

## 하전된 나노 기공을 갖는 다공막의 이온 선택성 예측

유진수, 류원선<sup>†</sup>, 오병관  
홍익대학교

(wsryoo@hongik.ac.kr<sup>†</sup>)

전하를 띤 기공막은 정밀 화학제품 여과막, 단백질 분석 및 분리, 이차전지 분리막 등 다양한 분야에서 연구가 진행되고 있다. 기공의 크기가 수 nm로 작아지는 경우 이온을 선택적으로 통과시키는 이온교환막 특성을 지닌다. 본 연구에서는 상용 유한요소 수치해석 소프트웨어를 이용해 표면 전하를 띤 기공의 이온 선택성을 예측하였다. Poisson-Nernst-Planck식을 이용하여 농도 차이가 있는 두 용액 사이에 기공이 위치할 때의 단락 전류밀도와 개방 전위차, 이동수를 계산하였으며 표면 전하 밀도와 기공 지름, 기공 길이, 용액 농도, 하전된 표면의 경계조건을 변화시키며 차이를 비교하였다. 기공 길이가 늘어남에 따라 증가하는 개방 전위차는 기공이 작을수록 큰 값으로 수렴하여 Nernst식에 의한 농도 전위차에 근접하였다. 전하 밀도 40 mC/m<sup>2</sup>, 기공 지름 2.5 nm, 기공 길이 1 μm 이상의 경우 이동수 0.90의 수준을 보였다. 단락 전류밀도는 최대값을 갖는 기공 길이가 존재하며, 기공 지름이 늘어남에 따라 최대 전류 밀도를 갖는 기공 길이가 증가하는 경향을 보였다. 전하 밀도 40 mC/m<sup>2</sup>, 기공 지름 20 nm, 기공 길이 10 μm 에서 0.195 A/cm<sup>2</sup>으로 예측되었다.