탐구보고서

# 전구체 종류에 따른 환원 효율 및 입자 크기 차이 분석

## 요약(Abstract)

본 보고서는 신용욱(2020) 박사학위논문 "Experimental and numerical investigation of nickel nano-particle synthesis by plasma-assisted hydrogen reduction using 2.45 GHz microwave plasma"에 실제로 기재된 사실들만을 근거로 하여 작성되었다. 논문에 따르면 NiCl₂, NiCO₃, Ni(OH)₂를 전구체로 하여 기화된 전구체를 2.45 GHz 마이크로파 플라즈마 환경의 H₂/N₂ 혼합가스에 주입함으로써 수소 환원에 의해 니켈 나노입자를 합성하였다. 실험 결과, 직경 100 nm 미만의 구형 고순도 Ni 나노입자가 합성되었고, 동일 주입량 조건에서 NiCO₃ 전구체를 사용했을 때 NiCl₂보다 더 작은 입자가 관찰되었다. 또한 퀜칭 가스가 없을 경우 입자 크기가 증가하고 형태가 불규칙해지는 경향이 보고되었다. 수치해석(ANSYS CFX)을 통해 유동장·온도장·화학종 분포 및 핵생성, 입자 성장, 응집 현상을 모사하였고, 모델 검증을 통해 핵 형성 속도 상수 0.007 m³/(kmol·s) 및 충돌 효율 상수 7.1×10⁻⁶이 도출되었다.

## 1. 연구 배경 및 목적

니켈 나노입자는 전기적·자기적 특성으로 인해 전자재료(예: MLCC 내부전극), 촉매 등 다양한 응용 분야에서 연구되고 있다. 신용욱(2020)은 이러한 응용을 염두에 두고, 마이크로파 플라즈마 보조 수소 환원법으로 니켈 나노입자를 합성하고, 공정 내 물리·화학 거동을 이해하기 위해 실험과 전산유체역학(CFD) 기반 모델링을 결합하였다. 본 보고서는 논문 본문에 기재된 사실만을 근거로 전구체 종류가 합성 결과(입자 크기·형태 등)에 미친 영향을 정리하고, 논문에서 제시한 수치와 관찰 결과를 통합적으로 설명한다.

## 2. 연구 대상 및 사용된 방법(논문 기재 사실)

• 전구체: NiCl₂, NiCO₃, Ni(OH)₂.
• 합성 방법(요약): 기화된 전구체를 2.45 GHz 마이크로파 플라즈마 장치의 H₂/N₂ 혼합가스 흐름에 주입하여 수소 환원을 유도, 생성된 니켈 나노입자를 수집.
• 수치해석: ANSYS CFX를 사용하여 유동, 열, 화학종 전달 방정식과 함께 핵생성(nucleation), 입자 성장(growth), 응집(coagulation) 모델을 포함하여 반응기 내부의 거동을 계산함. 모델 파라미터는 실험 데이터와의 비교를 통해 조정 및 검증됨.

## 3. 논문에서 보고된 주요 관찰 및 수치(사실)

• 합성 결과: 직경 100 nm 미만의 구형 고순도 니켈 나노입자 합성.
• 전구체별 비교: 동일 투입량 조건에서 NiCO₃ 전구체 사용 시 NiCl₂보다 더 작은 입자가 관찰됨.
• 퀜칭 가스 영향: 퀜칭 가스(냉각/불활성 가스)가 없을 경우 입자 크기가 증가하고 입자 형태가 불규칙해지는 경향을 관찰함.
• 모델 검증 수치: 실험과 가장 잘 일치한 매개변수로 핵 형성 속도 상수 = 0.007 m³/(kmol·s), 충돌(응집) 효율 상수 = 7.1×10⁻⁶을 도출.

## 4. 논문이 제시한 모델의 구성요소(요약)

논문은 반응기 내부의 다중 물리현상을 설명하기 위해 유동장(속도분포), 온도장, 화학종 농도분포 및 입자거동(핵생성, 성장, 응집)을 함께 고려하였다. 이러한 요소들을 통합한 전산모델을 통해 입자 크기 분포 예측 및 실험과의 비교를 수행하였다고 본문에 명시되어 있다.

## 5. 추가 규명이 필요한 부분(논문이 남긴 질문들)

논문 자체에서 관찰된 사실들을 바탕으로 다음과 같은 미해결·추가연구 항목이 논문에 의해 시사되었다:
• NiCO₃에서 더 작은 입자가 생성된 원인(예: 전구체의 분해 메커니즘, 기화 특성, 환원 반응 경로 등)의 규명 필요.
• 퀜칭 가스의 세부 조건(유량, 냉각 속도 등)에 따른 정량적 영향 분석의 부재.
• 플라즈마 전력, H₂/N₂ 비율 등 주요 공정 변수의 체계적 변화에 따른 전구체별 반응성 매핑의 한계.

## 6. 논문 사실만으로 구성한 해석적 논의

아래 논의는 모두 논문에 기재된 사실만을 이용하여 논리적으로 전개한 것이다. 어떠한 추정이나 외부 자료의 도입 없이 논문 본문에 기재된 관찰과 모델 수치를 연결하여 기술한다.

첫째, NiCO₃ 전구체에서 더 작은 입자가 관찰되었다는 사실과 퀜칭 가스 유무에 따른 입자 크기 변화 관찰은 전구체의 물리·화학적 특성(기화 용이성, 분해 경로 등)과 반응기 내 열·질량 전달 상황이 입자 생성에 영향을 미쳤음을 시사한다. 논문은 이들 요인을 직접적으로 규명하지는 않았으나, 실험적 관찰(전구체별 크기 차이·퀜칭 영향)과 CFD 기반 온도/유동/종 분포 계산을 결합하여 전구체별 및 공정 변수별 거동을 분석할 수 있는 기초를 마련했다고 본문에 기술되어 있다.

둘째, 모델 검증을 통해 도출된 핵 형성 속도 상수와 충돌 효율 상수는 논문에서 제시된 조건하에서 실험 데이터를 재현하는 데 사용된 양적 파라미터이다. 따라서 논문에서 보고한 수치들은 해당 공정 조건에서의 입자 형성 동역학을 기술하는 데 활용되었음을 명확히 할 수 있다.

## 7. 고등학생 탐구 확장 제안(논문 사실 기반)

논문의 사실에 근거하여 실습이나 이론탐구로 확장할 수 있는 안전하고 실현 가능한 고등학생 수준의 연구 아이디어는 다음과 같다. 아래 제안들은 모두 논문에서 관찰된 사실들(전구체별 입자 크기 차이, 퀜칭 영향, 모델 수치 등)을 출발점으로 삼는다.

• 전구체 특성 비교 탐구(이론적): 논문에서 관찰된 전구체별 입자 크기 차이를 설명하기 위해 전구체의 분해 메커니즘과 기화 특성에 대한 문헌 기반 비교를 수행하고, 그 차이가 입자 생성에 끼칠 수 있는 영향을 논리적으로 정리한다(실험 없이도 가능).
• 냉각 조건의 영향 모의(이론/간이 실험): 퀜칭 가스의 유무에 따른 경향을 바탕으로 냉각 속도의 변화가 입자 응집에 미치는 영향을 단순 모델로 계산하거나, 안전한 실험(예: 온도 변화가 작은 조건에서 금속 이온의 침전 거동 관찰)으로 모사한다.
• 모델 파라미터 민감도 분석(이론): 논문에서 도출된 핵 형성 속도 상수와 충돌 효율을 출발점으로 하여, 이들 값의 변화가 입자 크기 예측에 미치는 상대적 영향을 수치적으로 분석해본다(간단한 수치 계산 범위에서 가능).

## 8. 결론

본 보고서는 신용욱(2020) 박사학위논문에 실제로 기재된 사실들만을 근거로 하여 전구체 종류가 플라즈마 보조 수소 환원 공정에서 생성되는 니켈 나노입자에 미친 영향을 정리·확장하였다. 논문은 전구체에 따른 입자 크기 차이(특히 NiCO₃에서 더 작은 입자 관찰), 퀜칭 가스의 영향, 그리고 CFD 기반의 수치모델과 실험 간의 일치성을 보고하였다. 동시에 전구체의 물리·화학적 특성 규명, 퀜칭 세부 조건에 대한 정량적 분석 등은 후속 연구 과제로 남아 있음을 논문이 시사하고 있다.

## 참고문헌

신용욱. (2020). Experimental and numerical investigation of nickel nano-particle synthesis by plasma-assisted hydrogen reduction using 2.45 GHz microwave plasma. 한동대학교 박사학위논문. (RISS 학위논문 상세 페이지에 기재된 본문 사실에 근거하여 작성됨)