

CDI 기법을 이용한 담수화 과정의 분자동역학적 연구

박정민, 윤도영*
광운대학교 화학공학과
(yoondy@kw.ac.kr*)

CDI(Capacitive Deionization)는 두 개의 다공성 전극에 전하를 가해 염과 미네랄을 제거하는 잘 알려져 있는 기술로서, 양극에는 음이온이, 음극에는 양이온이 다공성 전극과 용액 사이에 형성된 전기적 이중층으로 이동하게 되어 용액 내의 불순물을 분리할 수 있다. 따라서 CDI기법은 이온 교환법이나 역삼투압법에 비해 에너지 효율이 좋을 뿐만 아니라 2차 오염이 발생하지 않는다는 장점이 있다. 본 연구에서는 NaCl용액을 해수로 가정하여 분자동역학적 모델링에 기반하여, 담수화 과정에 대한 모델링을 수행하였다. 병렬연산 모델링으로 슈퍼컴에서 LAMMPS를 활용하였으며, 전극으로는 그래핀(Graphene)을 사용하였다. 전극으로 사용된 그래핀은 탄소 원자가 육각형 격자로 정렬되어 있는 2차원 탄소 구조를 가지며, 이때 그래핀은 특정한 기공을 가지고 있고, 매우 높은 전자 이동성을 가지고 있어 전기적 성질이 우수하다. 본 연구를 통해 일정한 전하가 가해진 계 내에서 NaCl용액의 농도에 따른 담수화 과정을 분자동역학적 방법으로 효과적으로 시뮬레이션할 수 있었다.

(본 연구는 Univ. of Texas at Austin 의 Prof. Hwang 의 도움을 받아서 진행되었음)