Transactions of KSAE, Vol. 14, No. 3, pp.125-132 (2006)

Copyright © 2006 KSAE
1225-6382/2006/081-17

모노리스 NH_3-SCR 반응기 내에서의 NH_3 흡·탈착 특성에 대한 연구

왕 태 중[1] · 백 승 욱[*1] · 정 명 근[2] · 여 권 구[3]

한국과학기술원 기계공학과[1] · 오덱(주) 촉매기술팀[2] · 현대자동차(주) 배기연구팀[3]

A Study of NH_3 Adsorption/Desorption Characteristics in the Monolithic NH_3-SCR Reactor

Taejoong Wang[1] · Seungwook Baek[*1] · Myunggeun Jung[2] · Gwonkoo Yeo[3]

[1]*Department of Mechanical Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology, Daejeon 305-701, Korea*
[2]*ORDEG Company, 404 Moknae-dong, Ansan-si, Gyeonggi 425-100, Korea*
[3]*Hyundai-Motor Company, 772-1 Jangdeok-dong, Hwaseong-si, Gyeonggi 445-706, Korea*

(Received 11 October 2005 / Accepted 8 December 2005)

Abstract : Transient kinetics of NH_3 adsorption/desorption and of SCR (selective catalytic reduction) of NO with NH_3 were studied over vanadium based catalysts, such as V_2O_5/TiO_2 and V_2O_5-WO_3/TiO_2. In the present catalytic reaction process, NO adsorption is neglected while NH_3 is strongly chemisorbed on the catalytic surface. Accordingly, it is ruled out the possibility of a reaction between strongly adsorbed NH_3 and NO species in line with the hypothesis of an Eley-Rideal mechanism. The present kinetic model assumes; (1) non-activated NH_3 adsorption, (2) Temkin-type NH_3 coverage dependence of the desorption energy, (3) non-linear dependence of the SCR reaction rate on the NH_3 surface coverage. Thus, the surface heterogeneity for adsorption/desorption of NH_3 is taken into account in this model. The present study extends the pure chemical kinetic model based on a powdered-phase catalytic system to the chemico-physical one applicable to a realistic monolith reactor.

Key words : SCR(Selective Catalytic Reduction, 선택적촉매저감), Adsorption(흡착), Kinetic model(반응모델), Surface coverage(표면점유율), Monolith reactor(모노리스 반응기)

1. 서 론

디젤차량용 SCR 시스템은 암모니아(ammonia, NH_3) 또는 탄화수소(hydrocarbon, HC)를 환원제(reductant)로 이용하여 선택적 촉매반응에 의해 디젤배출가스로부터 NO_X를 저감하는 장치이며 Euro-V(2008)와 같은 미래의 NO_X 배출규제에 대응하기 위한 유일한 기술로 평가되고 있다.[1] 이러한 SCR 시스템은 압력손실 대비 넓은 배기가스 접촉면적을 위해 하니컴 모노리스(honeycomb monolith) 형태의 반응기를 주로 사용한다. 본 연구에서 다룰 모노리스 형태의 NH_3-SCR 반응기에 대한 개략도를 Fig. 1에 나타내었다.

디젤차량용 NH_3-SCR 반응기는 촉매와 반응물의 상이 서로 다른 이질촉매시스템(heterogeneous catalyst system)이기 때문에 화학적·물리적으로 매우 다양한 인자에 의해 시스템의 성능, 즉 NO_X의 전환률(conversion rate)이 결정된다.[2,3]

NH_3-SCR 반응기에는 백금(platinum), 바나듐(vanadium) 및 지올라이트(zeolite) 계열의 촉매가 주로 사용되는데, 이들은 각기 다른 온도활성창

*Corresponding author. E-mail: swbaek@kaist.ac.kr

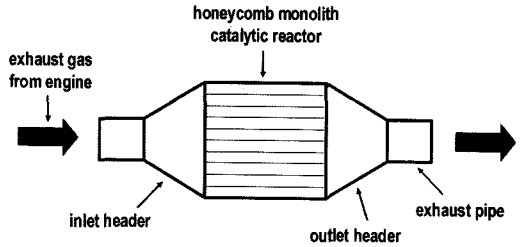

Fig. 1 Schematic diagram of mobile SCR system for Diesel application

(operating temperature window)을 가지며 촉매특성 또한 모두 다르다.[1,4] 본 연구에서는 작동온도범위가 백금과 지올라이트의 중간에 위치한 바나듐 촉매 SCR 시스템을 다루게 된다.

NH_3-SCR 반응기 내부의 NO와 NH_3 흡착특성은 서로 다른데, NH_3는 촉매표면에 강하게 흡착되는 반면 NO는 약하게 흡착되거나 또는 기체상으로 직접 반응에 참여한다고 알려져 있다.[5,6] 따라서 시스템의 정확한 모사를 위해서는 NH_3의 흡 · 탈착에 대한 연구가 선행되어야 하며, 본 연구에서는 이에 대한 모델링 및 해석을 중점적으로 수행하였다.

촉매시스템 모델링에 필요한 반응상수(reaction parameter)는 일반적으로 분산상(powdered-phase)의 촉매반응실험을 통해 얻는다. 하지만 분산상의 실험을 통해서는 순수하게 화학반응속도론(chemical kinetics)과 관련된 정보만을 얻을 수 있을 뿐 반응기 내의 열 및 물질 전달에 관련된 정보를 얻을 수는 없다. 즉, 분산상의 실험으로는 우리가 관심이 있는 가스성분의 반응기 입 · 출구 사이 농도 변화를 알 수는 있겠지만 반응기 내부에서 물리적 · 화학적으로 복합적인 현상의 결과로서 나타나는 반응특성을 파악하는 데는 한계가 있다. 따라서 본 연구에서는 화학적 요소만이 고려된 분산상의 촉매반응모델을 실제 모노리스 촉매반응기에 적용할 수 있는 모델로 확장함으로써 화학적 요소뿐 아니라 물리적 요소까지 고려된 실제적인 촉매반응 모델링을 정립하였다.

2. 모델링

NH_3-SCR 반응기 내에서는 우리가 원하는 선택적(selective) NO_X 제거반응과 원하지 않는 비선택적(non-selective) 반응들이 경쟁적으로 일어나며, 이들 중 가장 주요한 반응은 식 (1)과 같다.[1] 본 연구에서는 식 (1)의 반응이 NH_3-SCR 시스템 내 NO_X 관련 반응을 대표한다고 가정한다.

$$4NO + 4NH_3 + O_2 \rightarrow 4N_2 + 6H_2O \quad (1)$$

또한, 하니컴 모노리스 반응기 내 유동은 1차원의 다공성물질로 가정하여 Darcy 유동모델[7]을 적용하였다. 일반적인 디젤배기가스 유량, 온도, 셀밀도(cell density) 조건에서 모노리스 각 채널의 레이놀즈수(Reynolds number)를 개략적으로 계산한 결과 대략 10 ~ 100의 범위임을 확인했고, 이로써 Darcy 유동모델 적용의 타당성을 검증했다.

2.1 NH_3 흡 · 탈착 반응속도론

SCR 반응이 없는 환경 하에서 먼저 NH_3의 흡 · 탈착에 대한 모델링을 수행하였다.

촉매표면에서 NH_3의 질량보존은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \theta_{NH_3}}{\partial t} = R_a - R_d \quad (2)$$

여기서, θNH_3는 NH_3의 촉매표면점유율(surface coverage)을, R_a와 R_d는 각각 흡착률(adsorption rate)과 탈착률(desorption rate)을 의미한다.

Lietti 등[8]은 NH_3 흡 · 탈착에 대한 마이크로 반응기(micro-reactor) 실험을 통해 반응기 내부 유동의 축방향 확산(axial dispersion)을 무시할 수 있음을 보였으며, 이를 고려한 기체상에서의 NH_3 질량보존은 다음과 같다.

$$\epsilon \frac{\partial C_{NH_3}}{\partial t} = -\epsilon u \frac{\partial C_{NH_3}}{\partial x} + (1-\epsilon)\Omega(R_d - R_a) \quad (3)$$

여기서, C_{NH3}는 기체상 NH_3 몰농도, ϵ은 반응기의 다공도(porosity), u는 유동속도, Ω는 촉매의 흡착 용량(adsorption capacity)을 나타낸다.

NH_3가 촉매표면에 화학흡착(chemisorption)되는 과정도 일종의 화학반응으로 볼 수 있기 때문에 식 (2), (3)에 나타나는 흡착률을 다음과 같은 Arrhenius 형태로 표현할 수 있다.

$$R_a = k_a^0 \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T}\right) C_{NH_3}(1-\theta_{NH_3}) \quad (4)$$

여기서, $k_a{}^0$는 반응상수, R_u는 일반기체상수, T는 촉매표면온도를 의미한다. 이 때, 바나듐 계열의 촉매에 대한 NH_3의 흡착은 기존의 연구들[5,9,10]에 의해 비활성화(non-activated) 과정임이 알려져 있으므로 흡착에 필요한 활성화에너지(adsorption activation energy), E_a는 영(zero)으로 둘 수 있다.

NH_3의 탈착률 또한 다음과 같이 Arrhenius 형태로 표현된다.

$$R_d = k_d^0 \exp\left(-\frac{E_d}{R_u T}\right)\theta_{NH_3} \tag{5}$$

여기서, $k_d{}^0$는 반응상수, E_d는 탈착에 필요한 활성화에너지(desorption activation energy)를 나타낸다. NH_3-SCR 반응기 내 NH_3의 탈착 현상은 촉매표면의 물리적·화학적 특성 및 NH_3 표면점유율 등 표면조건에 상당히 종속적인(dependent) 특성을 보이므로 일정한 E_d를 가정하는 Langmuir 접근방법은 NH_3의 탈착을 모델링하기에 적절하지 못하며 촉매표면의 이질성(heterogeneity)이 고려되어야 한다.[11,12] 본 연구에서는 다음의 식 (6)과 같이 탈착에너지가 NH_3의 표면점유율 증가에 따라 선형적으로 감소한다고 보는 Temkin 모델을 사용하였으며, 이는 Langmuir 모델에 비해 실험적인 경향을 더 잘 예측하는 것으로 알려져 있다.[8]

$$E_d = E_d^0(1-\alpha\theta_{NH_3}) \tag{6}$$

여기서, $E_d{}^0$는 θ_{NH3}가 영(zero)일 때의 탈착 에너지를, α는 종속상수(dependence parameter)를 의미한다. 이상의 NH_3 흡·탈착 모델상수는 Table 1에 나타낸 Lietti 등[8]의 실험결과를 사용하였다.

Table 1 Kinetic parameters for NH_3 adsorption and desorption over V_2O_5/TiO_2 catalyst[8]

Parameters	Values
$k_a{}^0$	0.82 [m^3/(mol·s)]
$k_d{}^0$	3.67×10^6 [1/s]
$E_d{}^0$	25.8 [kcal/mol]
α	0.31
$\Omega'[(1-\varepsilon)/\varepsilon\times\Omega]$	209 [mol_{NH3}/m^3]

2.2 SCR 반응속도론

여기서는 NH_3 흡·탈착 모델에서 나아가 SCR 반응에 대한 모델링을 수행하였다.

식 (1)의 SCR 반응을 고려한 촉매표면에서의 NH_3 질량보존은 다음과 같다.

$$\frac{\partial\theta_{NH_3}}{\partial t} = R_a - R_d - R_{NO} \tag{7}$$

위의 식 (7)은 식 (2)에 SCR 반응에 의한 NO의 감소율, R_{NO}만큼의 NH_3 표면점유율 감소를 고려하였다. 또한, 기체상의 NH_3와 NO 사이의 반응은 무시할 수 있으므로 기체상의 NH_3 질량 보존 및 흡·탈착에 대해서는 식 (3) ~ (6)을 동일하게 적용할 수 있다.

기체상 NO 질량보존은 다음과 같다.

$$\epsilon\frac{\partial C_{NO}}{\partial t} = -\epsilon u\frac{\partial C_{NO}}{\partial x} - (1-\epsilon)\Omega R_{NO} \tag{8}$$

SCR 반응률은 다음과 같다.

$$R_{NO} = k_{NO}C_{NO}\theta^*_{NH_3}\left[1-\exp\left(-\frac{\theta_{NH_3}}{\theta^*_{NH_3}}\right)\right] \tag{9}$$

여기서, θ_{NH3}가 임계표면점유율(critical NH_3 surface coverage), θ^*_{NH3}에 가까워질수록 SCR 반응률은 θ_{NH3}에 독립적이 된다.

식 (9)의 k_{NO}는 다음과 같이 Arrehnius 형태로 쓸 수 있다.

$$k_{NO} = k_{NO}^0\exp\left(-\frac{E_{NO}}{R_u T}\right) \tag{10}$$

여기서, $k_{NO}{}^0$는 반응상수, E_{NO}는 SCR 반응의 활성화에너지를 의미한다.

또한, SCR 반응의 결과 N_2가 생성되므로 이에 대한 기체상 질량보존을 다음으로 쓸 수 있다.

$$\epsilon\frac{\partial C_{N_2}}{\partial t} = -\epsilon u\frac{\partial C_{N_2}}{\partial x} + (1-\epsilon)\Omega R_{NO} \tag{11}$$

이상의 NH_3 흡·탈착을 고려한 SCR 반응모델 상수는 V_2O_5-WO_3/TiO_2 촉매에 대한 Lietti 등[8]의 실험결과를 사용하였으며 Table 2에 나타내었다.

2.3 초기조건 및 경계조건

NH_3 표면점유율 및 모든 화학종 농도의 초기 값은 다음과 같이 영(zero)으로 두었다.

Table 2 Kinetic parameters for the SCR reaction considering NH_3 adsorption/desorption over V_2O_5-WO_3/TiO_2 catalyst[8)]

Parameters	Values
k_a^0	0.487 [m^3/(mol·s)]
k_d^0	2.67×10^5 [1/s]
E_d^0	22.9 [kcal/mol]
α	0.405
$\Omega'[(1-\varepsilon)/\varepsilon\times\Omega]$	270 [mol_{NH3}/m^3]
k_{NO}^0	7.19×10^5 [m^3/(mol·s)]
E_{NO}	14.2 [kcal/mol]
θ^*_{NH3}	0.121

$$\theta_{NH_3}(0,x)=0 \tag{12}$$

$$C_{NH_3}(0,x)=0 \tag{13}$$

$$C_{NO}(0,x)=0 \tag{14}$$

$$C_{N_2}(0,x)=0 \tag{15}$$

경계조건으로는 모노리스 입구 (x = 0)에서는 배기가스 유입조건을 대입하였고 출구 (x = L)에서는 다음의 Neumann 조건[13)]을 적용하였다.

$$\frac{\partial\theta_{NH_3}(t,L)}{\partial x}=0 \tag{16}$$

$$\frac{\partial C_{NH_3}(t,L)}{\partial x}=0 \tag{17}$$

$$\frac{\partial C_{NO}(t,L)}{\partial x}=0 \tag{18}$$

$$\frac{\partial C_{N_2}(t,L)}{\partial x}=0 \tag{19}$$

2.4 수치해법

편미분 형태로 나타내어진 지배방정식들은 오일러 내재적 방법(Euler implicit method)[14)]을 이용하여 선형화(linearization) 하였고, 선형화된 지배방정식은 TDMA(tri-diagonal matrix algorithm)를 이용하여 풀이하였다.

3. 결과 및 토의

3.1 NH_3 흡·탈착

SCR 반응이 없는 상태에서의 NH_3 흡·탈착 모델링의 결과를 Lietti 등[8)]이 수행한 단일 마이크로 채널(single micro-channel)에서의 분산상의 실험결과(temperature-programmed desorption, TPD)와 비교하여 Fig. 2에 나타내었다. 계산을 위해 NH_3 입구농도는 실험과 동일하게 최초 700 ppm을 유지하다가 750 sec에서 유입을 중단하는 계단형태의 입력(step addition and shut-off)을 가하였으며, 세 가지 그래프 모두 각기 다른 시간 이후 온도를 15 K/min 비율로 773 K까지 증가시켰다.

Fig. 2의 각 그래프에서 시간에 따른 입·출구 농도 자취의 차이는 촉매표면에 흡착된 NH_3의 양을 나타내며, 623 K에서 그 면적이 가장 적음을 볼 수 있다. 즉, 촉매온도가 높을수록 표면에 흡착되는 총 NH_3의 양이 감소하는데, 이는 온도가 증가할수록 상대적으로 안정한 흡착상(adsorbed-phase)에 구속되어 있던 NH_3가 기체상으로 더 많이 탈출해 나오기 때문으로 설명할 수 있다.

Fig. 3에는 세 가지 촉매표면의 온도에 대하여 시간에 따른 반응기 내 축방향으로의 NH_3 흡착분포 변화를 나타내었다. 각 결과에서 가로축(normalized axial length)의 0은 모노리스 반응기 입구를, 1은 출구를 나타내며, 계산조건은 Fig. 2의 경우와 동일하다. 결과를 보면, 시간이 증가함에 따라 NH_3 표면점

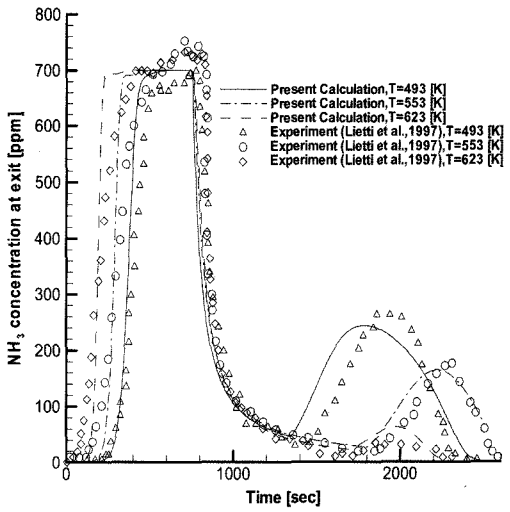

Fig. 2 Transient adsorption/desorption of NH_3 on V_2O_5/TiO_2 catalyst following a NH_3 step addition, shut-off, and thermal desorption (TPD)

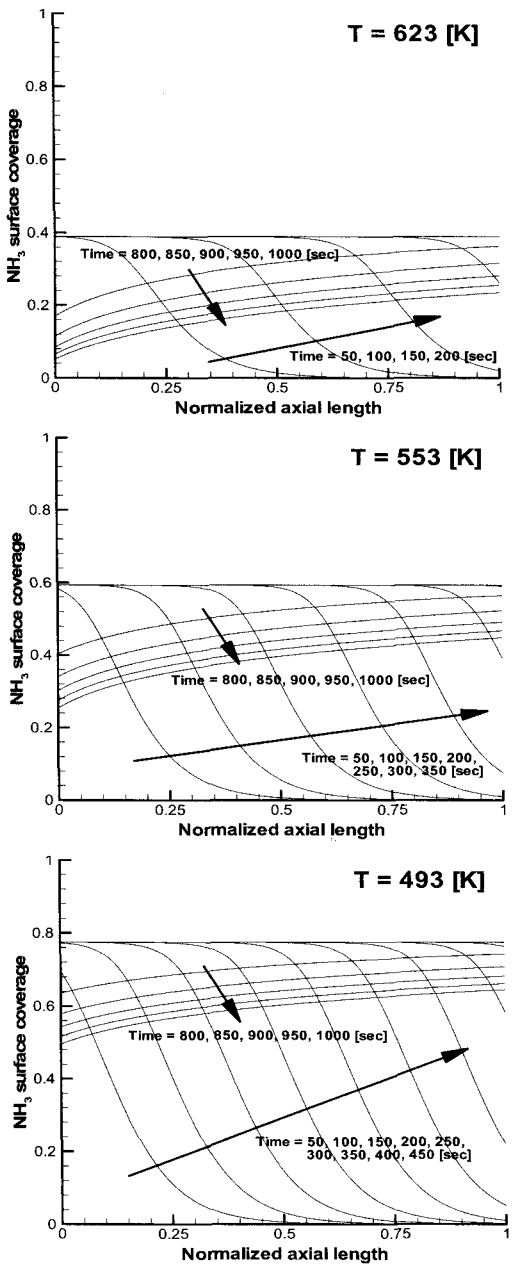

Fig. 3 Transient adsorption/desorption of NH_3 on V_2O_5/TiO_2 catalyst with different surface temperatures

유율이 각 온도에서의 포화 값까지 증가하였다가 NH_3 유입이 중단되는 750 sec를 지나면서부터는 표면에 흡착되어 있던 NH_3의 탈착이 진행됨을 관찰할 수 있다. 이 때, 흡착되어가는 경향과 탈착되는 경향이 다소 다르게 나타남을 볼 수 있는데, 흡착은 반응기 입구로부터 순차적으로 진행되는 반면 탈착은 반응기 전반에서 대체로 균일하게 진행된다.

Figs. 2, 3의 결과를 종합하면, 촉매표면온도가 높을수록 표면이 더 빨리 포화상태에 도달함을 알 수 있으며, 이는 주요하게 표면온도가 증가할수록 표면이 흡착할 수 있는 NH_3의 최대 흡착량이 적어지기 때문이다. Fig. 3에서 493 K의 결과와 623 K의 결과를 비교해보면, 최대 NH_3 표면점유율이 대략 0.8과 0.4로 두 배 정도 차이가 남을 알 수 있다. 이는 물리적으로 표면온도가 623 K일 때 동일 면적의 표면이 흡착할 수 있는 NH_3의 양이 493 K에 비해 50 % 정도임을 의미한다. 그리고 이로 인하여 Fig. 2에서처럼 표면온도가 높을수록 NH_3의 출구농도가 더 급격하게 증가하는 경향을 보이게 된다.

Fig. 4에는 유입되는 배기가스의 속도 변화에 따른 NH_3 표면점유율의 변화를 도시하였다. 계산조건으로는 촉매표면온도를 493 K로 일정하게 유지하였으며, NH_3 입구농도는 최초 700 ppm으로 일정하게 유지하다가 750 sec에서 유입을 중단하는 계단형태의 입력을 가하였다. 또한, 유입속도는 기준속도(u_{ref})의 정수배로 증가시켰는데, 기준속도는 앞의 Figs. 2와 3에서의 유입속도로 두었으며 그래프에서 화살표는 속도가 증가하는 방향을 나타낸다.

Fig. 4에서 초기 시간 부분의 결과를 보면, 유입속도가 증가할수록 촉매표면이 더 빨리 포화상태에

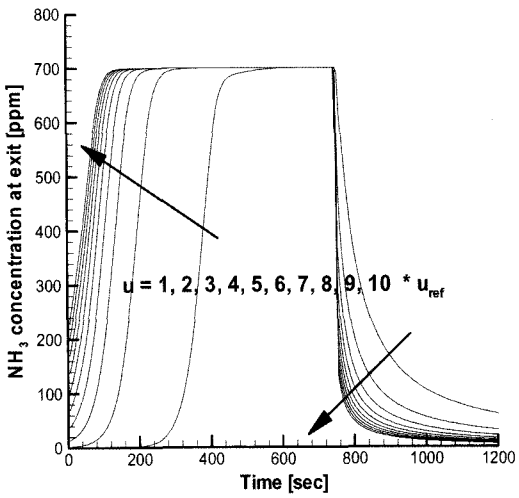

Fig. 4 Adsorption and desorption of NH_3 on V_2O_5/TiO_2 catalyst with different inlet velocities

이르고 따라서 NH_3 출구농도 또한 더 빨리 입구농도를 회복함을 알 수 있다. 그리고 NH_3의 유입이 중단되는 750 sec 이후의 결과를 살펴보면 NH_3가 촉매 표면으로부터 탈착되어 나오는 현상이 관찰되며, 유입속도가 빠를수록 탈착률 또한 급격함을 알 수 있다.

3.2 SCR 반응

V_2O_5-WO_3/TiO_2 촉매에 대해 NH_3 흡·탈착을 고려한 SCR 모델링 결과를 Lietti 등[8]의 실험과 비교하였으며, Fig. 5에 도시하였다. 이 때, NO의 입구농도는 700 ppm으로 일정하게 유지하였고, NH_3 입구농도는 0 sec에서부터 700 ppm을 유지하다가 1250 sec에서 유입을 중단하는 계단형태의 입력을 가하였다.

Fig. 5의 표면온도 493 K인 경우를 보면, 초기 400 sec까지는 NH_3가 거의 배출되지 않으며, NO의 농도 감소 및 유입되지 않던 N_2가 검출되고 있는데, 이는 모두 SCR 반응의 결과이다. 또한, NO와 N_2의 이론 체적비가 1:1 이므로 소비되는 NO와 생성되는 N_2의 체적이 동일함을 확인할 수 있다. 그리고 Fig. 5의 두 가지 표면온도에 대한 결과를 비교해보면, 표면온도가 증가할수록 NO의 전환률 또한 증가함을 알 수 있다.

Fig. 6에는 SCR 반응이 있는 경우의 모노리스 반응기 내 NH_3 흡·탈착 경향을 도시하였다. Fig. 3의 SCR 반응이 없이 NH_3 흡·탈착만 있는 경우와 비교

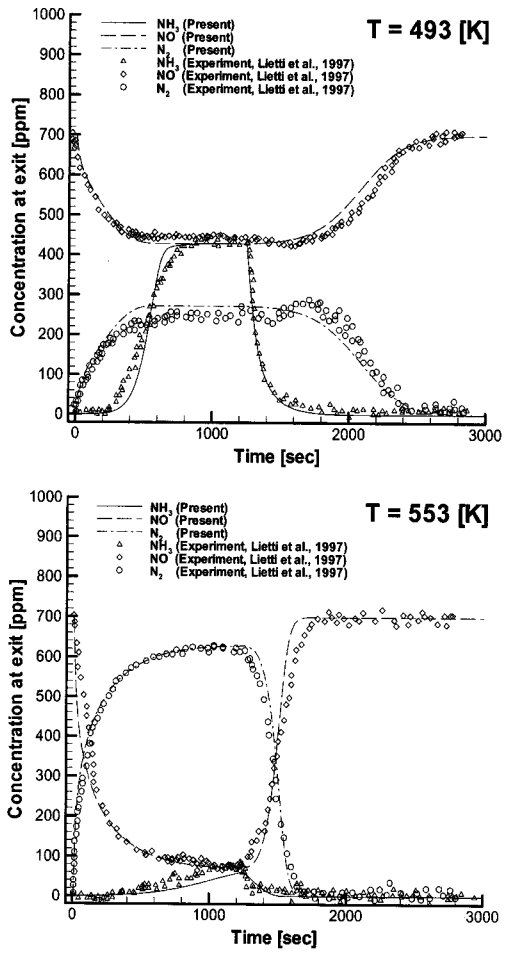

Fig. 5 Step-feed and shut-off of NH_3 in NO over V_2O_5-WO_3/TiO_2 catalyst

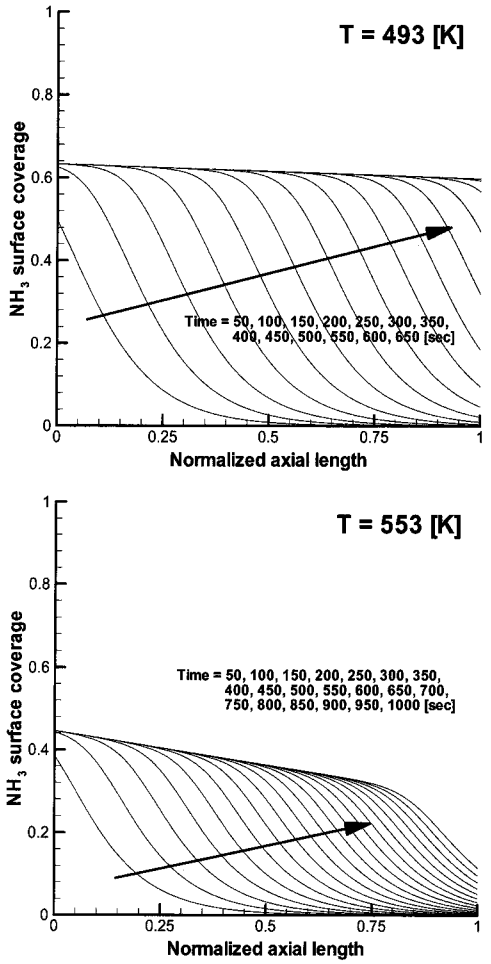

Fig. 6 Transient adsorption/desorption of NH_3 under SCR reaction on V_2O_5-WO_3/TiO_2 catalyst

하면 SCR 반응이 있는 경우에는 반응기 내부 표면이 균일한 포화상태에 이르지 못하고 반응기 출구로 갈수록 NH_3 표면점유율이 감소하고 있음을 볼 수 있다. 특히, 표면온도가 증가하여 SCR 반응이 활발한 경우에는 출구로 갈수록 NH_3 표면점유율이 확연히 감소하는 모습을 보이고 있다. 이는 SCR 반응이 활발할수록 환원제로써 반응에 참여하여 소비되는 NH_3의 양이 많아지기 때문에 가스가 반응기 후방으로 진행할수록 기체상의 NH_3 농도가 감소하여 촉매표면에 흡착되는 양이 상대적으로 적어지기 때문이다. 따라서 NH_3 흡·탈착 평형이 더 낮은 표면점유율에서 형성되는 것이다. 즉, 배기가스가 촉매반응기를 통과할 때 후방으로 진행할수록 촉매 이용률이 감소하므로 동일한 NO 전환성능을 내면서 반응기 후방으로 갈수록 촉매를 절약하는 설계 관점을 생각해 볼 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 V_2O_5/TiO_2 및 V_2O_5-WO_3/TiO_2 촉매를 사용하는 모노리스 형태의 NH_3-SCR 반응기 내에서 일어나는 NH_3의 흡·탈착 현상 및 이를 고려한 SCR 반응에 대한 모델링을 수행하였으며, 이를 통해 촉매표면온도와 속도 변화에 따른 흡·탈착 및 반응 특성을 살펴보았다. 특히, 본 연구에서는 실험으로부터 측정하기 어려운 촉매반응기 내부의 NH_3 흡·탈착 경향 및 분포를 수치모사를 통해 예측하였고, 이를 통해 반응기의 설계 관점을 제시하였다. 본 연구를 통해 얻은 결론을 요약하면 다음과 같다.

1) 촉매표면온도가 증가할수록 표면에 흡착되는 NH_3의 양이 감소하는데, 이는 표면온도가 증가할수록 상대적으로 안정한 흡착상의 NH_3가 기체상으로 더 많이 탈출해 나오기 때문이다.
2) 촉매표면온도가 증가할수록 표면은 NH_3의 흡착에 대한 포화상태에 더 빨리 도달한다. 이는 온도가 증가할수록 흡·탈착 평형점에서의 NH_3 표면점유율이 감소하기 때문이며, V_2O_5/TiO_2 촉매에 대한 NH_3 흡·탈착 모사 결과, 표면온도가 623 K일 때 동일한 면적의 촉매표면이 흡착할 수 있는 NH_3의 양은 493 K에 비해 50 % 정도로 나타났다.
3) 배기가스의 유입속도가 증가할수록 촉매표면은 NH_3 흡착에 대해 더 빨리 포화상태에 이른다. 또한, NH_3의 유입이 중단되면 표면에 흡착되어 있던 NH_3의 탈착이 일어나는데, 속도가 빠를수록 탈착 또한 급격하게 일어난다.
4) SCR 반응이 있는 경우, 반응기 내부 축방향으로 NH_3 흡착이 불균일하게 진행된다. 특히, 촉매온도가 증가하면 SCR 반응이 활발해져서 NO 전환률 및 NH_3 소비율이 증가하며 출구로 갈수록 NH_3 표면점유율은 확연히 감소한다.

후 기

본 연구는 환경부 Eco-STAR project(무·저공해 자동차사업단)의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

References

1) Dieselnet Technology Guide, Selective Catalytic Reduction, http://www. Dieselnet.com, 2002.
2) Dieselnet Technology Guide, Catalyst Fundamentals, http://www. Dieselnet.com, 2000.
3) R. Wanker, H. Granter, G. Bachler, G. Rabenstein, A. Ennemoser, R. Tatschl and M. Bollig, "New Physical and Chemical Models for the CFD Simulation of Exhaust Gas Lines: A Generic Approach," SAE 2002-01-0066, 2002.
4) R. M. Heck, J. M. Chen and B. K. Speronello, "Operating Characteristics and Commercial Operating Experience with High Temperature SCR NOX Catalyst," Env. Prog., Vol.13, pp.221-225, 1994.
5) T. Z. Srnak, J. A. Dumesic, B. S. Clausen, E. Törnqvist and N. Y. Topsøe, "Temperature-Programmed Desorption/Reaction and in Situ Spectroscopic Studies of Vanadia/Titania for Catalytic Reduction of Nitric Oxide," J. Catal., Vol.135, pp.246-262, 1992.
6) N. Y. Topsøe, J. A. Dumesic and H. Topsøe, "Vanadia-Titania Catalysts for Selective Catalytic Reduction of Nitric Oxide by Ammonia:II. Studies of Active Sites and Formulation of

Catalytic Cycles," J. Catal., Vol.151, pp.241-252, 1995.
7) M. Kaviany, Principles of Heat Transfer in Porous Media, 2nd Edition, Springer-Verlag New York, 1995.
8) L. Lietti, I. Nova, S. Camurri, E. Tronconi and P. Forzatti, "Dynamics of the SCR-DeNOX Reaction by the Transient-Response Method," AIChE J., Vol.43, pp.2559-2570, 1997.
9) L. Lietti, P. Forzatti, G. Ramis, G. Busca and F. Bregani, "Potassium Doping of Vanadia/ Titania de-NOXing Catalysts: Surface Characterisation and Reactivity Study," Appl. Catal. B: Env., Vol.3, pp.13-35, 1993.
10) L. Lietti and P. Forzatti, "Temperature Programmed Desorption/Reaction of Ammonia over V_2O_5/TiO_2 De-NOXing Catalysts," J. Catal., Vol.147, pp.241-249, 1994.
11) N. Y. Topsøe, "Characterization of the Nature of Surface Sites on Vanadia-Titania Catalysts by FTIR," J. Catal., Vol.128, pp.499-511, 1991.
12) G. Ramis, G. Busca, C. Cristiani, L. Lietti, P. Forzatti and F. Bregani, "Characterization of Tungsta-Titania Catalysts," Langmuir, Vol.8, pp.1744-1749, 1992.
13) M. Y. Kim, "Performance Prediction of SCR-DeNOx System for Reduction of Diesel Engine NOx Emission," Transactions of KSAE, Vol.11, pp.71- 76, 2003.
14) J. C. Tannehill, D. A. Anderson and R. H. Pletcher, Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, 2nd Edition, Taylor and Francis, Philadelphia, 1997.