

표면 전하를 갖는 나노 채널에서의 이온 전달 특성에 대한 수치 해석

양윤아, 류원선^{1,*}

홍익대학교; ¹홍익대학교 화학공학과
(wsryoo@hongik.ac.kr*)

반경 10 nm 이하의 작은 기공을 갖는 나노기공막은 기공 표면에 전위를 띠게 함으로써 양이온 또는 음이온을 선택적으로 투과시키는 이온교환막으로 활용할 수 있어 국내외에서 활발히 연구되고 있다. Debye 길이에 비해 채널 반경이 커서 정전기적 영향이 미약한 마이크로 채널과 달리 나노 채널의 경우 채널의 구조 및 표면전하밀도와 채널 내 전해질의 농도가 이온 교환 성능에 주된 영향을 미친다. 본 연구에서는 채널 구조 및 전해질의 농도 변화에 따른 나노 채널에서의 이온 거동에 대한 전산 모사를 수행하였다. 나노 채널 내의 전위 및 농도 분포를 계산하기 위하여 Nernst-Planck 식과 Poisson 식을 수치적으로 풀이하였으며, 이를 토대로 Na⁺ 이온과 Cl⁻ 이온의 유효확산계수를 결정하였다. 그 결과로 채널 내 이온의 확산계수는 농도가 증가함에 따라 증가하는 것을 확인하였다.