# 수소 동위원소 분리를 위한 초저온증류공정 모사

노상균<sup>1</sup>, 노재현<sup>2</sup>, 조정호<sup>2\*</sup> <sup>1</sup>동양대학교 생명화학공학과, <sup>2</sup>공주대학교 화학공학부

# Cryogenic Distillation Simulation for Hydrogen Isotopes Separation

### Sanggyun Noh<sup>1</sup>, Jaehyun Rho<sup>2</sup> and Jungho Cho<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemical & Biomolecular Engineering, Dong Yang University <sup>2</sup>Department of Chemical Engineering, Kong Ju National University

**요 약** 본 연구에서는 ITER의 수소동위원소 분리 시스템에 포함되어 있는 심냉 증류공정과 평형 반응기 및 헬륨 냉매를 이용한 냉동 사이클에 대해 추적조사를 실시하였다. 또한 Aspen Plus나 PRO/II with PROVISION과 같은 정상 상태 화학공정 모사기에 내장되어 있지 않은 H<sub>2</sub>, HD, D<sub>2</sub>, HT, DT와 T<sub>2</sub> 성분에 대한 열역학 및 전달물성을 수집하였 다. 문헌치로부터 구한 물성 데이터와 전산모사를 통해서 추산한 물성결과 사이의 비교 및 검증작업을 수행하였다. 6 개의 수소동위원소 성분을 포함한 동위원소 분리를 위해서 4기의 심냉 증류탑과 2기의 평형 반응기를 사용해서 T<sub>2</sub>로 부터 D<sub>2</sub> 및 DT를 분리해 내기 위한 전산모사를 수행하였다.

**Abstract** In this study, we have surveyed the new technologies in the cryogenic distillation of ITER, equilibrium reactors and helium refrigeration cycle contained in the isotope separation system (ISS). We also have collected thermodynamic and transport properties for  $H_2$ , HD,  $D_2$ , HT, DT and  $T_2$  components of which properties are not built in a general purpose chemical process simulators such as Aspen Plus and PRO/II with PROVISION. Verification works have been performed to compare between literature data and simulation results. For the simulation of ISS involving six hydrogen isotope components, four distillation columns and two equilibrium reactors are used for the separation of  $D_2$  and DT from  $T_2$ .

Key Words : Hydrogen isotopes, Cryogenic distillation, Process simulation, Physical properties

# 1. 서론

지구에서 핵융합에너지의 실용적 생산을 위하여 한국, 미국, 유럽연합, 중국, 러시아, 일본, 인도의 7개국이 모여 국제핵융합실험로(ITER) 공동개발사업을 진행 중에 있 다. ITER는 International Thermonuclear Experimental Reactor의 약자이며 라틴어로 '길(Way)'이라는 뜻으로 핵융합에 이르는 길을 ITER를 통해 도달하고자 하는 의 미를 내포하고 있다. Fig. 1은 ITER의 삼중수소 연료주기 를 나타낸 개념도이다. 토카막(tokamak)플랜트의 토러스 (torus)로 삼중수소를 포함한 연료와 여러 가지 다른 목적 의 기체들이 공급되고, 혼합되어 방출되는 기체를 다시 성분별로 분리/정제/회수하는 시스템으로 구성되어 있다. 토카막은 도넛 방향으로 강한 자기장을 걸어주고, 자기장 방향으로 플라스마 전류를 흘려 안정적으로 플라스마를 가두는 방식을 의미한다. 이러한 토카막 장치는 도넛 모 양의 토러스를 가운데에 두고 자기장 코일과 변압기 등 으로 둘러싸고 있다. 핵융합을 일으킬 기체들은 내부가 진공인 토러스 안에 주입되는데, 이 기체들은 토러스 내 부에 형성된 강력한 전류에 의해 가열되어 초고온의 플 라즈마를 형성한다. 토러스로 유입된 삼중수소는 핵융합 반응과 증식과정에서 수소동위원소를 포함한 다른 기체 와 화학적으로 결합하여 방출된다. 토러스에서 배출된 혼 합기체는 토카막배출처리공정(TEP; tokamak exhaust

```
Accepted September 6, 2013
```

본 연구는 ITER사업단의 연구비지원에 의해 수행되었습니다. \*Corresponding Author : Jungho Cho(Kong Ju National Univ.) Tel: +82-10-9918-9366 email: jhcho@kongju.ac.kr Received July 26, 2013 Revised September 5, 2013 Acce

processing)에서는 수소동위원소와 기타 불순물가스가 분 리되고, 동위원소분리공정(ISS; isotope separation system)에서는 초저온증류를 통해 삼중수소와 중수소가 분리된다. 그리고 ISS를 통해 분리된 수소동위원소는 저 장 및 공급시스템 (SDS; storage and delivery system)로 공급된다. 삼중수소수 처리공정(WDS; water detritiation system)에서는 잔량의 삼중수소와 중수소가 회수되며 분 석 시스템(ANS; analysis system)에서는 정성·정량 분석 을 수행한다. 원료 공급시스템 (FS; fueling system)과 중 성입자빔 입사 장치 (NBI; neutral beam injector)에서는 SDS 에서 공급된 기체를 용도에 따라 토러스에 공급해주 는 기능을 한다. 핵융합반응 연료로 공급되는 기체로는 T<sub>2</sub>, D<sub>2</sub> 및 DT이며, 핵융합반응을 정지하기 위해 주입되 는 기체로는 Ne, Ar, He, O2 및 N2등이 있다[1-5].



[Fig. 1] Block diagram of ITER fuel cycle

이중에 본 연구팀은 ISS공정에 대한 연구를 진행하고 있다.

ITER ISS는 TEP와 WDS에서 이송된 수소동위원소 혼합기체를 초저온 증류와 평형반응을 이용하여 원하는 성분과 조성으로 정제하는 계통이다[6,7]. 한편 ISS에서 는 초저온증류법을 이용하므로 상당량의 수소동위원소체 들이 액화되며 체류시간도 길어 운전 중 삼중수소 체류 량이 가장 많은 공정이다. 그리고 15~20 K의 초저온에 서 운전하기 위해 헬륨냉동기가 사용된다. TEP와 WDS 로부터 ISS로 유입되는 주요 수소동위원소 성분들은 6개 로 H<sub>2</sub>, HD, HT, D<sub>2</sub>, DT, T<sub>2</sub>이다. ISS 공정에서는 6개의 혼합기체들 중에서 ITER 원료로 사용되는 D2, DT, T2를 원하는 조성으로 정제하게 된다. ISS는 원하는 조성의 D2, DT, T2를 생산하기 위해 총 4개의 증류탑으로 구성되 며 여러 개의 평형반응기(Equilibrator)를 설치한다. 평형 반응기에서는 2HD↔H<sub>2</sub>+D<sub>2</sub>, 2HT↔H<sub>2</sub>+T<sub>2</sub>, 2DT↔D<sub>2</sub>+T<sub>2</sub>의 가역반응이 일어난다. Table 1에는 각 평형반응들에 대한 온도에 따른 평형상수 값을 나타내었다. 이러한 평형 반 응은 저온에서 D<sub>2</sub>와 T<sub>2</sub>의 생성측면에서는 유리하나 반응 속도가 느려 일반적으로 상온에서 반응시킨다. 평형반응 기의 위치를 최적화하여 평형반응기로 공급되는 조성을 맞추면 원하는 분자결합 형태로 반응을 유도할 수 있다 [8].

[Table 1] Equilibrium constant for isotopes

Departion formula	Equilibrium constant					
Reaction formula	273K	298K	400K	500K	600K	
$\left[ H_2 \right] \left[ D_2 \right] / \left[ HD \right]^2$	3.18	3.25	3.48	3.62	3.72	
$[H_2][T_2]/[HT]^2$	2.42	2.56	2.97	3.24	3.44	
$[D_2][T_2]/[DT]^2$	3.79	3.82	3.88	3.92	3.94	

ITER ISS 공정은 14 K~30 K 사이의 초저온증류와 촉매반응을 이용하고 있고, 촉매 반응이 일어나는 평형반 응기는 증류탑의 농도 프로파일에 따라 최적의 위치에 설치되어야 한다. 또한 WDS와의 연계성까지 포함하고 있어 상당히 복잡한 최적화 기술을 요구하게 된다. 따라 서 이러한 공정을 최적화하거나 설계를 하기 위해서는 반드시 공정모사가 수행되어져야 한다. 하지만 국내에서 는 아직 ITER ISS를 위한 초저온 증류공정의 공정모사를 수행했던 기관은 없다. 그 이유 중에 하나는 ISS 공정에 대한 국내의 기술력은 개념 정립 단계이고 해외 기술 추 적도 용이하지 못하여 관련 자료가 매우 부족하기 때문 이다. 또 하나는 초저온증류 공정모사를 수행할 수 있는 기술력과 물성데이터 부족을 들 수 있다. 본 연구에서는 상태방정식을 사용하여 ISS 공정을 모사 할 수 있도록 필 요한 H<sub>2</sub>, HD, HT, D<sub>2</sub>, DT, T<sub>2</sub>성분들의 물성을 확보하였 다. 그리고 Aspen Tech사의 Aspen Plus내에 DB(data base)로 내장하고, D<sub>2</sub> 99.00 mol% 이상, DT 98.00 mol% 이상, T2 94.00 mol% 이상의 순도로 정제하기 위한 초저 온증류탑과 평형반응기 그리고 헬륨냉동사이클을 모사 하였다.

### 2. 물성 데이터베이스 구축

Peng-Robinson[9]이나 혹은 Soave-Redlich-Kwong[10] 과 같은 상태방정식을 사용해서 H<sub>2</sub>, HD, D<sub>2</sub>, HT, DT 및 T<sub>2</sub>등의 수소동위원소들에 대한 상평형 물성을 추산하기 위해서는 다음의 Table 2와 같은 순수성분의 물성이 확보 되어야 한다. 하지만 Aspen Tech사의 Aspen Plus나 Invensys사의 PRO/II with PROVISION 등과 같은 상용 성 화학공정 모사기에는 H<sub>2</sub>, HD 및 D<sub>2</sub>에 대한 물성치만 일부 내장되어 있고 HT, DT 및 T<sub>2</sub> 성분들에 대한 물성치 는 내장되어 있는 않다. 따라서 본 연구에서는 분리 공정 에 필요한 H<sub>2</sub>, HD, D<sub>2</sub>, HT, DT 및 T<sub>2</sub>등의 열역학적인 물 성(thermodynamic properties)을 추산할 수 있도록 관련된 실험 데이터를 수집하고 수집된 실험 데이터들을 회귀분 석하여 열역학적인 물성치 추산에 필요한 모델식의 매개 변수를 도출하였다.

[Table 2] Fixed properties for using equation of state model

Parameter	Description
$T_c$	Critical temperature
$P_{c}$	Critical pressure
ω	Acentric factor

Table 3과 Table 4에는 6개 수소 동위원소들에 대한 분자량, 임계온도, 임계압력 그리고 편심인자 외에 순수 성분의 물성치를 나타내었다. Table 3과 Table 4에 나타 낸 각각의 성분들에 대한 Gibbs free energy formation인  $\Delta G_{f,i}^0 \in H_2$ , D<sub>2</sub> 및 T<sub>2</sub>와 같은 동일한 원소로 이루어진 화 합물에 대해서는 그 값이 0으로 정의되며, 모든 화합물에 대해서는 그 값이 정해져 있다. 여기에서 각각의 순수한 성분에 대한 Gibbs free energy of formation의 값은 주어 진 화학 반응식에 대한 표준 Gibbs 자유에너지 변화 값을 추산할 수 있다. 즉, 평형반응기의 계산을 위해 필요한 물 성치가 된다.

[Table 3] Pure properties for H<sub>2</sub>, HD and D<sub>2</sub>

Doromotor						
Falameter	$H_2$	HD	$D_2$			
MW	2.015	3.023	4.031			
$T_c(\mathbf{K})$	33.19	35.91	38.35			
$P_c(kPa)$	1,313	1,484	1,661			
ω	-0.22	-0.18	-0.15			
$V_c$ (m <sup>3</sup> /kmole)	0.064	0.062	0.060			
$Z_{c}$	0.305	0.312	0.314			
$P_L$	Antoine equation					
$\Delta G_{f,i}^0$ (kJ/kmole)	0 -1,441 0					

[Table 4] Pure p	properties for HT, DT and $T_2$					
Doromotor		Component				
Farameter	HT	DT	<b>T</b> <sub>2</sub>			
MW	4.024	5.032	6.032			
$T_c(\mathbf{K})$	37.13	39.42	40.22			
$P_c(kPa)$	1,570	1,770	1,850			
ω	-0.12	-0.13	-0.14			
$V_c$ (m <sup>3</sup> /kmole)	-	-	-			
$Z_c$	-	-	-			
$P_L$	Antoine equation					
$\Delta G_{\!f,i}^0$ (kJ/kmole)	-1.169	-1,661	0			

온도에 따른 순수성분의 증기압(*P<sub>L</sub>*)은 분리공정 계산 에 있어 매우 중요한 물성치 중에 하나이다. 그 이유는 상대휘발도를 결정짓는 변수가 증기압이기 때문이다. 통 상적으로 온도에 따른 순수성분의 증기압은 Antoine 증 기압 추산식에 의해서 아래의 식 (1)와 같은 형태를 사용 한다.

$$\ln P_L(Pa) = A - \frac{B}{T(K) + C} \tag{1}$$

하지만 본 연구에서는 H<sub>2</sub>, HD, D<sub>2</sub>, HT, DT 및 T<sub>2</sub>등 성 분에 대해서 좀 더 정밀한 증기압을 추산하기 위해 아래 의 식 (2)과 같은 관계식을 사용하였다.

$$\ln P_L(Pa) = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 \ln T + C_4 T^{C_5} + C_6 T^3 + C_7 T^6$$
(2)

아래의 Table 5와 Table 6에는 위의 식 (2)의 관계식을 사용하여 수소동위원소들에 대한 Antoine 상수를 정의한 값들이다. 그리고 Fig. 2에는 본 연구에서 새롭게 정의한 계수들을 사용하여 계산한 결과와 문헌 조사로부터 수집 한 증기압 실험값 사이의 비교를 나타내었다. Fig. 2를 보 면 실험값을 비교적 정확하게 추산하는 것을 볼 수 있다.

[Table 5] Coefficients in vapor pressure correlation for  $H_2$ , HD and  $D_2$ 

Demonster	Component				
Parameter	$H_2$	HD	$D_2$		
$C_{\!1}$	12.69	14.00	18.947		
$C_{2}$	-94.896	-119.97	-154.47		
$C_3$	1.1125	0.93537	-0.57226		
$C_{\!4}$	$3.29 \times 10^{-4}$	4.30×10 <sup>-6</sup>	0.0389		

$C_{5}$	2.0	2.998	1.0
$C_{6}$	0	0	0
$C_7$	0	0	0
Min. temperature	13.95K	16.60K	18.73K
Max. temperature	33.19K	35.19K	38.35K

[Table 6] Coefficients in vapor pressure correlation for HT, DT and  $T_2$ 

HT         DT         T2 $C_1$ -42.84         -24.72         125.35 $C_2$ -2.24         -54.57         -922.34 $C_3$ -4.71         -1.19         4.58 $C_4$ -1.31         -0.79         0.39 $C_5$ 25.20         17.01         -28.71 $C_6$ 1.09×10 <sup>-2</sup> 5.85×10 <sup>-3</sup> 0.00           Min. temperature         4.20 K         4.20 K         4.20 K           Max. temperature         35.19 K         37.19 K         38.35 K	Daromatar	Component				
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	Farameter -	HT	DT	$T_2$		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$C_1$	-42.84	-24.72	125.35		
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$C_{2}$	-2.24	-54.57	-922.34		
$\begin{array}{cccccc} C_4 & -1.31 & -0.79 & 0.39 \\ C_5 & 25.20 & 17.01 & -28.71 \\ C_6 & 1.09 \times 10^{-2} & 5.85 \times 10^{-3} & 0.00 \\ \\ \mbox{Min. temperature} & 4.20 \ \mbox{K} & 4.20 \ \mbox{K} & 4.20 \ \mbox{K} \\ \mbox{Max. temperature} & 35.19 \ \mbox{K} & 37.19 \ \mbox{K} & 38.35 \ \mbox{K} \end{array}$	$C_3$	-4.71	-1.19	4.58		
$C_5$ 25.20         17.01         -28.71 $C_6$ $1.09 \times 10^{-2}$ $5.85 \times 10^{-3}$ 0.00           Min. temperature         4.20 K         4.20 K         4.20 K           Max. temperature         35.19 K         37.19 K         38.35 K	$C_{\!4}$	-1.31	-0.79	0.39		
$C_6$ $1.09 \times 10^{-2}$ $5.85 \times 10^{-3}$ $0.00$ Min. temperature         4.20 K         4.20 K         4.20 K           Max. temperature         35.19 K         37.19 K         38.35 K	$C_{5}$	25.20	17.01	-28.71		
Min. temperature         4.20 K         4.20 K         4.20 K           Max. temperature         35.19 K         37.19 K         38.35 K	$C_{6}$	1.09×10 <sup>-2</sup>	5.85×10 <sup>-3</sup>	0.00		
Max. temperature 35.19 K 37.19 K 38.35 K	Min. temperature	4.20 K	4.20 K	4.20 K		
*	Max. temperature	35.19 K	37.19 K	38.35 K		



[Fig. 2] Vapor pressures prediction  $H_2$ , HD,  $D_2$ , HT, DT and  $T_2$  using Aspen Plus.

## 3. 공정모사

#### 3.1 원료와 공정 배열

수소 동위원소 사이의 심냉 분리를 위한 원료 조건은 다음의 Table 7에 나타내었다. 그리고 Fig. 3에는 수소동 위원소를 분리해 내기 위한 증류탑 배열을 나타내었다.

[Table 7	Feed	stream	information
----------	------	--------	-------------

Stream name	Feed		Ext-Feed			
Temperature (K)	30.	00	20.	00		
Pressure (kPa)	111	.46	111	.46		
Vapor frac.	1.0	00	1.0	00		
Mole flow (mol/h)	120.00		60.00			
Mass flow (kg/h)	0.60		0.23			
	mol/h	mol%	mol/h	mol%		
$H_2$	1.20	1.00	12.10	5.34		
HD	0.00	0.00	9.07	4.00		
HT	0.00	0.00	12.07	5.33		
$D_2$	28.80	24.00	193.34	85.33		
DT	60.00	50.00	0.00	0.00		
$T_2$	30.00	25.00	0.00	0.00		

#### 3.2 초저온 증류탑 공정 모사

Fig. 3의 공정도에 의하면 ISS로 유입되는 Table 7의 원료는 첫 번째 증류탑(C1)으로 주입되어 원료 중에 포 함되어 있는 수소(H2)를 대부분 증류탑 상부로 분리하고 증류탑 하부로는 DT가 99.9% 이상 회수된다. 그리고 첫 번째 증류탑(C1) 상부에서 회수된 성분들은 추가적으로 유입되는 원료(Ext-Feed)와 혼합된 후 첫 번째 평형반응 기(R1-HD)를 거치면서 HD가 일부 생산되어 진다. 그리 고 두 번째 증류탑(C2)에서는 평형반응기에서 유입되는 성분들 중 HD를 대부분 상부로 회수하고 하부로는 D2를 포함하여 D2보다 고비점 성분들을 분리하게 된다. 한편 두 번째 증류탑에 하부로 분리되어진 성분들은 두 번째 평형반응기(R2-DT)를 치면서 D2+T2↔2DT 반응으로 DT 가 생성되면서 T2가 거의 제거되어 진다. 두 번째 평형반 응기에서 나온 성분들은 세 번째 증류탑(C3)으로 유입되 어 상부로는 D2를 대부분 회수하게 되고 하부로는 DT를 대부분 회수하게 된다. 한편 첫 번째 증류탑에서 하부로 분리된 DT와 T2 성분들은 네 번째 증류탑(C4)으로 유입 되어 하부로 T2를 대부분 회수하고 DT는 상부로 회수하 여 세 번째 증류탑 하부 스트림과 만나 DT를 생산하게 된다. 본 연구에서는 앞서 수집한 수소동위원소들의 물성 치들을 Aspen Plus내에 DB로 내장하고, D2 99.00 mol% 이상, DT 98.00 mol% 이상, T<sub>2</sub> 94.00 mol% 이상의 순도 로 정제하기 위한 공정조건을 결정하였다. Table 8에는 각 증류탑에서 분리에 필요한 이론단수와 환류유량 그리 고 원료 주입단 등을 나타내었다. 이러한 공정조건을 적 용하여 초저온증류탑과 평형반응기를 모사 하였다. Table 9에는 ISS 공정 주요 스트림(stream)에 대한 열 및 물질수 지 계산결과를 나타내었다. Table 9을 보면 D2는 99.13 mol%, DT는 98.74mol%, T<sub>2</sub>는 94.26 mol%의 순도로 회 수되는 것을 알 수 있다.



[Fig. 3] Schematic flow diagram of ISS.

[Table 8] Design	conditions	for	columns
------------------	------------	-----	---------

Stream number	C1	C2	C3	C4
Reflux ratio	54.75	82.06	13.25	56.55
Top distillate rate (mol/h)	29.77	1,600.00	930.00	58.88
Number of stages	80.00	80.00	80.00	180.00
Feed stage	50.00	55.00	40.00	67.00
Column top press. (kPa)	91.19	70.93	81.06	106.39

[Table	9]	Heat	and	material	balance	result
--------	----	------	-----	----------	---------	--------

Stream name	HD		D2		DT		T2	
Temperature (K)	21.44		23.10		23.73		24.95	
Pressure (kPa)	70.93		81.06		81.36		110.44	
Vapor fraction	0.00		0.00		0.03		0.00	
Mole flow (kmol/hr)	0.0	02 0.07		0.06		0.03		
Mass fow (kg/hr)	0.0	06	0.28		0.30		0.19	
Component	flow rate (mol/hr)	percents (mol%)						
$H_2$	1.03	5.27	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
HD	15.34	78.80	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
HT	2.40	12.32	0.60	0.85	0.00	0.00	0.00	0.00
$D_2$	0.70	3.61	69.63	99.13	0.29	0.49	0.00	0.00
DT	0.00	0.00	0.01	0.01	58.20	98.74	1.80	5.74
$T_2$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.45	0.76	29.55	94.26

#### 3.3 헬륨 냉동 사이클의 공정 모사

초저온증류계통은 수소동위원소의 원활한 분리를 위 해 20 K 이하의 초저온으로 유지되어야 하므로 단열을 위해 진공시스템을 제외한 모든 설비가 CB(cold box)안 에 들어가 있다. 초저온 냉매로는 헬륨냉동기에서 공급되는 15 K의 헬륨냉매와 보조냉매인 액체질소로 구분된다. 따라서 초저온 냉매 공급계통은 액체질소 공급 장치와 헬륨냉매 공급 장치로 구분할 수 있다. 액체질소는 CB내

부가 초저온으로 유지될 수 있도록 하기 위해 CB내부 상 단과 내부 바깥 면에 액체질소조가 설치되어 진다. 그리 고 헬륨냉매는 CB내에서 초저온 증류 증류탑의 응축기 (condenser)와 재비기(reboiler)에 사용되어 수소통위원소 혼합기체를 정제할 수 있도록 한다. 이러한 헬륨냉매 공 급 장치는 헬륨냉동기, 헬륨압축기 및 냉각탑으로 구성된 헬륨냉동사이클을 통해 공급되어 진다. Fig. 4에는 본 연 구에서 적용된 헬륨냉동사이클을 나타내었다. 헬륨압축 기는 열 교환 및 압력손실이 발생한 헬륨을 약 2,000 kPa 까지 가압하여 헬륨냉동기로 이송하는 역할을 한다. 헬륨 냉동기는 이송된 헬륨을 증류탑 응축기에서 나오는 약 22 K의 헬륨냉매와 열 교환을 시켜 약 30 K까지 냉각되 도록 하고 냉각된 헬륨기체 일부를 재비기의 열매로 사 용되도록 한다. 재비기로 유입된 30 K의 헬륨은 열을 공 급하고 26 K까지 냉각되어 유출된다. 그리고 재비기에서 유출된 헬륨은 팽창터빈(expansion turbine)을 거쳐 607 kPa까지 팽창되면서 약 14 K까지 냉각되고 응축기로 공 급되어 진다. 응축기로 공급된 헬륨은 응축기에서 열을 공급받고 약 18 K으로 유출된다. Fig. 4에는 이러한 헬륨 냉동사이클 공정을 나타내었다. 한편 Table 10에는 상기 초저온증류공정 모델링을 통해 계산된 각 냉각기에 필요

한 heat duty를 나타내었다. 냉각기는 총 6개로 2개의 냉 각기와 4개의 응축기(condenser)가 포함된다. 공정모델링 결과에 따르면 6개 열교환기에 필요한 총 heat duty는 -3.7493 kW이며 이 열량은 14 K의 헬륨냉매로부터 공급 된다. 그리고 Table 11에는 초저온증류공정에서 필요한 가열기의 heat duty를 나타내었다. 가열기는 총 4개로 각 증류탑의 재비기(reboiler)가 해당된다. 공정모델링 결과 에 따르면 4개의 재비기에서 필요한 총 heat duty는 3.2682 kW이며 이 열량은 30 K의 헬륨기체로부터 공급 되어 진다. 결국 Fig. 4에서 재비기에 해당하는 열교환기 (Fig. 4에서 reboilers)의 heat duty가 3.2682 kW 되도록 하고, 냉각기와 응축기에 해당하는 열교환기(Fig. 4에서 Condensers + Coolers)의 heat duty가 -3.7493 kW 되도록 하는 공정을 모델링 하였다. 이러한 결과를 통해 상기 모 델링을 한 초저온증류공정의 헬륨냉동사이클에 필요한 헬륨 냉매의 유량은 598.9 kg/h 이며, 재비기로 유입되는 헬륨유량은 533.7 kg/h로 계산되었다. 이러한 결과를 Table 12에 나타내었다. 그리고 이때 사용된 헬륨압축기 의 소요 동력은 효율 70.0% 기준으로 약 198.68 kW가 소 요되며 팽창터빈(expansion turbine)기에서는 약 6.34 kW 가 소요되는 것으로 계산되었다.



Cryogenic Distillation Cold Box

[Fig. 4] Schematic diagram of helium refrigeration cycle.

Heat Exchanger ID	E2	E4	C1-cond.	C2-cond.	C3-cond.	C4-cond.
Heat Exchanger Name	Cooler 1	Cooler 2	Condenser for C1 Column	Condenser for C2 Column	Condenser for C3 Column	Condenser for C4 Column
Inlet Temperature (K)	298.10	309.60	23.45	21.51	24.60	23.10
Outlet Temperature (K)	20.00	20.00	23.44	21.44	24.59	23.10
Heat duty (kW)	-0.2396	-0.1953	-0.6075	-0.5483	-1.5272	-0.6314
Total heat duties (kW)	-3.7493 (-3,749.3 Watt)					

[Table 10] Summary of helium users (1)

[Table 11] Summary of helium users (2)

Heat Exchanger ID	C1-reb.	C2-reb.	C3-reb.	C4-reb.		
Heat Exchanger Name	Reboiler for C1 Column	Reboiler for C2 Column	Reboiler for C3 Column	Reboiler for C4 Column		
Inlet Temperature (K)	24.23	22.70	24.96	23.15		
Outlet Temperature (K)	24.23	22.71	24.96	23.16		
Heat duty (kW)	0.5556	0.551	1.5275	0.6341		
Total heat duties (kW)	3.2682 (-3,268.2 Watt)					

[Table 12] Simulation result of helium refrigeration cycle

Stream number	5		6		10		11	
Stream name	Reb. inlet		Reb. outlet		Cond. inlet		Cond. outlet	
Temperature (K)	30.00		26.00		14.00		18.00	
Pressure (kPa)	20.	.00	20	.00	6.25		6.25	
Total molar rate (kmol/h)	133.3		133.3		149.6		149.6	
Total mass rate (kg/h)	53	533.7 533.7 598.9		8.9	59	8.9		
Component	(kg/hr)	(wt%)	(kg/hr)	(wt%)	(kg/hr)	(wt%)	(kg/hr)	(wt%)
Helium	533.7	100	533.7	100	598.9	100	598.9	100

## 4. 결론

- 본 연구에서는 기존에 내장되어 있는 않은 HT, DT, 및 T<sub>2</sub>등 3개의 수소동위원소들의 물성데이터를 상 용성 화학공정 모사기에 내장하였다. 따라서 ISS 공정에서 취급하는 6개의 수소동위원소인 H<sub>2</sub>, HD, HT, D<sub>2</sub>, DT 및 T<sub>2</sub> 성분들에 대한 열역학 물성들을 SRK와 같은 상태방정식을 사용하여 예측 가능하도 록 하였다.
- D<sub>2</sub>, DT, T<sub>2</sub>를 원하는 순도(D<sub>2</sub> 99.00 mol%, DT 98.00 mol%, T<sub>2</sub> 94.00 mol%) 이상으로 정제하기 위해 총 4개의 증류탑과 2개의 평형반응기를 사용 한 ISS 공정을 모사하였다. 그 결과 네 번째 증류

탑(C4)을 통해 T<sub>2</sub>는 94.26%의 순도를 얻을 수 있 었으며, 세 번째 증류탑(C3)을 통해 D<sub>2</sub>와 DT를 각 각 99.13 mol%와 98.74 mol%로 정제할 수 있었다.

3) 본 연구팀은 수소동위원소들에대한 열역학 물성확 보와 ISS 공정모사를 통해 simulation model을 확보 하게 되었다. 추후 이를 기반으로 ITER ISS에 대해 최적화된 simulation model을 확보할 수 있을 것으 로 판단된다. 그리고 ITER ISS에 대한 공정 해석 및 computer simulation 관련하여 독일, 일본, 미국 등 핵융합연료주기 선진국 대비 우리나라의 기술 수준은 대등한 수준이 될 것으로 판단된다.

# 사용기호

$T_c$	:	critical	temperature
-------	---	----------	-------------

$P_c$ : critical pressu	re
-------------------------	----

- $V_c$  : critical volume
- $Z_c$  : critical compressibility factor

 $\omega$  : acentric factor

MW : molecular weight

 $P_L$  : vapor pressure

- $\Delta G_{f,i}^0$  : standard Gibbs free energy of formation
- A, B, C: coefficients in Antoine equation
- $C_i$  : coefficients in modified Antoine equation

#### References

- ITER IDM Document (ITER\_D\_2X6K67), Plant Description (PD), Chap. 10 Fuel Cycle and Radiological Monitoring (2009).
- [2] D. Babineau, S. Maruyama, R. Pearce, M. Glugla, L. Bo, B. Rogers, S. Willms, G. Piazza, T. Yamanishi, S.H. Yun, L. Worth, and W. Shu, "Review of the ITER Fuel Cycle," IAEA FEC 2010, 2010.
- [3] M. Glugla, D. Babineau, L. Bo, S. Maruyama, R. Pearce, G. Piazza, B. Rogers, S. Willms, T. Yamanishi, and S.-H. Yun, "Review of the ITER D-T Fuel Cycle Systems and Recent Progress," Tritium 2010, Nara, Japan, 2010.
- [4] S. Maruyama, Y. Yang, R.A. Pitts, M. Sugihara, S. Putvinski, S. Carpentier- Chouchana, B. Li, W. Li, L. Baylor, S.J. Meitner, C. Day, B. laBombard, and M. Reinke, "ITER Fuelling System Design and Challenges —Gas and Pellet Injection and Disruption Mitigation," IAEA FEC 2010, 2010.
- [5] S. Konishi, M. Glugla, and T. Hayashi, "Fuel Cycle Design for ITER and Its Extrapolation to DEMO," Fusion Engineering and Design, Vol. 83, 2008, pp. 954-958.

DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2008.06.060

[6] M. Glugla, A. Antipenkov, S. Beloglazov, C. Caldwell-Nichols, I.R. Cristescu, I. Cristescu, C. Day, L. Doerr, J.-P. Girard, and E. Tada, "The ITER Tritium System," Fusion Engineering and Design, Vol. 82, 2007, pp. 472-487.

DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2007.02.025

- H. Yoshida, O. Kveton, J. Koonce, D. Holland, and R. Haange, "Status of the ITER Plant Design", Fusion Engineering and Design, Vol. 39-40, 1998, pp. 875-882. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/S0920-3796(98)00113-6
- [8] Ahn, D. H., Paek, S. W., Kim, K. R., Jeong, H. S., Choi, H. J., Kim, J. K., Kang, H. S., Lee, H. S., Kim, W. S. and Song, K. M., "Design of the Liquid Phase Catalytic Exchange Column for the Wolsong Tritium Removal Facility," Proceedings of the Korean Nuclear Society Spring Meeting, May 27-28 (2001).
- [9] D. Y. Peng, and D. B. Robinson, "A New Two-constant Equation of State for Fluids and Fluid Mixtures", Ind. Eng. Chem. Fundam, 15, 8 (1976). DOI: http://dx.doi.org/10.1021/i160057a011
- [10] G. Soave, "Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State," Chem. Eng. Sci., 27(6), 1197-1203 (1972).

DOI: http://dx.doi.org/10.1016/0009-2509(72)80096-4



#### [정회원]

- 1984년 2월 : 경북대학교 자연과 학대학 화학과 (이학사)
- 1986년 2월 : 경북대학교 대학원 화학과 (이학석사)
- 1995년 2월 : 경북대학교 대학원 화학과 (이학박사)
- 1998년 8월 ~ 1999년 2월 : 미 국 University of California, Berkeley 화학과 교환교수

• 1995년 9월 ~ 현재 : 동양대학교 생명화학공학과 교수

<관심분야> 정밀화학, 유기합성

#### 노재 현(Jaehyun Rho)

[준회원]



- 2005년 2월 : 호서대학교 공과대 학 화학공학과 (공학사)
- 2007년 2월 : 호서대학교 공과대 (공학석사)
- 2007년 3월 ~ 현재 : 호서대학교 공과대(박사과정)

<관심분야> 열역학, 공정 Simulation

#### 조 정 호(Jungho Cho)

[정회원]



- 1988년 2월 : 한양대학교 공과대
   학 화학공학과 (공학사)
- 1991년 8월 : 한국과학기술원 화 학공학과 (공학석사)
- 1998년 2월 : 서울대학교 공과대 학 화학공학과 (공학박사)
- 1991년 1월 ~ 1997년 2월 : 대 림산업(주) 공정부 과장
- 1997년 3월 ~ 2000년 2월 : 경인여자대학 산업환경공 학부 전임강사
- 2000년 3월 ~ 2008년 2월 : 동양대학교 공과대학 생 명화학공학과 전임강사/조교수
- 2008년 3월 ~ 현재 : 공주대학교 화학공학부 부교수, 정교수

<관심분야> 열역학, 공정 Simulation