

PC13) Morpho를 이용한 톨루엔/NO_x 광화학 반응 실험결과의 해석

Photochemical Reaction Simulation of Toluene/NO_x Mixture Using the Morpho Model

이영미 · 이승복 · 배귀남 · 문길주

한국과학기술연구원 대기자원연구센터

1. 서 론

광화학 스모그 현상을 재현하기 위한 메카니즘은 약 20,000개의 반응식과 수천개의 종이 포함되어야 하므로 자세한 반응 메카니즘을 포함하는 데는 한계가 있다(Dodge, 2000). 최근에 morphecule이라 부르는 대리종(surrogates)을 사용하는 방법(morphecule approach)이 개발되었다. 이 메카니즘은 반응 속도, 생성율, 생성물의 형태를 포함하여 lumped surrogates와 관련된 인자들이 모사하는 전체 시간 중 각 t시간 동안 일정하고 그 시간이후에는 인자들이 변화한다고 가정한다. 또한 특성이 비슷한 유기 화합물의 다양한 그룹을 표현할 때 morphecule이라 부르는 특정 화학종들을 사용한다. Morphecule은 실제 존재하는 화학종은 아니지만 메카니즘을 Air quality simulation models에서 모사할 때 농도를 얻게 된다는 점에서 축약 메카니즘내 lumped 화학종 역할을 한다. Morphecule은 allomorphs로 구성되는데 이는 매우 비슷한 특성을 가지는 각 유기 화학종 또는 유기화합물의 그룹이 될 수 있다. North Carolina 대학에서 개발된 morphecule은 상대적으로 적은 수의 화학종에 대한 화학식이 풀리지만 많은 수의 반응물, 중간 생성물, 최종 생성물에 대한 정보를 얻을 수 있다는 것이 장점이다(Gery, 1999). 본 연구에서는 톨루엔/NO_x 광화학 반응의 실험결과를 해석하기 위하여 Morpho를 이용하여 모사하였다.

2. 모 사

Morpho 모사를 하는데 필요한 변수로는 NO₂ 광분해 상수와 온습도 조건이며 NO₂ 광분해 상수는 측정된 값을 사용하였는데 실험조건에 따라 0.32~1.10min⁻¹의 범위였다. 실험에 사용된 스모그 챔버(부피: 6.8m³, 재질: Teflon film, 백의 표면적/부피비: 3.2m⁻¹)는 온/습도 조절이 가능한 클린룸 내에 설치하였다. 스모그 챔버의 사양, 광원 특성 및 구성요소 등에 관한 자세한 내용은 배귀남 등(2003)에서 자세히 기술되어 있다. 톨루엔/NO_x 혼합물의 광화학 반응을 연구하기 위해 입자와 가스상 오염물질을 제거한 순수 공기 공급 장치를 통과한 순수 공기를 챔버내부로 주입하였다. 여기에 톨루엔과 NO_x를 주입하여 1시간 동안 평형상태에 도달할 수 있도록 한 후 초기농도를 측정했다. 평형상태에 도달하면 광원을 켜진 상태에서 3~6시간 동안 각각 입자상 물질과 가스상 물질을 연속적으로 측정했다. 이때 스모그 챔버내 압력, 가스상 물질(Thermo Environmental Instruments Inc., CO, NO-NO₂-NO_x, SO₂, O₃ analyzers), 톨루엔(GC/FID, HP 6890)을 측정하였다.

4. 결과 및 고찰

광원을 켜진 시간에 따른 가스상 물질의 농도 변화에 대한 실험결과와 모사결과를 그림 1에 나타냈다. 그림에서 점선은 모사결과이고 실선은 실험결과이다. 실험결과와 NO₂농도는 HONO, HNO₃ 등을 포함하는 값이다. 그림(a)는 초기 톨루엔 농도 557ppb, NO_x 200ppb로 초기 톨루엔/NO_x 농도비가 약 20인 경우로 이때 사용된 NO₂ 광분해 상수는 0.32min⁻¹ 이고, 그림(b)는 초기 톨루엔 농도 944ppb, NO_x 683ppb로 초기 톨루엔/NO_x 농도비가 약 10인 경우로 이때 사용된 NO₂ 광분해 상수는 1.1min⁻¹ 이다. Morpho를 이용한 모사 결과 화학종들의 상대적 오름과 내림 즉, NO 농도 감소와 NO₂ 농도의 증가, O₃의 최대점 도달, 톨루엔 농도 감소 등의 현상에 대한 경향을 잘 재현하고 있었다.

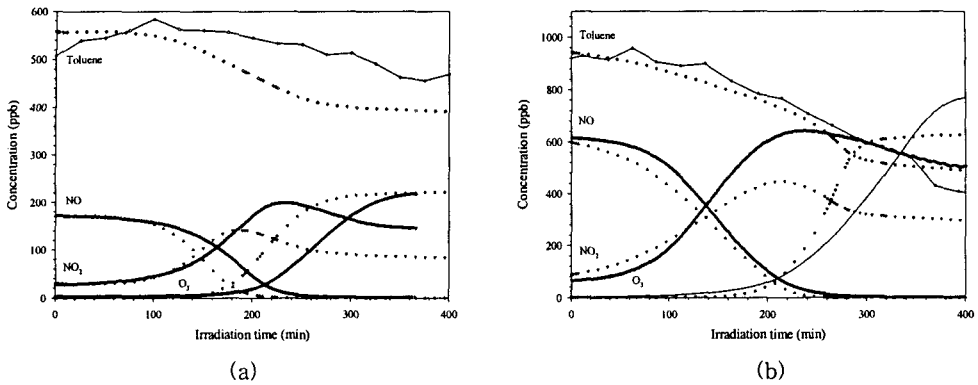


Fig. 1. NO, NO₂, O₃ and Toluene concentration in simulation and experiment.

사 사

본 연구는 과학기술부 국가지정연구실사업 (과제번호: M1-0204-00-0049)의 지원으로 수행되었으며, 이에 관계자 여러분께 감사리를 드린다.

참 고 문 헌

- 배귀남, 김민철, 이승복, 송기범, 진현철, 문길주 (2003) 실내 스모그 챔버의 설계 및 성능평가, *한국대기 환경학회*, 16(4), 437-449.
- Dodge, M. C. (2000) Chemical Oxidant Mechanisms for Air Quality Modeling: critical review, *Environ. Sci. and Technol.*, 34, 2103-2130.
- Gery, M. (1999) Designing Morphecule Mechanisms, EPA 68D50129.
- Na, K. and Y.P. Kim (2001) Seasonal characteristics of ambient volatile organic compounds in Seoul, Korea. *Atmospheric Environment*, 35(15), 2603-2614.