

CDI 기법을 이용한 해수 담수화 과정의 분자동역학적 해석

박정민, 윤도영*

광운대학교

(yoondy@kw.ac.kr*)

CDI (Capacitive Deionization)는 두 개의 다공성 전극에 전하를 가해 염과 미네랄을 제거하는 기술로서, 용액과 양극 및 음극 사이에 형성된 전기적 이중층으로 각각 음이온과 양이온이 이동하게 되어 용액 내의 불순물을 분리하는 공정으로 잘 알려져 있다. 따라서 CDI 기법은 불순물을 분리할 수 있는 이온 교환법이나 역삼투압법에 비해 에너지 효율이 좋을 뿐만 아니라 2차적인 오염이 발생하지 않는다는 장점을 지니고 있다. 본 연구에서는 NaCl 수용액을 해수로 가정하고, 분자동역학에 기반하여, 해수 담수화 과정에 대한 모델링을 수행하였다. 슈퍼컴퓨터를 활용하여 분자동역학 시뮬레이터인 LAMMPS를 통해 병렬연산 모델링을 수행하였으며, 전극으로는 그래핀(Graphene)을 사용하였다. 전극으로 사용된 그래핀은 탄소 원자가 육각형 격자로 정렬되어 있는 2차원 탄소 구조를 가지며, 이때 그래핀은 특정한 기공을 가지고 있고, 전기적 성질이 우수하다. 본 연구를 통해 NaCl 수용액이 일정한 농도를 가해진 계 내에서 전극에 가해지는 전하에 따른 해수 담수화 과정을 분자동역학적 방법으로 효과적으로 모델링할 수 있었다.

본 연구는 지식경제부 및 정보통신연구진흥원의 대학 IT 연구센터 지원사업의 연구결과로 수행되었음 (NIPA-2011-C1090-1111-0002).