

오존에 의한 물소독과정의 이론적고찰

최 은 화

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《자연과학부문 교원, 연구사들은 수학, 물리학, 생물학을 비롯한 기초과학에 대한 연구를 심화시키고 사회주의경제건설과 인민생활향상에서 나서는 과학기술적문제들을 풀기 위한 연구사업을 적극 벌리며 여러 분야의 첨단과학기술을 연구도입하는데 힘을 넣어야 합니다.》(《김정일선집》 증보판 제18권 457페이지)

오존에 의한 음료수살균에서 중요한 문제는 오존으로부터 물에로의 질량흐름량을 늘이는것이다.[1, 3] 이것은 오존기포의 크기를 보다 작게 하여 오존기포와 물과의 접촉면적을 최대로 증가시킴으로써 해결할수 있다. 류체흐름이 란류흐름으로 이행하면 오존기포의 크기가 수 μm 정도로 되면서 오존으로부터 물에로의 질량수송이 제일 최대로 될수 있다.[2] 그러나 미세화된 오존분자와 물과의 반응효율을 높이지 않고서는 아무리 오존기포의 크기를 조절한다 하여도 오존으로부터 물에로의 질량흐름을 높일수 없다.

우리는 오존에 의한 음료수의 살균효과를 높이기 위하여 오존에 의한 물소독과정을 이론적으로 고찰하였다.

계 산 방 법

오존분자와 물분자사이의 반응과정을 이론적으로 고찰하기 위하여 물질모의프로그램인 Material's Studio 6.0(MS)을 리용하여 $\text{O}_3\text{--H}_2\text{O}$ 계의 구조최량화를 진행하고 에너지를 계산하였다.

구조최량화 물분자와 오존분자에 대하여 각각 구조최량화를 진행하고 여기에 기초하여 $\text{O}_3\text{--H}_2\text{O}$ 계의 구조최량화를 진행하였다. 구조최량화에 MS의 Dmol3모듈을 리용하였다. 이때 Task는 Geometry Optimization으로, Quality는 Medium으로, Functional은 GGA/BLYP로 설정하였다. Electronic설정에서 SCF에서 use smearing을 활성화하고 Frequency를 계산속성으로 설정하였다.

자유에너גיע산 DFT계산에 리용되는 교환호상작용함수로는 GGA를 선택하고 Frequency를 계산속성으로 설정하였다.

이행상태탐색 Task에서 TS Optimization을 선택한 다음 Tools/Reaction Preview지령을 리용하여 가능한 이행상태를 찾아낸다.

결과 및 분석

최량화된 계산결과 물분자의 H—O결합길이는 0.959Å이고 H—O—H결합각은 103.85°이다. 그리고 오존분자의 O—O결합길이는 1.25, 1.28Å이며 O—O—O결합각은 116.83°이다.

다음으로 최량화된 O_3-H_2O 계의 구조는 물분자의 O원자와 오존분자의 O원자사이 거리가 2.874\AA 으로서 오존분자와 물분자에서 이웃한 원자사이의 거리에 비하여 2~3배 더 크다. 즉 오존분자와 물분자내부의 원자들사이의 결합력에 비하여 오존분자와 물분자사이의 결합력이 약하다는것을 보여준다.

자유에네르기계산결과 O_3-H_2O 계의 반응에네르기는 -301.235au 이다.

이때 가능한 이행상태는 15개이며 이에 기초하여 세가지 반응경로가 얻어진다.(그림)

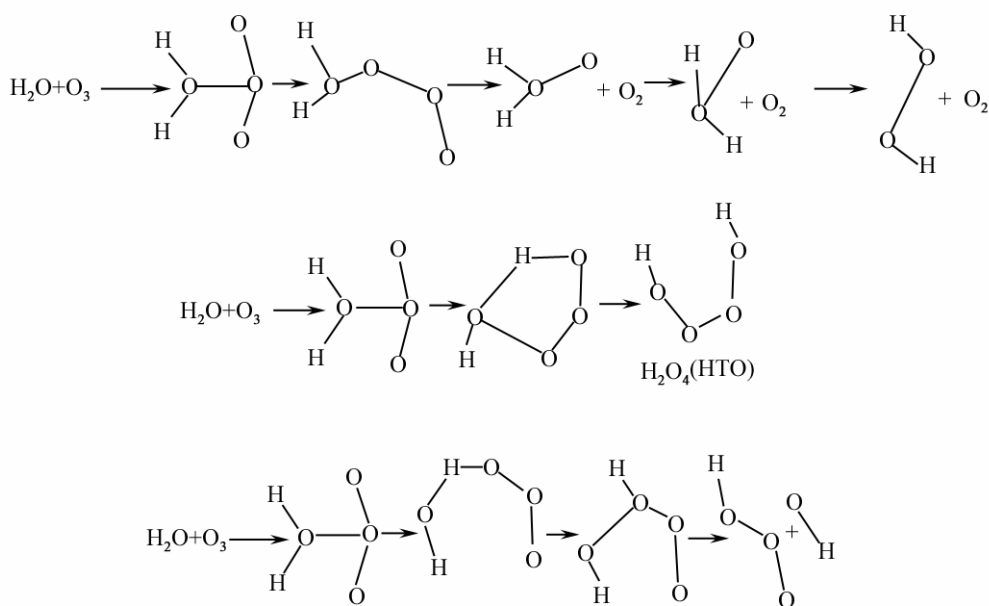


그림. 가능한 반응경로

3개 반응의 자유에네르기는 각각 354.972 , 207.305 , 156.412kJ/mol 이다. 따라서 제일 가능한 반응경로는 세번째 경우라는것을 알수 있다.

맺는 말

O_3-H_2O 분자계의 구조최량화를 진행하여 제일 안정한 반응은 자유에네르기가 156.412kJ/mol 인 HO_3+OH 가 생기는 반응이라는것을 밝혔다. 따라서 오존에 의한 물의 소독에서 기본은 OH라디칼이다.

참고 문헌

- [1] Y. Hsu et al.; Ind. Eng. Chem. Res., **41**, 120, 2002.
- [2] M. Ponasse; Wat. Res., **32**, 8, 2498, 1998.
- [3] Feng Zhang et al.; Separation and Purification Technology, **114**, 126, 2013.

Theoretical Study of Water Disinfection Process Using Ozone

Choe Un Hwa

According to calculation of geometry optimization, energy and reaction path for O_3-H_2O , the most stable reaction path is HO_3+OH . Its free energy is 156.412kJ/mol. So the key in water sterilization using ozone is OH radical.

Key words: ozone, mass transfer, water purification