breakthrough curve of Benzene/N<sub>2</sub> mixture on AC 12~20mesh.

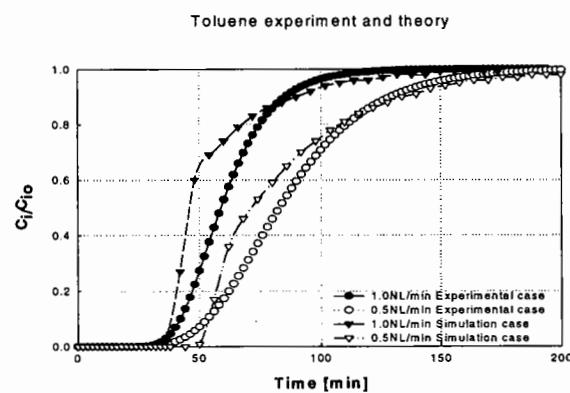


Figure 11. Comparison of experimental and simulated breakthrough curve of Toluene/N<sub>2</sub> mixture on AC 12~20mesh.

보면 파과가 시작하는 시간이나 포화흡착에 도달하는 시간은 비교적 정확하게 예측하여 준다.

## 5. 결론

- (1) 단일성분 정적흡착실험에서 벤젠, 틀루엔, 질소의 AC 12~20mesh와 AC 20~40mesh에 대한 Langmuir isotherm의 파라미터를 구할 수 있었다. 또한 온도와 흡착량의 관계를 밝혀줄 Arrhenius식의 파라미터인  $\Delta H$ 와  $b_0$ ,  $q_{max}$ 의 온도의존성으로부터 일반적인  $q_0$ 와  $m$ 값을 구할 수 있었다. 이런 값들로부터 AC 12~20mesh와 AC 20~40mesh에서의 벤젠, 틀루엔, 질소에 대한 Langmuir isotherm을 구할 수 있었고, 실험에서 직접 측정하지 않더라도 임의의 온도와 압력에서 흡착량을 예측할 수 있었다.
- (2) 이성분 정적흡착실험을 통하여 단일성분 정적흡착실험에서 구한 파라미터들이 이성분으로 확장하여 사용하여도 무방하다는 것을 확인하였다. 실험값과 이론값의 오차는 5%이내로 실제 실험을 잘 예측해주었다.
- (3) 실제 동적흡착실험을 통하여 얻은 결과와 정적흡착실험을 통하여 얻은 데이터를 이용하여 전산모사를 통해 예측한 결과를 비교해보면, 흡착탑에 포화흡착이 되고 VOCs가 배출되기 시작하는 시간과 포화흡착에 도달하는 시간이 전산모사의 결과와 잘 맞는 것을 알 수 있었다. 이를 통해 본 연구에서 정적흡착실험을 통하여 획득한 각종 파라미터들은 전산모사에 사용하여도 무방하다는 것을 확인하였다.

## 감사

본 논문은 2002년도 환경청정기술연구센터의 연구비 지원에 의하여 수행되었으며 이에 감사의 뜻을 표합니다.

## Nomenclature

- a : van der Waals constant in Eq. (5)  
[kPa/cm<sup>6</sup>gmol<sup>2</sup>]

- b : van der Waals constant in Eq. (5)  
[cm<sup>3</sup>/gmol]  
b : Langmuir constant in Eq. (1), (2), (4)  
[kPa<sup>-1</sup>]  
 $b_0$  : preexponential factor in Eq. (2) [kPa<sup>-1</sup>]  
 $\Delta H$  : heat of adsorption in Eq. (2)  
P : pressure [kPa]  
q : adsorption amount per unit mass of adsorbent in Eq. (1), (4) [gmol/g]  
 $q_0$  : adsorption amount constant in Eq. (3)  
[gmol/g · Km]  
 $q_{max}$  : maximum adsorption amount per unit mass of adsorbent in Eq. (3) [gmol/g]  
R : gas constant [cm<sup>3</sup> · kPa/gmol · K]  
T : temperature [K]  
V : volume [cm<sup>3</sup>]

## 참 고 문 헌

- [1] Wankat, P. C., "Rate-controlled separation", Elsevier Applied Science, (1990)
- [2] Yang, R. T., "Gas Separation by adsorption process", Butterworth publishers, Boston, (1987)
- [3] Ruthven, D. M., "Principles of adsorption and adsorption processes", John Wiley and Sons, (1984)
- [4] Kim, S. H., "The Simulator Development for PSA Process", MS. Thesis of Hong-Ik University., (2003)
- [5] Chiang, Y. C., Chiang, P. C., and Huang, C. P., "Effects of pore structure and temperature on VOC adsorption on activated carbon", Carbon, 39, 523-534(2001)
- [6] Linders, M. J. G., van den broeke, L. J. P., Kapteijn, F., and Moulijn, J. A., "Binary Adsorption Equilibrium of Organics and Water on Activated Carbon", AIChE Journal, 47(8), 1885-1892(2001)
- [7] 문희, 박영태, "다성분 흡착 평형 이론과 응용", Chemical Industry and Technology, 14(2),

- 103-109(1996)
- [8] Choi, Y. S., Lee, J. W., Lee, H. K., Moon, H., and Lee, J. W., "Binary Adsorption of VOCs on Activated Carbon and Polymeric Adsorbents", *Theories and Applications of Chem. Eng.*, 8(1), (2002)
- [9] Yun, J. H., Choi, D. K., "Adsorption Isotherms of Benzene and Methylbenzene Vapors on Activated Carbon", American Chemical Society, (1997)
- [10] Kim, H. S., Chang, H. S., Park, B. B., Park, Y. S., and Min, B. M., "Adsorption Characteristics of Aromatic Volatile Organic Compounds on Adsorbents", *Journal of Korean Society of Environmental Engineers.*, 21(3), 481-488(1999)
- [11] Suh, S. S., Wankat, P. C., "Pressure swing adsorption for binary gas separation with Langmuir isotherms", *Chemical engineering science*, 44(10), 2407-2410(1989)
- [12] Urtiaga, A., Gorri, D., and Ortiz, I., "Mass-Transfer Modeling in the Pervaporation of VOCs from Diluted Solutions", *AIChE Journal.*, 48(3), 572-581(2002)
- [13] Kim, H. S., Park, Y. S., and Min, B. M., "Adsorption Characteristics of Benzene at the Fixed-bed Adsorption Column", *Journal of Korean Society of Environmental Engineers.*, 23(12), 1979-1988(2001)
- [14] Hwang, K. S., Choi, D. K., and Gong, S. Y., "The Thermal Regeneration Characteristics of Volatile Organic Compounds on an Activated Carbon Bed (I): Adsorption step", *Journal of the Korean Institute of Chemical Engineers*, 36(2), 159-168 (1998)