

# Surface Complexation Model을 이용한 음이온 중금속(As, Se) 흡착반응의 모델화 연구

신용일<sup>\*</sup>, 이성홍<sup>1</sup>, 김정배, 박상원

계명대학교 환경과학과

<sup>1</sup>김천과학대학 환경관리과

## 1. 서론

흡착현상을 이해하기 위한 노력으로 제일 먼저 시도된 것이 분배계수( $K_d$ )의 결정이었다. 이후 흡착 등온선의 유형에 대한 고찰을 통하여 흡착현상을 설명하였다. 그러나 이들 경험적 접근방식은 Solid/Gas상간에 일어나는 흡착기구는 설명할 수 있었으나, 수질관리 등에 있어서 중요한 Solid/Liquid간의 계면에서 일어나는 흡착현상을 모사하거나 예측하는데 많은 제약이 있었다. 그 이유는 Solid/Liquid간의 흡착현상이란 고체 또는 고체표면의 물리/화학적 특성과 수용액 내의 흡착질의 용액론적 특성이 고려되어야 하는데, 종래의 경험적 방식은 단순히 특정조건에서 수용액상의 잔존농도와 고체상에 흡착된 농도를 실험적으로 결정하였다. 따라서 관련조건이 바뀔때마다  $K_d$  또는 흡착등온계수 (Isothermal Coefficient)가 달라지므로 보다 광범위한 지화학적 또는 수처리 조건에서의 응용이 가능하지 못하였다.

이러한 문제점을 보완하여 선진 외국에서는 특정조건에서의 실험결과로 관련인자를 결정하여 흡착현상을 모사하고 또한 다른 조건에서의 흡착결과를 예측할 수 있는 소위 SCM(Surface Complexation Model)이 최근 많은 주목을 받고 있으며, 흡착현상의 예측을 통한 실험시간 및 오차율을 단축할 수 있어 관련 분야에서 이 접근방식을 많이 채택하고 있다.

따라서 본 연구에서는 표면특성 parameter 중 surface acidity를 결정함에 있어서 기존의 titration 방법이 아닌 zeta potential data를 이용한 새로운 접근법을 제시하였고, Surface Complexation Model 중 최근에 가장 많이 이용되고 있는 Triple Layer Model을 바탕으로 흡착실험 data와 표면특성 data로부터 결정된 parameter와 지화학적 code인 HydraQL을 이용하여 흡착현상의 모사 및 정량적 예측을 수행하였다.

## 2. 실험내용 및 방법

### 2.1 실험내용

SCM Modeling에 사용된 흡착제는 Fe로 코팅된 Zeolite, Sea sand,

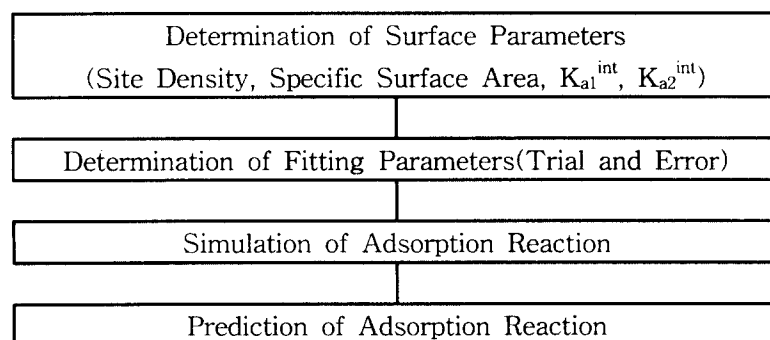
Anthracite를 사용하였으며, 각각의 농도는 5g/l 를 사용하였다. 흡착질로는 음이온 중금속 2종인 As(V)와 Se(IV)를 사용하였으며, 그 농도는 각각  $10^{-5}$ M로 하였다. Zeta Potential 측정에 사용된 흡착질의 양은 0.2g/l, 이온강도(Ionic Strength)는 0.01M로 하였다.

회분식 흡착 데이터 및 흡착제의 표면특성으로부터 얻어진 Parameters(Site Density( $N_s$ ), Specific Surface Area,  $K_{a1}^{int}$ )와 시행착오법(Trial and Error)으로부터 구해진 Fitting Parameters를 지화학평형 code인 HYDRAQL(a program for the computation of chemical equilibrium composition of aqueous batch systems including surface complexation modeling of ion adsorption)의 input data로 하여 흡착현상의 모사와 흡착제의 농도에 따른 흡착결과를 예측하였다.

본 연구에 사용된 실험조건과 SCM Modeling 방법은 아래의 Table 1과 Fig. 1에 나타내었다.

**Table 1. Experimental Conditions used for SCM Modeling**

구 분	실 험 조 건
흡착제의 종류	Fe-impregnated Zeolite, Fe-impregnated Sea sand, Fe-impregnated Anthracite
흡착제의 양	5 g/L
이온강도 (Ionic Strength)	0.01M
흡착질의 농도 As(V), Se(IV)	$10^{-5}$ M
Computer code	HYDRAQL



**Fig. 1 SCM Modeling Strategy**

### 3. 결과 및 고찰

특정조건에서의 실험결과로 관련인자를 결정하고, 결정된 인자를 SCM(Surface Complexation Model)에 적용시켜 흡착현상의 모사 및 예측을 행한 결과 다음의 4가지 결론을 얻을 수 있었다.

- SCM(surface complexation model) Modeling의 Fitting을 결정하는 Fitting Parameter를 결정할 수 있었다.
- 기존의 양성자 이전반응의 평형상수를 결정하는 방법(titration data로부터 구하는 방법)이 아닌 흡착제의 Zeta Potential값을 바탕으로 하여 구한 값으로도 흡착결과를 잘 모사할 수 있었다.
- 각 Fitting Parameter 값의 변화에 따라 SCM(surface complexation model) Modeling에 차이가 있었으며, 몇몇 Fitting Parameter는 Trial and Error의 방법으로 조합한 결과 최적 Fitting Parameter를 결정할 수 있었다.
- 회분식 흡착실험 결과를 SCM(surface complexation model)으로 모사한 결과 전 pH 구간에서 실험 결과치와 모사치가 좋은 일치률 보임을 알 수 있었다.

### 4. 참고문헌

- 이성홍, 꽃게껍질에 의한 중금속의 흡착특성에 관한 연구, 효성여자대학교 박사학위논문
- Armando Herbelin and John C. Westall, FITEQL : A Computer Program for the Determination of Chemical Equilibrium Constants from Experimental Data, User's Guide version 3.2, Oregon State University, 1996
- Baxs, C.F. ; Mesmer, R.E., The Hydrolysis of Cations, John Wiley & Sons, N.Y.,: 1976, 35-39, 267-365
- Benjamin, M.M., Leckie, J.O., Multiple-Site Adsorption of Cd, Cu, Zn, and Pb on Amorphous Iron Oxyhydroxide, J. Colloid Interface Sci., 1981, 79(1) : 209-221
- Charalambos Pangelis and James O. Leckie, Adsorption of Trace Elements from Coal-Fired Power Plant Effluents on Iron Oxyhydroxide : Experimental and Modeling Studies, Technical Report No. 307, Stanford University, 1988
- Charalambos Pangelis, Kim F. Hayes, and James O. Leckie,

HYDRAQL : A Program for the Computation of Chemical Equilibrium Composition of Aqueous Batch Systems Including Surface-Complexation Modeling of Ion Adsorption at the Oxide/Solution Interface, Technical Report No. 306, Stanford University, 1988

- Davis, J.A. ; James, R.O. ; Leckie J.O., J. Colloid Interface Sci., 1978, 63, 480
- Davis, J.A., James, R.O., Leckie, J.O., Surface Ionization and Complexation at the Oxide/Water Interface : I. Computation of Electrical Double Layer Properties in Simple Electrolytes, J. Colloid Interface Sci., 1978, 63(3) : 480-499