

## 활성탄에서의 분자모사를 통한 2,3,7,8-TCDD (tetrachlorodibenzo-p-dioxin) 등온흡착 상수 및 확산계수의 예측

이오성, 임영일\*, 손혜정  
한경대학교  
(limyi@hknu.ac.kr\*)

활성탄에서 다이옥신과 유사구조를 갖는 o-DCB (ortho-Dichlorobenzene) 의 등온흡착상수를 실험을 통하여 구하였고, Materials Studio 4.4 (Accelrys software Inc., USA) 를 이용하여 분자모사를 수행하였다. 먼저 활성탄 기본구조를 설계한 후, COMPASS (condensed-phase optimized molecular potentials for atomistic simulation studies) force field 를 이용하여 활성탄 구조를 최적화하였다. 최적화된 활성탄 분자구조에서 보여주는 공극률, 비표면적, 및 입자밀도의 모사결과는 실험값과 비교되었을 때 잘 일치하였다. o-DCB 의 등온흡착상수값도 실험값과 모사값이 3% 오차안에서 일치하였다. 이 결과를 바탕으로 동일한 활성탄 위에서 다이옥신의 일종인 2,3,7,8-TCDD의 등온흡착량 및 확산계수를 예측 하였다. 활성탄에 흡착된 2,3,7,8-TCDD 의 흡착량을 예측하기 위해 통계 열역학적 방법인 GCMC (grand canonical Monte Carlo) 기법을 사용하였고, 확산계수는 NVT (number, volume and temperature)-ensemble 을 이용하여 시간에 따른 MDS (mean square displacement)의 기울기로 구하였다. 이러한 분자모사기법을 이용하여 맹독성으로 인해 흡착 실험이 용이하지 않은 활성탄 위에서 다이옥신의 흡착특성을 예측하였다.