

일반강연 I-7

진한 라텍스 입자의 Well-defined 막기공을 통한 제한적 이동

황 장 연, 강 은 아, 전 명 석, 김 재 진
한국과학기술연구원 고분자부

Hindered transport of concentrated latex particles through well-defined membrane pores

Jang Yeon Hwang, Eunah Kang, Myung-Suk Chun and Jae-Jin Kim
Membrane Lab., Polymer Div., KIST, Seoul 130-650

1. 서 론

무한한(unbounded) 용매 속에 떠 있는 구형입자의 확산계수는 Stokes-Einstein 식에 의해 주어지며, 이를 이용하여 입자의 반지름을 결정하기도 한다. 입자가 그 크기 정도(order-of-magnitude)의 공간에 제한되는 경우에는 제한하는 벽이 입자의 운동에 많은 영향을 주게 된다. 이런 제한적 이동(hindered transport)은 막이나 크로마토그래피를 이용하는 분리공정이나 촉매를 이용하는 반응공정에서 이용되고 있다.

막기공에서 일어나는 입자의 제한적 이동현상은 무한공간과 제한공간 사이의 평형(분배 계수로 표현)과 제한공간에서의 입자에 미치는 수력학적 효과를 통해 설명된다 [1]. 무한히 묽은 용액의 경우, 분배계수는 입체적 제한에 의해 결정되며, 다양한 형태의 기공에 대해 분배계수가 알려져 있다 [2]. 입자의 농도가 진한 경우에는 Glandt [3]가 슬릿형, 원통형, 구형 기공에 대한 분배계수를 농도의 급수 형태로 구한 바 있다. 한편, Chun과 Phillips [4]는 추계적 모사법(Gibbs ensemble Monte Carlo; GEMC)으로 농도가 진한 경우 정전기적 상호작용(입자-입자, 입자-벽)까지 고려하여 분배계수를 구하였다. 한편, 아래 식들이 보여 주듯이 기공의 이동 특성을 구하려면 수력학적 계수, 분배계수 그리고 기공 안에서 입자의 농도분포가 필요하다. 기공 안에서 수력학적 효과는 drag의 증가와 속도 지연(lag)으로 표현된다 [1, 5].

$$D_{\text{pore}} (\text{확산 계수}) = \phi D_{\infty} \left[\int_0^{1-\lambda} K^{-1} C(\beta) \beta d\beta \right] / \left[\int_0^{1-\lambda} C(\beta) \beta d\beta \right],$$

$$R_j (\text{배제 계수}) = 1 - 2\phi \left[\int_0^{1-\lambda} G C(\beta) (1 - \beta^2) \beta d\beta \right] / \left[\int_0^{1-\lambda} C(\beta) \beta d\beta \right].$$

여기서 D_{∞} 는 Stokes-Einstein 식에 의한 확산계수, K 와 G 는 수력학적 계수, C

는 기공 안의 농도분포, λ 는 입자와 기공의 크기 비율이고 β 는 기공의 반경으로 무차원화한 기공 안에서 입자의 위치를 나타낸다.

이 연구에서는 정전기적 상호 작용이 없는 경우와 있는 경우에 대해 Fig. 1 과 같이 원통형 막기공 안에서 일어나는 제한적 이동을 다루었다. 분배계수와 기공 안의 농도분포를 추계적 모사법으로 구하였고, 수력학적 효과를 고려하여 확산계수와 배계수를 각각 얻었다.

2. 수치 모사 및 확산 실험

사용한 몬테카를로법(GEMC)에서는 기공과 벌크영역을 각각 설정하고, 각 영역에서 입자의 임의이동(NVT process)과 두 영역 사이의 입자교환(μ VT process)을 고려하였다. 이 때 이동이나 교환의 수용 혹은 기각은 고려하는 영역의 상태에 따른 확률조건에 의해 결정하였다 [6]. 여기서, 각 영역의 상태는 상호 작용(입자-입자, 입자-벽)에 의한 에너지와 각 영역의 입자 농도로 나타낸다.

스티렌 라텍스 입자를 사용하여 확산 실험을 수행하였다. 이 때 막으로는 polycarbonate track-etched membrane(Poretics, CA)을 사용하였고, 기공 크기를 달리하여 입자와 기공의 크기 비율을 조절하였다.

3. 결과 및 검토

Fig. 2는 입자와 기공의 크기 비율이 0.3인 경우 기공 안에서 입자의 농도 분포를 보여 준다. 벽으로 다가가면서 벽면의 배계효과로 농도가 증가하는 경향을 보이며, 이 효과는 농도가 진한 경우에 더욱 두드러짐을 알 수 있다. Fig. 3 에는 입자와 기공 크기 비율 λ 에 따른 분배계수(ϕ)의 변화를 나타내었다. 비교를 위해 무한히 묽은 경우와 Glandt의 결과를 함께 실었다. λ 가 0.5 보다 커지면 본 연구결과와 Glandt의 결과가 큰 차이를 보인다. 이런 차이는 Chun과 Phillips의 가장 단순한 공간 구조인 스톱형 기공에 대한 연구 결과에서도 밝혀진 바 있다. 확산계수의 비 $D_{\text{pore}}/D_{\infty}$ 는 Fig. 4에 나타내었다.

4. 참고 문헌

- 1) Deen, W.M.: *AIChE J.*, **33**, 1409 (1987).
- 2) Limbach, K.W., Nitshe, J.M. and Wei, J.: *AIChE J.*, **35**, 42 (1989).
- 3) Glandt, E.D.: *AIChE J.*, **27**, 51 (1981).
- 4) Chun, M.-S. and Phillips, R.J.: *AIChE J.*, **43**, 1194 (1997).
- 5) Nakao, S.-I.: *J. Memb. Sci.*, **96**, 131 (1994).
- 6) Rull, L.F. and Jackson, G.: *Mol. Phys.*, **85**, 435 (1995).

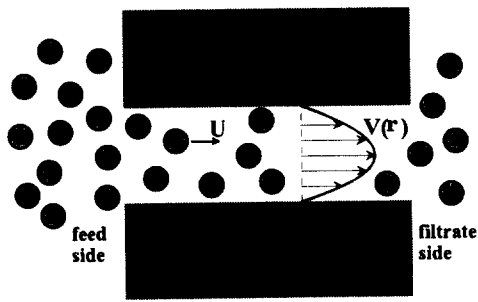


Fig. 1. Schematic of hindered diffusion of latex particles through a cylindrical pore.

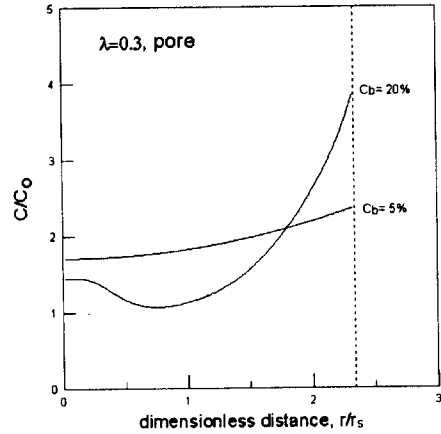


Fig.2. Concentration profiles in the pore region for $\lambda = 0.3$.

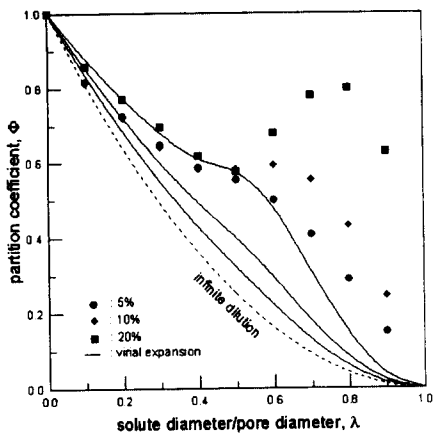


Fig. 3. Partition coefficients depending on λ .

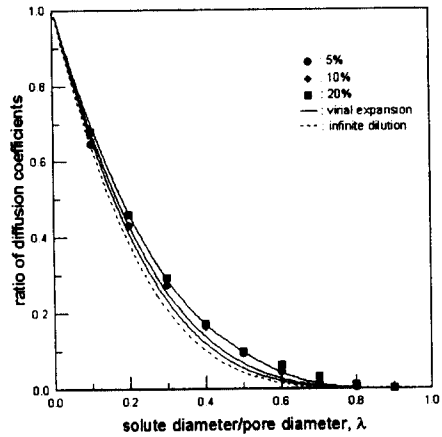


Fig. 4. Ratio of diffusion coefficients depending on λ .