

해수담수화용 축전식 탈염 공정의 설계와 CFD/MD 모델링에 관한 연구

이대현, 윤도영*

광운대학교 화학공학과

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

축전식탈염(CDI: Capacitive DeIonization) 기술은 높은 에너지 효율과 함께 이차적인 오염이 적어서 해수담수화에서 가장 많이 쓰고 있는 기술 중 하나이다. 또한 축전식탈염 공정을 최적화하기 위해, 벌크상태 그리고 원자상태 모델링이 시도되고 있다. 본 연구에서는 벌크상태의 모델링과 원자상태 모델링을 각각 수행하여 그 유효성을 조사하였다. 벌크모델링에서는 탈염공정의 이차원적 모델링에 대하여, 지배방정식으로는 전하방정식과 Nernst-Planck식을 연립하였고 전압과 NaCl의 농도를 달리하여 마이크로 채널에서 이온들이 움직이는 모습을 계산하였다. 또한 벌크계에 대한 해석결과를 LAMMPS를 통한 분자동역학 모델링 결과와 비교하였다. 그 결과, 두 모델링 유사한 경향을 보이고 있음을 확인 할 수 있었다. 특히, 낮은 전위에서 이온들의 움직임이 둔해지는 반면 높은 전위에서 이온들이 양극으로 빨리 이동하는 모습을 공통적으로 확인할 수 있었다.