

나피온®의 사슬길이와 수화채널 구조 및 수소이온전도와의 상관관계

강호성, 박치훈[†]

경남과학기술대학교 에너지공학과

(chpark@gntech.ac.kr[†])

요약

고분자 전해질 연료전지(PEMFC)에서 수소이온교환막은 수소이온을 통과시키는 역할을 하기 때문에 이온전도도를 향상시킬 수 있는 중요한 역할을 한다. 이러한 수소이온의 이동을 정확히 파악하기 위해 원자 및 분자 수준에서 수소이온의 움직임을 파악할 수 있는 분자동역학 전산모사 연구가 활발하게 진행되고 있다. 본 연구에서는 고분자막을 구성하고 있는 고분자 사슬의 길이를 일정 단위로 잘라서 수소이온이 이동할 수 있는 수화채널의 형성과 수소이온의 이동 및 이온전도도를 분석하였다. 분석 결과, 고분자 사슬의 길이가 가장 짧은 구조에서 사슬 및 작용기의 움직임이 커지는 것을 관찰할 수 있었다. 그러나 수화채널의 구조와 고분자 사슬의 길이와의 관계는 특별한 경향을 보이지 않았기 때문에 그 상관관계를 파악할 수 없었다. 또한 수소이온 전달 능력과 고분자 사슬 길이 간에도 상관관계가 보이지 않는 것으로 판단되었다. 이러한 수화채널 구조 및 그에 따른 수소이온 전달 능력의 변화는 오히려 고분자의 구조, 특히 술폰산기가 도입된 형태에 따른 영향이 훨씬 지배적인 것을 알 수 있었다.