

분자동역학을 통한 음이온 작용기 길이에 따른 음이온 교환막의 분리 특성 변화 분석

박치훈[†], 강호성, 최찬희, 이창현¹

경남과학기술대학교 에너지공학과; ¹단국대학교 에너지공학과

(chpark@gntech.ac.kr[†])

음이온 교환막은 최근 활발한 연구가 진행되고 있는 알칼리 연료전지 및 수전해 시스템의 핵심 구성 요소로서, 해당 시스템 내에서 OH⁻ 이온을 전달하는 전해질로서의 역할을 하고 있다. 이러한 음이온 교환막의 음이온 전도성 작용기로는 일반적으로 사차 암모늄기가 널리 사용되어지고 있는데, 기존의 양이온 교환막 연구에서 널리 연구된 것처럼, 이러한 전도성 작용기가 주쇄에 어떤 형태로 도입이 되어 있는지에 따라, 그 특성 및 성능이 달라질 수 있다. 본 연구에서는 이러한 작용기의 도입 형태에 따른 음이온 교환막의 특성 및 성능 변화를 관찰하기 위하여, 분자동역학 기술을 이용하여, 서로 다른 결사슬 구조를 갖는 두 종류의 음이온 전도성 이오노머 모델을 제작하고, 수화상태에서의 수화채널 모폴로지와 작용기 분포 및 이온전달 특성을 분석하였다. 이를 통하여 음이온 교환막에 있어서 이오노머 고분자 구조-특성 상관관계를 규명하고자 하였다.