

분자동역학 시뮬레이션(MD)를 이용한 과량의 물 상태 조건에서 이오노머의 특성연구

강호성, 박치훈<sup>1,†</sup>, 이창현<sup>2</sup>

경상국립대학교; <sup>1</sup>경남과학기술; <sup>2</sup>단국대

(chp@gnu.ac.kr<sup>†</sup>)

과도한 화석연료의 사용으로 전 세계적으로 지구온난화 및 기후 변화 문제가 나타나고 있다. 이러한 환경문제로 인해 기존의 화석연료를 대체할 수 있는 수소에너지가 차세대 에너지로 주목받고 있다. 수소를 제조하는 방법으로는, 천연가스를 개질하는 방식이 있지만 이산화탄소 등 다량의 온실가스 발생과 같은 환경문제가 있다. 반면에 물의 전기분해를 통해 수소를 생산하는 방식인 수전해 기술은 온실가스 배출 없이 친환경적으로 수소를 생산할 수 있기 때문에 이에 관련된 연구가 활발하게 진행되고 있다. 수전해 기술은 알칼라인 수전해 기술, 양이온 교환막(PEM) 수전해 기술, 고온수증기 수전해 기술, 등이 있다. 이러한 수전해 기술은 물이 지속적으로 공급되는 조건에서 작동이 되기 때문에, 과량의 물 상태 조건에서 이오노머가 구조적으로 안정성을 갖는 것이 중요하다. 본 연구에서는 분자동역학 전산모사 기술을 이용하여 과량의 물 상태 조건에서 알칼리 이오노머의 구조적 안정성을 살펴보고 이온 및 기체의 투과거동을 살펴보고자 하였으며, 이오노머의 분자구조 설계방향을 제시하고 하였다.