

## 활성탄에서의 o-DCB (ortho-Dichlorobenzene) 흡착에 관한 분자모사

손혜정, 임영일\*, 남경수<sup>1</sup>, 유경선<sup>1</sup>  
한경대학교; <sup>1</sup>광운대학교  
(limyi@hknu.ac.kr\*)

POPs (Persistent Organic Pollutants) 물질 중 다이옥신류, PCBs (Polychlorinated Biphenyls), HCB (Hexachlorobenzene) 와 같이 비의도적으로 발생하는 물질을 UPOPs (Unintentionally produced Persistent Organic Pollutants) 라고 한다. UPOPs 물질 분리에 있어 흡착이 효과적인 공정으로 검토되고 있다. 하지만 UPOPs 물질은 미량으로 독성이 매우 강하여 일반적인 흡착실험방법은 용이하지 않다.

본 연구는 분자모사를 통하여 활성탄에서 o-DCB (ortho-Dichlorobenzene) 의 흡착평형식을 예측한다. 실험으로 얻은 표면작용기의 함량을 고려하여 활성탄의 기본구조를 예측한 후 (Materials Studio 4.3, Accelrys software Inc.) 여러 force field 를 이용하여 구조를 최적화 시키고, 최적화 시킨 구조의 공극률, 비표면적, pore size 등의 물성을 실험값과 비교한다. 최적화 된 구조에 통계 열역학적 방법인 GCMC (Grand Canonical Monte Carlo) 방법을 이용하여 온도에 따른 o-DCB 의 흡착평형식을 예측하고, 평형상태의 흡착열을 계산한다. 활성탄에서 o-DCB 의 확산계수는 NVT-ensemble (Number, Volume and Temperature ensemble) 방법으로 계산되고, 결과는 시간에 대한 MSD (Mean Square Displacement) 로 나타난다.

이렇게 분자모사에서 구한 흡착평형식과 확산계수는 실험값과 비교되며, 유체역학모사 및 공정모사에서 유용하게 사용될 것이다.