

나노 알루미늄-물 혼합물의 수반응 연소 모델링

윤시경* · 성홍계**

Combustion modeling of nano aluminum particle and water mixture

Shi-kyung Yoon* · Hong-gye Sung**

ABSTRACT

Theoretical consideration on the combustion behavior of nano-aluminum and water mixture was conducted. The regions are divided into; 1)water+aluminum 2)steam+aluminum 3)reaction zone. Latent heat of vaporization was considered as a function of pressure in case of phase change of water. Also, pressure exponent was studied of various sized nano particles within the range of 0.1MPa ~ 10MPa.

초 록

나노 알루미늄과 물의 연소 반응을 정상상태 층류 연소로 모델링하여 이론적 접근을 하였으며 압력에 따른 화염전파속도의 영향을 조사하였다. 물의 상변화에 따른 증발열을 고려하였으며 다양한 압력 영역(0.1MPa ~ 10MPa)에 대한 연소 특성을 살펴보았다. 모델링 영역을 1)물+알루미늄 2)증기+알루미늄 3)반응영역으로 나누었으며 영역의 방정식을 구성하고 화염속도에 대한 해석적 해를 구하였다. 입자 크기에 따른 연소실 압력의 영향을 도출하여 시험결과와 비교, 분석 하였다.

Key Words: Nano aluminum, Metal particle combustion, Nano energetic material, Water reaction

1. 서 론

금속 연료(알루미늄(Al), 마그네슘(Mg), 붕소(B)등)는 높은 반응열로 인해 로켓 연료, 폭탄 등에 Isp 증가를 위한 첨가물로 사용되어왔으며 지난 반세기 동안 연구가 이루어져왔다. [1,2]

금속 연료가 주연료로 사용되지 못하고 첨가

제로만 사용되는 이유는 대부분의 금속 연료가 자연적으로 산소와 반응하여 산화피막을 표면에 형성하여 점화가 어렵기 때문이다.[3] 알루미늄의 경우 공기와 반응하여 산화알루미늄(알루미늄, Al_2O_3)이 알루미늄 표면에 생성되는데 알루미늄을 연소시키기 위해서는 이 산화알루미늄 피막을 제거시켜야 한다. 이때 산화알루미늄을 제거하기 위해서는 온도를 산화알루미늄의 녹는 점까지 상승시켜야하며 그 온도는 약 2200K~2300K이다. 즉 알루미늄의 점화 온도가 2200K~2300K가 되는 것이다. 일반적인 탄화수소

* 한국항공대학교 항공우주 및 기계공학과

** 한국항공대학교 항공우주 및 기계공학부
연락처, E-mail: hgsung@kau.ac.kr

계열의 연료의 연소온도가 약 2000K임을 감안하면 이는 매우 높은 온도이다.

이러한 금속 연료의 점화 문제를 해결하기 위해 많은 연구자들은 마이크로 크기의 금속 연료 대신 나노 크기의 금속 연료를 사용하였다.[2, 4]

나노크기의 금속연료의 점화온도는 매우 낮으며 특히 알루미늄 나노입자인 경우에는 Bulk 크기보다 점화온도가 대략 50%이상 감소하게 된다. 그 이유는 산화피막의 두께가 Bulk 또는 마이크로 크기에서 형성되는 산화피막 두께보다 Fig. 1과 같이 약 1000배 작기 때문이다.[1]

나노크기 금속의 점화온도가 50% 정도 낮아지는 또 다른 원인은 산화피막(알루미나, Al_2O_3)을 제거하는 방법이 다르기 때문이다.

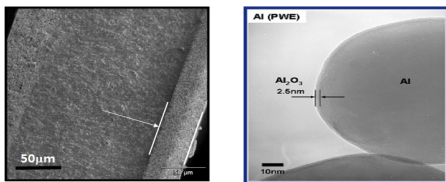


Fig. 1 Oxide layer thickness (L: micro, R: nano)[1]

마이크로 또는 Bulk 크기에서는 알루미늄의 녹는점이 660℃ 정도 되면 산화피막 안에 있는 알루미늄이 고체에서 액체로 변화하면서 비체적이 $0.37cm^3/g$ 에서 $0.42cm^3/g$ 으로 약 13% 부피가 증가하여 산화피막에 응력이 발생하고 그 결과 파괴된다. 그리고 그 파괴되는 응력은 산화피막 두께에 의존한다. 나노크기의 알루미늄인 경우는 Gibbs-Thomson Equation에 의해 녹는점 자체가 Bulk나 마이크로 크기의 녹는점 보다 약 30% 이상 낮아지고, 산화피막의 곡률도 커져 그 결과 동일 온도조건에서 산화피막 자체가 받는 응력도 커지게 되고 또한 산화피막 내부에 있는 알루미늄의 부피 팽창도 매우 크게 되어 산화피막 파괴 현상이 매우 낮은 온도에서 발생하게 되어 점화가 일어나게 된다.

뿐만 아니라, 나노 크기의 금속은 산화제가 접촉하는 표면적(specific surface)[3]이 일반적인 알루미늄(bulk 또는 마이크로)보다 커서 반응을 또한 우수하다. 즉, 단일입자의 연소시간이 상대적

으로 짧아 제한적으로 제작되는 연소실 내에서도 우수한 성능을 보일 수 있다.

이러한 장점으로 나노 알루미늄 입자의 연구가 주목을 받게 되었으며, 현재 많은 연구자들이 다양한 조건(입자 크기, 압력, 산화제 종류 등)에 대한 나노 알루미늄의 연소에 관한 연구를 진행하고 있다. Ingenito A 등은[2] 나노 알루미늄을 이용한 우주 추진체에 대한 연구를 진행하였고, J.P Foot 등은[4] 알루미늄을 이용한 해수 흡입 수중 추진체에 대한 연구를 수행하였다. 본 연구와 유사하게 Vigor 등은[3, 6] 공기, 물, 이산화탄소 환경에서 나노 및 마이크로 알루미늄의 연소 모델링에 대한 연구를 진행하였으며, 이를 바탕으로 국내에서 유사한 연구가 진행되었다.[5] 본 연구에서는 나노 알루미늄의 수반응 연소 모델링을 제안하고 나노 알루미늄의 수반응 연소 특성을 조사하였다.

2. 본 론

2.1 물리공간

본 연구는 Fig. 2 와 같이 균일하게 분포되어 있는 알루미늄과 산화제(H_2O) 혼합물의 평면 화염 연소특성을 조사하기 위하여, 입자가 포함된 유동을 정상상태 층류 연소로 가정하여 모델링하였다. 이를 통해 입자크기(마이크로와 나노의 크기) 및 주변 조건(초기 온도 및 압력)에 따른 화염전파 속도 및 화염 온도 분포를 도출하였으며 실험결과와 비교하였다. 알루미늄 입자와 산화제간의 온도차는 없다고 가정하고 입자간의 충돌 및 중력, 복사에 의한 열전달 효과는 무시하였다.

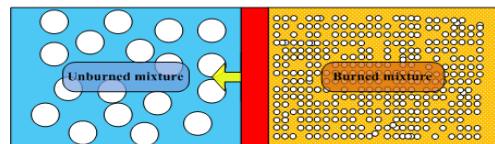


Fig. 2 Physical space

2.2 지배방정식

본 연구에서는 Fig 2의 공간을 다음과 같이 나누어 모델링 하였다. (Fig. 3 참조)

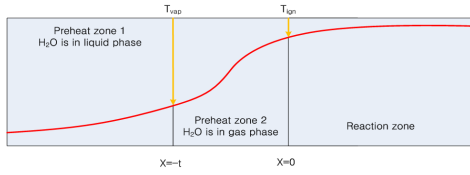


Fig. 3 Computational domain

2.2.1 예열영역 1 (Preheat zone 1)

예열영역 1은 알루미늄과 물이 존재하며 연소 영역으로부터의 열전달에 의해 가열된다. 온도 영역은 초기 온도에서부터 물의 끓는점까지이며 지배방정식은 정상상태 전도-대류 방정식으로 다음과 같다.

$$\rho_{mix} S_L C_{p,mix} \frac{dT}{dx} = \lambda_{mix} \frac{d^2 T}{dx^2} \quad (1)$$

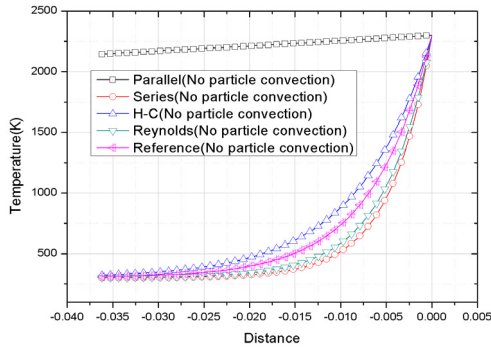


Fig. 4 Temperature field with various effective thermal conductivity model

본 연구에서는 기존의 연구와 달리[5] 입자와 산화제간의 온도차는 없다고 가정하였기 때문에 각각의 상태에 대한 방정식을 사용하지 않고 두 물질을 하나의 혼합물로 생각하여 하나의 방정식을 고려하였다. 이때 방정식에 사용되는 물성치는 유효값을(effective value) 사용하였으며 유효열전도도에 대한 값은 Fig. 4과 같이 온도장에 대한 계산 결과 기존 연구결과와[3] H-C 모델이 가장 적합함을 확인할 수 있었다. 밀도와 정압비열에 대한 유효값은 당량비에 따른 질량분율을 고려하여 모델링하였다.

2.2.2 예열영역 2 (Preheat zone 2)

예열영역 2는 본 연구팀의 기존 연구[5]에는

존재하지 않았던 영역으로 알루미늄과 물 ($H_2O(l)$)이 아닌 수증기($H_2O(g)$)가 존재하며 물의 상변화에 따른 증발열을 고려하였다. 온도는 Fig. 3과 같이 물의 끓는점부터 입자의 점화온도까지 이다.

$$\rho_{mix} S_L C_{p,mix} \frac{dT}{dx} = \lambda_{mix} \frac{d^2 T}{dx^2} - \frac{\rho_{H_2O} S_L h_{fg}}{t} \quad (2)$$

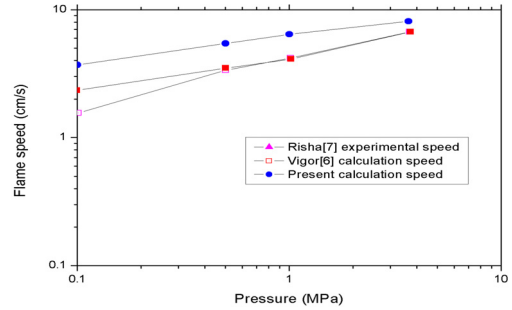


Fig. 5 Effect of pressure on flame speed excluding preheat zone 2(38nm, $\phi = 1$)

Figure 5은 기존 연구의[5] 수반응의 모델에 대한 결과이며 실험값 및 다른 연구자의 결과와 [6,7] 비교하였다. 전반적인 추세는 유사하지만 오차가 발생하는 것을 확인할 수 있다. 이는 물의 상변화에 따른 증발열을 고려하지 않았기 때문에 발생하였다.

2.2.3 연소영역 (Reaction zone)

$$\rho_{mix} S_L C_{p,mix} \frac{dT}{dx} = \lambda_{mix} \frac{d^2 T}{dx^2} + w_F \cdot Q \quad (3)$$

연소 영역은 기존 연구[5]에 사용했던 방정식과 유사한 형태의 방정식을 사용했지만 본 연구에서는 온도 변화에 따른 물성치 변화를 고려하였다. 여기서 source term인 $w_F \cdot Q$ 는 화학반응에 의해 발생하는 발열량과 반응율[kg/s]의 곱이며 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$w_F \cdot Q = -\frac{B_u}{\tau_c} = -\frac{B_u}{d^{0.3} / C_2 e^{-E_b/RT} X_{eff} P^{0.48}} \quad (4)$$

B_u 는 초기 입자의 단위 부피당 질량이며 τ_c 는 단일 입자의 연소 시간(sec)이다. $C_2=8.72105$, X_{eff} 는 유효 산화제 물분율, R은 가스 상수이며 $E_b=73.6$ KJ/mol 이다.

Figure 6는 Fig. 5과 달리 예열영역 2 즉, 물의 상변화에 대한 에너지 소모량을 고려한 방정식을 통해 얻은 결과이다.

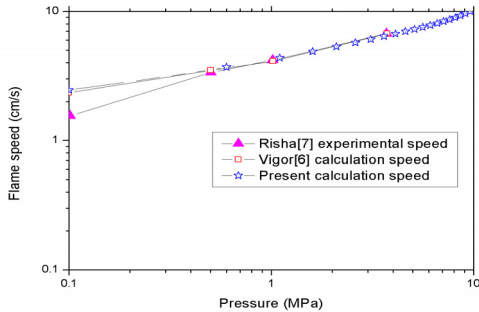


Fig. 6 Effect of pressure on flame speed including preheat zone 2(38nm, $\phi = 1$)

압력이 증가함에 따라 화염전파속도가 증가하는 것을 알 수 있으며 압력의 영향에 의해 증발잠열이 변하여 로그 좌표 상에서 비선형적인 관계를 갖는다. 위 결과는 압력에 따른 증발열을 고려하여 넓은 압력 영역에서 실험결과와 일치하고 있다.

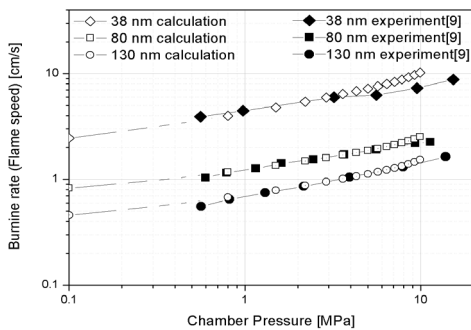


Fig. 7 Pressure exponent of various nano aluminum particle size burning rate

Figure 7은 다양한 입자 크기(38nm, 80nm, 130nm)의 화염전파속도에 대한 압력의 영향을 나타낸 결과이다. 조사된 모든 입자 크기에서 압력이 증가함에 따라 화염전파속도가 증가한다. 각 입자크기에 대한 압력지수는 0.27-0.44의 범위이며, 압력 상수는 0.46~2.46범위이고 참고논문 [8]에서 도출한 압력지수와 동일한 결과이다.

3. 결 론

나노 알루미늄과 물 혼합물의 연소를 정상상

태 층류 연소로 모델링하여 연소 특성을 살펴본다. 나노 알루미늄(38nm, 80nm, 130nm) 입자가 물과 반응할 때의 연소 속도를 예측하였으며 실험결과와 비교하여 검증하였다. 이를 통해 다음의 사항들을 알 수 있었다.

- 알루미늄-물 혼합물의 유효열전도도는 H-C 모델이 가장 적합하다.
- 압력 증가에 따라 화염전파속도가 증가한다.
- 나노 입자 크기에 따라 연소실의 초기 압력에 대한 영향이 상이하다.

후 기

본 연구는 한국과학재단의 기초연구사업 지원(과제번호 2010-0015635)에 의해 수행되었으며 이에 감사드립니다.

참 고 문 헌

1. Richard A. Yetter, Grant Risha, Steven F. Son, Proceedings of the Combustion Institute 32 (2009) 1819 - 1838
2. Ingenito, A. Bruno, C, Journal of Propulsion and Power, Vol. 20, No. 6 November - December 2004, pp.1056, 1063.
3. Huang, Y., Yang, V., Yetter, R. A., and Risha, G. A. AIAA 2005-0738
4. J.P. Foote, J.T. Lineberry, B.R. Thompson, B.C. Winkelman, AIAA96-3086
5. 윤시경, 성홍계 '알루미늄 분말의 유용성과 화염전파 특성', 제 15차 유도무기학술학회
6. Dilip Srinivas Sundaram, Puneesh Puri, Ying Huang, Richard A. Yetter, Vigor Yang, AIAA 2009-641
7. Risha, G.A., Son, S.F., Yetter, R.A., Yang, V., and Tappan, B.C., Proceedings of the Combustion Institute, Vol.31, No. 2, 2007, pp. 2029, 2036.
8. Risha, Grant A., Sabourin, Justin L., Yang, Vigor, Yetter, Richard A., Son, Steven F. and Tappan, Bryce, Combustion Science and Technology, 180:12, 2127 - 2142