다공성 물질 내의 전기삼투 흐름 모델링

박지희, 김성재, 윤병준
포항공과대학교 기계산업공학부 화학공학과

Modeling of Electroosmotic Flow through Porous Media

Jihee Park, Sung Jae Kim, and Byung Jun Yoon
Dept. of Chem. Eng. and Div. Mech. & Ind., POSTECH

서 론

전해질 용액과 전하를 띠고 있는 고체면이 접촉함으로써 고체면 근처에 전기이중층이 형성되고 이때 용액에 전기장을 걸어주게 되면 전기장과 평행한 방향으로 유동이 생기게 되며, 이를 전기삼투흐름이라 한다. 폐기물 슬러지의 탈수문제나 토양 내 오염물질 제거와 같은 다공성 물질을 이용한 시스템의 유동문제를 해석하기 위하여 이러한 전기삼투현상이 자주 응용된다.[1] 다공성 물질을 통한 전기삼투흐름을 해석하기 위해서는 물질을 평행한 미세실린더 다발로 모델링 하는 방법이 사용되어왔다. 다공성 물질 내 공극벽의 전하밀도는 전기삼투에 의해 ζ전위에 관계한다. 지금까지 미세실린더 내부의 전기삼투흐름에 대한 연구가 광범위하게 수행되었지만 단일 실린더로 모델링 하거나 균일한 벽면전위를 가진 실린더로 모델링 함으로써 실제의 다공성 물질 내 전기삼투흐름과는 다소 거리가 있었다.[2-3] 따라서 본 연구에서는 비균일한 공극벽의 전하밀도를 반영하기 위해 실린더 벽면 전위를 비균일하게 선정하여 전기삼투흐름을 해석하였다.

이 론

전기삼투는 외부 전기장을 이용하여 전하를 띤 벽면 근처의 전해질 용액이 유동을 갖게 되는 현상이다. 다공성 물질 내의 전기삼투흐름을 해석하기 위해 본 연구에서는 일반적인 실린더 형태와 환형 실린더에 θ방향으로 비균일한 벽면전위를 준 두 가지 경우로 모델링 하였다.

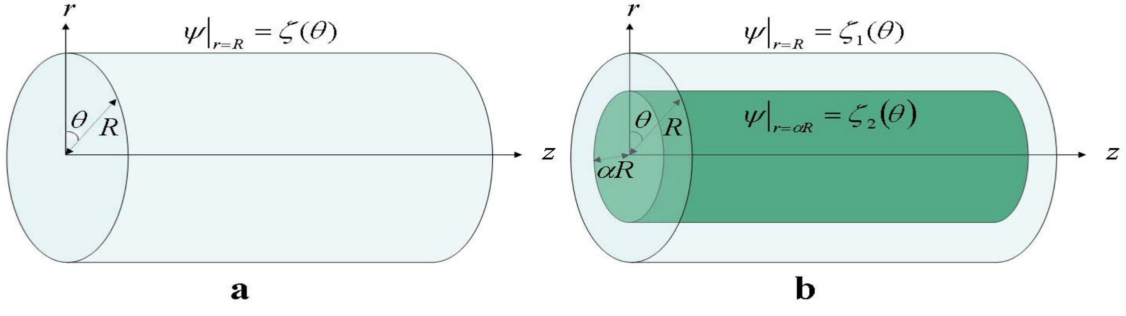


Figure 1. 다공성 물질 내의 전기삼투흐름의 모델링 개념도. (a) 실린더 형태, (b) 환형 실린더 형태.

먼저 Figure 1은 비균일한 벽면전위를 띤 일반적 실린더의 개념도이고, Figure 2는 안쪽 실린더와 바깥쪽 실린더에 θ방향으로 비균일한 벽면전위를 띤 환형 실린더의 개념도이다. 이러한 실린더의 양 끝단에 전기장(**E**)을 걸어주면 (a)의 반경 R인 실린더 내부의 전해질 용액과 (b)의 반경 αR의 안쪽 실린더와 반경 R인 바깥쪽 실린더 사이의 전해질 용액 내에 전기삼투 유동이 발생하게 된다. 이 유동의 속도장(**v**)은 시스템이 0에 가까운 Renolds 수를 갖기 때문에 다음과 같은 Stokes식과 연속방정식에 의해 지배된다.

$$\mathbf{0} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} - \varepsilon\kappa^2 \mathbf{E}\ \psi(r,\theta), \qquad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad \textbf{(1)}$$

여기서 p는 실린더 양끝의 압력차, μ는 전해질 용액의 점성도, ε는 전해질 용액의 유전율, κ는 Debye 길이의 역수이다. 그리고 ψ는 전기이중층에 의한 전위이며 Debye-Huckel 가정아래에서 다음에 선형화된 Poisson-Boltzmann 식에 의해 지배된다.

$$\nabla^2\psi(r,\theta) = \kappa^2\psi(r,\theta). \quad \textbf{(2)}$$

여기서 속도장 **v**가 전기장 E에 평행하다고 가정하면, v=$f(r,\theta)$E로 분리할 수 있다. 따라서 수식 (2)는 수식 (3)과 같다.

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} = \frac{\varepsilon\kappa^2}{\mu}\psi(r,\theta). \quad \textbf{(2)}$$

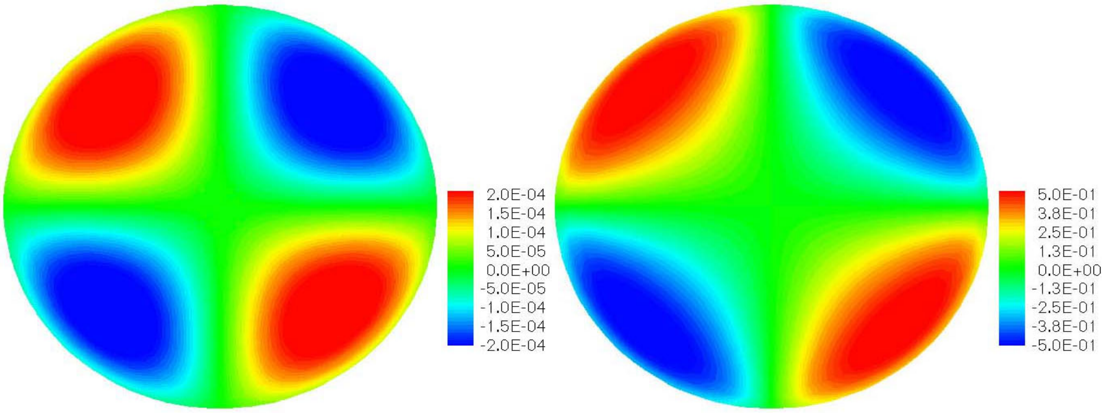
실린더 내부의 전기삼투 속도장을 구하려면 먼저 수식 (2)로 표현되는 전기적 전위(ψ)에 대한 해석해를 구해야 한다. 이를 위해 Figure 1의 (a)에서는 실린더 내벽의 전위 $\psi(R,\theta) = \zeta(\theta)$인 θ방향으로 비균일한 벽면전위를 경계조건으로 사용하고, (b)에서는 외부 실린더 내벽에서 $\psi(R,\theta) = \zeta_1(\theta)$, 내부 실린더 외벽에서 $\psi(\alpha R,\theta) = \zeta_2(\theta)$를 경계조건으로 사용하여 변수분리 법을 통하여 실린더 내부 전위를 구하였다.

다음으로 전해질 용액의 속도장은, 속도장 **v**가 r과 θ의 함수로서 전위 $\psi(r, \theta)$와 비슷한 형태를 갖는다고 가정하고 변수분리법을 이용하여 수식 (3)으로부터 v=$f(r,\theta)$E의 $f(r,\theta)$를 구하였다. 이때 사용한 경계조건으로는 실린더 벽면에서 안미끄러짐 조건을 주었으며 실린더 중심에서 속도장이 유한한 값을 갖는 것을 사용하였다. 여기서 안미끄러짐 조건을 사용한 이유는 미끄러짐 조건을 사용할 경우 전해질 용액의 종류가 실린더 위치에 따라 변할 경우 전기이중층등이 변화를 해석할 수 없다.

결과 및 토론

Figure 2는 Figure 1(a) 실린더에 벽면전위를 수식(4)와 같이 주고 축방향으로 전기장을 걸어주어 구한 정상상태 전기삼투 흐름이다. 이때 Figure 2의 (a)에서는 κ=0.1이고 (b)에서는 κ=10이다.

$$\begin{cases} 0<\theta\le\frac{\pi}{2},\ \pi<\theta\le\frac{3\pi}{2},\ \zeta(\theta)=\zeta_0 \\ \frac{\pi}{2}<\theta\le\pi,\ \frac{3\pi}{2}<\theta\le 2\pi,\ \zeta(\theta)=-\zeta_0 \end{cases} \tag{3}$$

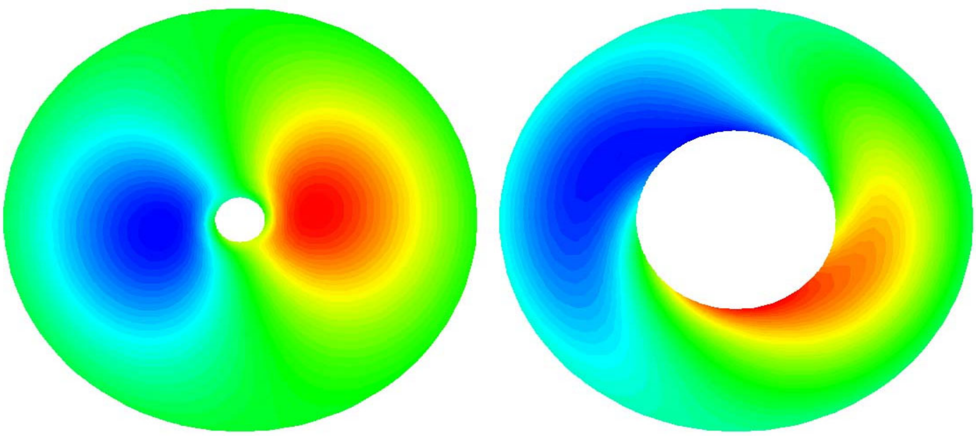


a **b**

Figure 2. 비균일 벽면조건 하에서 실린더 모델의 전기삼투 속도장. (a) κ=0.1, (b) κ=10.

위의 Figure 2에서 ζ_0으로 대전된 벽면에 정전기적 인력으로 벽면에 붙어 있는 음전하들이 축방향으로 걸어준 전기장에 의해 음의 방향으로 움직임으로써 용액은 음의 속도를 가지게 되며, $-\zeta_0$로 대전된 벽면부근의 양전하들에 의해 용액은 양의 방향으로 움직이게 된다. κ가 작은 Figure 2(a)에서의 전기이중층이 (b)보다 상대적으로 두꺼우므로 전해질 용액의 전기삼투 흐름은 (a)는 보다 천천히, (b)에서는 보다 빨리 발생한다.

Figure 3은 Figure 1의 (b) 환형 실린더에 대한 전해질 용액의 속도장 분포이다.



a **b**

Figure 3. 비균일 벽면조건 하에서 환형 실린더 모델의 전기삼투 속도장. (a) α=0.1, (b) α=0.4.

여기서는 전기이중층의 두께를 나타내는 κ를 0.1로 고정시키고 안쪽 실린더와 바깥쪽 실린더의 간격비(α)를 Figure 3의 (a)에서는 α=0.1로 두고 (b)에서는 α=0.4로 두었다. 이때 안쪽 실린더와 바깥쪽 실린더의 벽면전위 조건은 다음과 같다.

$$\begin{cases} 0<\theta \le \frac{\pi}{2},\ \pi<\theta \le \frac{3\pi}{2},\ \zeta_1(\theta)=\zeta_0 \\ \frac{\pi}{2}<\theta \le \pi,\ \frac{3\pi}{2}<\theta \le 2\pi,\ \zeta_1(\theta)=0 \end{cases} \qquad \begin{cases} 0<\theta \le \frac{\pi}{2},\ \pi<\theta \le \frac{3\pi}{2},\ \zeta_2(\theta)=0 \\ \frac{\pi}{2}<\theta \le \pi,\ \frac{3\pi}{2}<\theta \le 2\pi,\ \zeta_2(\theta)=\zeta_0 \end{cases} \tag{4}$$

Figure 3에서는 바깥쪽 실린더의 벽면 전위에 의해 발생되는 전기삼투 흐름이 안쪽 실린더에 의한 전기삼투 흐름에 의해 영향을 받는다. 따라서 바깥쪽 실린더의 ζ_0로 대전된 벽면부근의 속도장 분포와 안쪽 실린더의 ζ_0로 대전된 벽면부근의 속도장 분포가 서로 연결되어 나타난다. Figure 3의 (b)에서는 α=0.4로서 바깥쪽 실린더에 대한 안쪽 실린더의 반경이 (a)의 α=0.1에서보다 크므로 (b)에서 속도장 분포에 대한 안쪽 실린더의 영향보다 크게 나타난다.

Figure 2와 Figure 3에서 나타낸 κ와 α의 영향 이외에도 실린더와 환형 실린더의 비균일한 벽면 조건을 좀더 다양하게 변화시켜보고 축 방향으로도 벽면전위를 비균일하게 준다면 좀더 실제 다공성 물질 내의 전기삼투흐름에 가까운 유동을 묘사할 수 있을 것으로 기대되며 이를 추후에 논의해 보도록 하겠다.

감사의 글

본 연구는 한국과학재단 목적기초연구(과제 번호:R01-2001-00410)의 연구비 지원과 교육부의 BK21 프로그램의 연구비 지원에 의해 이루어졌으며, 이에 감사 드립니다.

참고문헌

1. Ronald F. Probstein, Physicochemical Hydrodynamics, A Wiley-Interscience Publication, New York, John Wiley & Sons(1994) Chapter 6.
2. Heng-Kwong Tsao, *J. of Colloid and Interface Science* 225(2000) 247.
3. 양승만, 박오옥, 미세구조유체 흐름의 원리, 대우학술총서, 민음사(1997) 7장.