

## CFD 플랫폼을 이용한 물질전달 율속의 전착 모델링

김광락\*, 정재후, 심준보, 백승우, 류필조<sup>1</sup>한국원자력연구원; <sup>1</sup>세명대학교

(krkim1@kaeri.re.kr\*)

전기화학 반응기의 전해거동을 예측하는 수치적 전산모델 개발이 전기화학실험, 시스템 설계 그리고 운전개선을 위한 효율적인 접근방법으로 중요하다. 전기화학반응기 성능에 대한 수학적 모델의 목적은 전해 성능을 제한하는 문제점을 파악하며, 셀의 스케일업 성능을 예측하는 것이다. 상용의 전산유체역학(CFD) 소프트웨어 패키지에 전기화학모델을 연계하면 가시적인 결과와 표현이 가능하다. 본 연구에서는 회전전극과 주변 전해질의 유동조건이 형성되는 모형에서 물리적 유동영역을 설정하고 격자화하여 전산유체역학 기반에서 물질전달과 전기화학 모델을 커플링하는 접근 방법을 제시하였다. CFD 전산 플랫폼에서 전해질의 전단응력수송(SST) 모델에 의한 유동현상과 이온 확산 및 대류를 통한 전류 플럭스를 Butler-Volmer 전극반응식과 연계하여 전기화학 모델을 커플링할 수 있었다. 정전류 인가조건의 전극계면에서 이온의 물질전달이 확산과 대류에 의해 제한되는 분극현상, 전해특성 및 전착거동을 모사하였다. 공간적으로 음극 계면에서 물질전달의 영향이 결합된 전류밀도 분포를 나타낼 수 있었다. 전극에서의 국부 전류밀도는 전착속도의 분포를 예측할 수 있는 것으로써, 이상적인 전해 조건은 물질전달의 제한을 최소화 하여 균일한 전착분포를 얻는 것이 바람직하다.