알칼라인 수전해 시스템에서 분자동력학(MD)을 이용한 과불소계 이오노머 바인더 연구

최찬희, 박치훈†, 이창현[1]
경남과학기술대학교; [1]단국대학교
(chpark@gntech.ac.kr†)

과도한 화석연료의 사용으로 전 세계적으로 지구온난화 및 기후 변화 문제가 대두 되고 있다. 기후 변화에 대응하기 위하여 화석 연료의 대체 에너지연구가 주목받고 있는데, 대체 에너지 중 수소에너지의 연구가 활발히 진행되고 있다. 이러한 연구 중에서 수전해 기술은 순수한 물로부터 전기 화학반응을 이용하여 수소를 생산하는 기술로써, 알칼라인 수전해, 고체 고분자 전해질 수전해, 고체 산화물을 이용한 전해기술이 있다. 알칼라인 수전해 기술은 저 전류 밀도에서 운전되기 때문에 시스템 전체적으로 크기 및 가격이 상승한다는 단점을 극복하기 위하여 과불소계 음이온 전도성 분리막을 이용하는 알칼라인 수전해 연구가 활발히 진행 되고 있다. 과불소계 음이온 전도성 분리막은 높은 기체 투과성, 낮은 열화학적 안정성을 보여주며 긍정적인 효과를 보여주었다. 본 연구에서는 분자동력학(MD) 전산모사를 사용하여 수전해 시스템에서 바인더 주변 환경을 고려한 높은 수화상태의 조건에서 분리막에 사용된 고분자 소재를 이오노머 바인더로 하여 바인더의 이온확산도에 따른 이온전도도, 고분자 주쇄의 구조에 따른 거동분석, 수소 및 산소 기체의 투과도에서 바인더로서 연료 기체 투과도를 비교하고자 한다.