CFD를 이용한 전해로의 전기장 해석

김광락, 백승우, 김정국, 권상운, 김시형, 심준보, 안도희, 이한수
한국원자력연구원, 대전광역시 유성구 덕진동 150
krkim1@kaeri.re.kr

1. 서론

약 500℃의 고온에서 운전되는 용융염 전해로는 공융염(LiCl-KCl) 전해질의 유동 특성이 전극반응 속도와 전극 전위에 크게 영향을 미친다. 전극반응에서 반응물질에 해당하는 이온의 이동은 전해질의 난류효과에 의해 증대되며, 전극 표면까지 전달되는 확산에 의해 그 반응속도가 제한된다. 파이로프로세싱의 대상 물질인 악티늄족 원소들의 금속염은 고체 전극에서는 주어진 전극전위에 따라 순수한 우라늄을 정련 회수할 수 있는 전류량이 달라지며, 액체금속 전극에서도 초우라늄 원소들의 공회수의 전착 특성이 달라지게 진다. 즉, 이온의 확산이동에 의해 율속되는 농도분극과 전극표면에서 전극반응의 활성화 에너지에 의한 분극은 전해셀의 과전위를 증가시켜 희토류 핵분열 생성물의 전착 가능성이 수반되기 때문에 인가할 수 있는 전류량이 그만큼 제한된다. 따라서 전해셀은 효율적인 용융염 전해질의 난류 유동을 위한 교반조건 그리고 전극구조를 구성함으로써 인가시킬 수 있는 전류한계 여유를 높여 처리 용량을 높일 수 있게 설계되어야 한다.

본 연구에서는 전해로에서 용융염 전해질의 유동장을 설정하고 상용 전산유체역학(Computational Fluid Dynamics, CFD) 소프트웨어에 의해 유동을 모사할 수 있는 3차원 좌표 체계(Framework) 내에서 전기화학반응을 모사하는 사용자 루틴과 결합된 접근방법의 알고리즘을 개발하였다.

2. 본론

CFD 모델에서 비압축성 전해질의 유동은 Navier-Stokes 식과 연속방정식을 사용하였다.

$$\rho\frac{\partial u}{\partial t}+\rho u\nabla u=-\nabla P+\mu\nabla^2 u+S_u$$

$$\rho(\nabla\cdot u)=0$$

그리고 벌크 전해질로부터 전극 표면까지의 이온 이동을 다음과 같은 스칼라 전달방정식을 이용하므로 마이크로메타의 격자로 처리된 전극표면에서 이온의 농도구배를 구할 수 있었다.

$$\rho\frac{\partial C}{\partial t}+\rho\nabla\cdot(uC)=\rho\nabla\cdot(D_C\nabla C)+S_C$$

벌크 전해질에서의 Ohmic 저항을 고려한 전기장은 전위차 구배에 의한 벡터함수($\vec{j}=-k\nabla\Phi$)로 전류밀도 분포를 도출하고 그리고 전극표면의 국부전류 밀도는 농도구배($\vec{j}=-nFD\nabla C$)로부터 구할 수 있었다. 전극표면에서의 국소 과전압을 표면 농도가 고려된 Modified Butler-Volmer 전극반응 속도식으로 구하는 알고리즘을 확립하였다. CFD-전기화학 커플링으로 접근한 본 모델을 우라늄 전해반응기에 적용하여 모사한 결과 전해질의 유동기반과 이온 확산이 고려된 전해특성을 예측할 수 있었다.

3. 결론

정전류 전해(Galvanostatic Electrolysis) 조건에 따라 원소들의 확산에 의한 전하이동과 여기에 관련된 전극표면에서의 과전위 및 전류밀도 등의 전해특성을 예측할 수 있었다. 본 연구에서 수립한 CFD 기반의 유동특성과 전기화학반응을 결합한 모델의 접근 방법은 용융염 전해셀 운전과 구조 설계에 응용할 수 있을 것으로 사료된다.