

표면 흡착 모델을 이용한 우라늄의 흡착 모델링

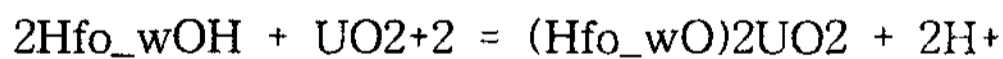
최병영, 고용권, 김건영, 유시원, 최종원

한국원자력 연구원, 대전광역시 유성구 덕진동 150-1

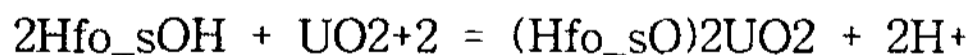
choiby@kaeri.re.kr

우라늄은 인간 및 생태계에 유해한 영향을 미치는 독성 원소로 알려져 있다. 따라서 우라늄의 용질이동(transport)과 운명(fate)은 핵폐기물 매립지의 안전성 평가 및 관리 측면에서 중요한 관심 대상이다. 우라늄의 용질이동은 지하수의 화학조건과 함께 화합물형성, 흡착, 침전, 산화/환원반응에 매우 큰 영향을 받는 것으로 알려져 있다. 우라늄은 환원환경에서는 U(IV) 형태로 존재하며 이동성이 적은 불용성 고체상으로 침전하는 반면, 산화환경에서는 U(VI) 형태로 존재하며 U(VI)는 주로 용해성이 큰 수산화 화합물(hydroxide complex) 및 탄산염 화합물(carbonate complex)을 형성함으로써 우라늄의 용해도(solubility)와 이동도(mobility)를 증가시킨다. 하지만 지질환경에서 광물 표면과 U(VI)의 흡착반응은 우라늄의 용질이동을 지배하는, 즉 우라늄의 이동을 지연(retardation) 시키는 가장 중요한 작용으로 알려져 있다. 이러한 흡착 반응은 지하수의 지구화학 조건(특히, pH와 이산화탄소 부분압(pCO₂)),에 매우 민감한 것으로 알려져 있다. 하지만 현재까지 대부분의 반응성용질이동(reactive transport) 모델에서는 흡착에 의한 핵종의 지연을 설명하기 위해 분배계수(constant K_d)를 사용하는 것으로 보고된다. 이러한 K_d 모델을 사용함으로써 발생하는 불확실성(uncertainty)은 흡착에 가장 큰 영향을 주는 지하수의 지구화학 조건이 시간적/공간적으로 변화하는 것을 반영하지 못하는 것에 기인하는 것으로 보고된다. 하지만 K_d 모델과는 대조적으로 표면 흡착 모델은 다양한 지하수의 화학조건에서 기인하는 흡착 반응을 설명할 수 있는 것으로 보고된다. 따라서 본 연구에서는 표면 흡착 모델을 통해 다양한 지하수 화학조건(pH, pCO₂, pe)에서 우라늄의 흡착 반응을 모델링하였으며 추후 용질이동모델을 통해 우라늄의 거동을 예측하는데 기본 자료를 제공하고자 하였다. 본 연구에서는 U(VI)의 흡착과 이동을 조절하는 중요 광물로 알려진 철산화물(iron oxide)을 대상으로 하였으며, 철산화물에 의한 U(VI)의 흡착 모델은 우라늄의 이동을 잘 설명하는 것으로 보고된다.

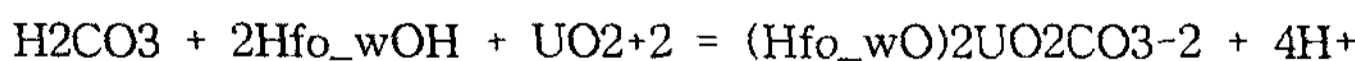
본 모델에서는 PHREEQC2.0을 사용하였으며 우라늄의 흡착 반응은 잘 알려진 다음과 같은 식을 사용하였다. 그 외의 모든 열역학자료는 MINTEQ의 자료를 활용하였다.



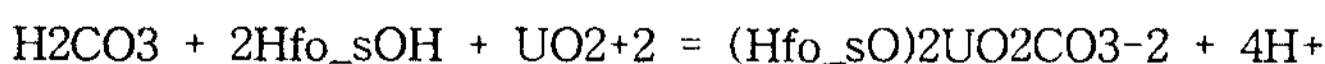
$$\log_k \quad -6.28$$



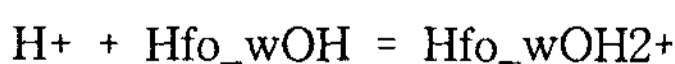
$$\log_k \quad -2.57$$



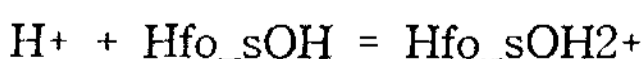
$$\log_k \quad -16.43$$



$$\log_k \quad -12.34$$



$$\log_k \quad 6.51$$



$$\log_k \quad 6.51$$

