

## MATLAB을 이용한 다중전자 전극반응에 대한 순환전위법의 전산모델링

조하나, 윤도영\*

광운대학교

(yoondy@daisy.kw.ac.kr\*)

다중전자가 이동하는 반응계는 나노입자, 유기 금속 복합체 그리고 DNA와 같은 바이오분자의 전기화학반응에서 광범위하게 연구되고 있다. 다중전자 반응계는 단일전자가 이동하는 반응계에 비하여 복잡하고 연속적인 반응식이 적용되므로, 엄밀해의 적용이 제한적이다. 미세 신호에 대한 검지성능의 극대화과 다성분계의 전기화학반응의 설계 및 제어에 있어서 다중전자 반응계에 대한 해석은 필수적이다. 본 연구에서는 단일전자 이동이 연속적으로 일어나는 다중전자 이동 메커니즘에 대하여 순환전위법의 특성 곡선을 전산모사하였다. 이를 위하여, PC와 직접적인 인터페이스가 용이한 MATLAB 프로그램으로 구현하였다. 이론적 접근을 위하여 유한차분법을 도입하였으며, 반무한 확산 모델의 경계조건을 설정하였다. 전극 반응에 의한 전자 이동 및 이온의 확산만을 고려하여 CV 특성 및 동역학적 변수를 해석하였다. 기존의 실험치와 본 연구의 수치해를 비교하여 다중전자 전극반응에 대한 반무한 확산 모델의 유효성을 확인하였다.