

CA6) 양극성으로 하전된 에어로졸 입자의 응집에 관한 연구 Coagulation of Bipolarly Charged Aerosol

박성훈 · 이규원 · Manabu Shimada¹⁾ · Kikuo Okuyama¹⁾

광주과학기술원 환경공학과, ¹⁾Hiroshima University 화학공학과

1. 서 론

대기중 에어로졸 혹은 미세입자 제조과정에서 생성되는 에어로졸은 전하를 띠게 되는 경우가 많다. 특히 연소공정에서 나오는 배출가스에 포함된 에어로졸은 대부분 하전된 상태로 존재한다. 에어로졸 입자들의 하전량은 응집속도에 영향을 미치게 되고, 결과적으로 입자크기분포의 변화에 큰 변수로 작용하게 된다.

Zebe(1958)에 의하면 입자의 하전 및 응집에 의한 크기-전하량 분포의 변화는 다음 식으로 표현된다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial n^p(v, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \int_0^v \beta^{q, p-q}(v-\bar{v}, \bar{v}) n^{p-q}(v-\bar{v}, t) n^q(\bar{v}, t) d\bar{v} \\ & - n^p(v, t) \sum_{q=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \beta^{p, q}(v, \bar{v}) n^q(\bar{v}, t) d\bar{v} \\ & + \phi_{p+1, -1} n^{p+1}(v, t) + \phi_{p-1, 1} n^{p-1}(v, t) - (\phi_{p, 1} + \phi_{p, -1}) n^p(v, t) \end{aligned} \quad (1)$$

여기서 $n^p(v, t)$ 는 시각 t 에서의 크기-전하량 분포를, $\beta^{p, q}(v, \bar{v})$ 는 부피 v 와 \bar{v} , 전하량 pe 와 qe 인 두 입자의 응집계수를, ϕ 는 하전계수를 나타내며, e 는 단위전하량이다. 식 (1)을 수치적으로 풀기 위해서는 입자크기와 전하량의 2차원으로 이루어진 섹션기법을 흔히 사용하게 되는데 (Oron and Seinfeld, 1989a; 1989b), 이는 지나치게 많은 계산시간을 필요로 하여 그다지 실용적이지 못하다. 따라서 본 연구에서는 섹션기법에 비해 정확도는 다소 떨어지지만 계산시간이 극히 짧은 모멘트기법을 전기응집에 적용하는 방법을 개발하여 그 타당성을 살펴보고, 입자의 하전이 응집에 미치는 영향을 고찰하였다.

2. 연구 방법

본 연구는 자유분자영역(free-molecule regime)에 해당하는 입자의 크기($\ll 100\text{nm}$)를 대상으로 하였고, 입자들이 가질 수 있는 최대전하량을 ± 1 로 제한하였다. 또한 전기적으로 중성, 양성, 음성인 입자들의 크기분포는 각각 시간에 따라 변하는 대수정규분포(log-normal size distribution)로 가정하였다.

자유분자영역에서 전기응집계수 $\beta(v, \bar{v})$ 와 하전계수 ϕ 는 다음과 같이 주어진다(Matsoukas, 1997; Marlow and Brock, 1975).

$$\beta(v, \bar{v}) = \gamma K (v^{1/3} + \bar{v}^{1/3})^2 \left(\frac{1}{v} + \frac{1}{\bar{v}} \right)^{1/2} \quad (2)$$

$$\phi_{\pm 1, \pm 1} = \pi^2 c^{\pm} \left(\frac{8k_B T}{\pi M_{\pm}} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r k_B T} \right) \quad (3)$$

$$\phi_{0, \pm 1} = \pi^2 c^{\pm} \left(\frac{8k_B T}{\pi M_{\pm}} \right)^{1/2} \left(1 + \sqrt{\frac{e^2}{8\epsilon_0 r k_B T}} \right) \quad (4)$$

식 (2)에서 γ 는 정전기 작용에 의한 충돌효율을 의미하는데, 두 입자 중 어느 한 쪽 이상이 중성인 경우에는 1이며, 두 입자가 같은 부호의 전하를 띠고 있을 때는 0, 서로 반대부호의 전하를 띠고 있을 때는 다음 식으로 표현된다.

$$\gamma = 1 + \frac{\alpha}{(v^{1/3} + \bar{v}^{1/3})} \quad (5)$$

위 식에서 $\alpha \approx \frac{e^2}{(3/4\pi)^{1/3} 4\pi \epsilon_0 k_B T}$, ϵ 은 공기의 permittivity이다. 식 (3), (4)에서 M 은 이온의 질량이다.

3. 결과 및 고찰

본 연구에서 유도한 하전된 에어로졸 입자의 응집문제에 대한 모멘트 코드를 검증하기 위해 2차원 섹션코드와의 비교를 실시하였다. 그림 1은 모멘트 코드와 섹션코드를 실행하여 얻어진 양성, 중성, 음성 및 전체 입자농도의 변화를 비교한 것이다. 초기조건으로는 양성과 음성으로 하전된 단분산 입자들만 각각 $5 \times 10^8 \text{cc}^{-1}$ 씩 있었다고 주었으며, 입자반지름은 1 nm로 주었다. 또한 입자의 추가적인 하전은 없는 것으로 가정하였다. 그림 1에 의하면 본 연구에서 개발한 모멘트 코드는 양극성 전기 응집으로 인한 입자농도의 변화를 매우 정확하게 계산할 수 있음을 알 수 있다. 또한, 양성 입자와 음성 입자간의 빠른 응집 속도로 인하여 응집 후기에는 하전 입자는 거의 존재하지 않고 중성입자만이 남게 되는 것을 확인할 수 있다.

그림 2는 입자들이 초기에 하전되어 있었을 때와 그렇지 않을 때, 응집과정중에 동시에 입자 하전이 이루어질 때와 그렇지 않을 때에 전기응집으로 인한 입자농도의 변화를 비교한 것이다. 입자하전이 응집과 동시에 일어나지 않을 때, 즉, 이온이 존재하지 않을 때, 응집속도는 입자가 초기에 하전되어 있는 경우에 훨씬 빠르다. 그러나 양성과 음성 입자들이 전기응집에 의해 소모되고 나면 중성인 입자들만 남기 때문에 응집 후기에 접어들면서 이런 효과는 차차 사라지고, 입자농도의 감소는 거의 비슷하게 된다. 이러한 효과는 입자하전이 응집과 함께 계속 일어나는 두 경우, 즉, 이온이 존재하는 두 경우를 비교해보아도 비슷하게 나타난다. 그러나, 입자하전이 응집과 함께 계속 일어날 때는 초기 입자하전의 효과가 상대적으로 덜 중요하게 나타난다. 이는 초기에 하전되어 있던 입자들이 다른 극성의 이온들에 의해 빠르게 중화되기 때문인 것으로 보인다. 따라서 입자가 처음부터 하전되어 있던 두 경우를 비교하면 응집 초기에는 이온이 있는 편이 이온에 의한 입자의 중화가 일어나기 때문에 응집이 더 천천히 진행되지만, 응집 후기에는 중화된 입자의 재하전이 일어날 수 있어 응집속도가 더 빨라지게 된다.

후 기

본 연구는 한국과학재단(KOSEF: Grant No. 996-1100-001-2)과 일본학술진흥회(JSPS: Japan-Korea Research Cooperative Program)의 지원을 받아 광주과학기술원과 일본 히로시마대학교의 국제공동연구의 일환으로 수행되었습니다. 이에 감사드립니다.

참 고 문 헌

- Marlow, W. H. and Brock, J. R. (1975) *J. Colloid Interface Sci.* 51, 23.
 Matsoukas, T. (1997) *J. Colloid Interface Sci.* 187, 474.
 Oron, A. and Seinfeld, J. H. (1989a) *J. Colloid Interface Sci.* 133, 66.
 Oron, A. and Seinfeld, J. H. (1989b) *J. Colloid Interface Sci.* 133, 80.
 Zebel, G. (1958) *Kolloid Z.* 157, 37.

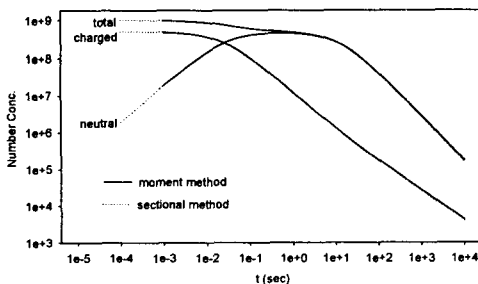


Figure 1. Comparison of changes in total number concentration of neutral and charged particles.

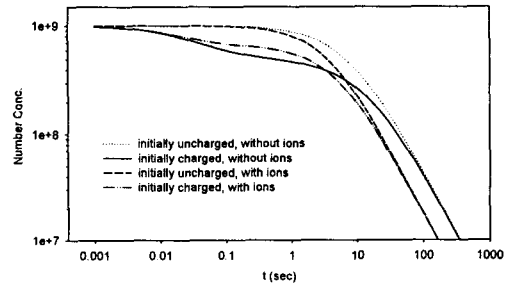


Figure 2. Comparison of number concentration decay due to bipolar coagulation for different conditions.