

## 직접 메탄올 연료전지의 전산모사에 관한 연구

### Simulation of direct methanol fuel cells employing computational fluid dynamics

김영진, 오인환\*, 홍성안\*, 김혁년\*\*, 이태희, 하홍용\*

연세대학교 화학공학과,  
한국과학기술연구원 연료전지센터\*,  
배터리 R & D 센터 LG화학\*\*

An analytical study on DMFCs was carried out by employing the computational fluid dynamics(CFD) method. In this study, the commercial CFD code Fluent(ver. 5.5) was used, and many assumptions were adopted to simplify the situation in the fuel cell. From the simulation, many valuable informations were obtained in terms of distributions of velocity, pressure, temperature, density and current density over the flow field. And thus, it was anticipated that the simulation results were very helpful in developing DMFCs by facilitate optimization of structures of electrodes and flow field of the separator.

#### 서론

연료전지는 여러 가지 종류가 있으며, 그 종류와 용량에 따라 다양한 용도로 사용이 가능할 것으로 예상되고 있다. 연료전지 중에서는 현재 자동차용 엔진으로 사용하기 위해 개발 중인 고분자 전해질 연료전지(PEMFC)가 가장 활발히 연구되고 있으며, 휴대용으로는 연료 개질기나 수소 실린더 등이 필요 없는 직접메탄올연료전지(DMFC)가 개발되고 있다. 직접메탄올 연료전지는 수 와트급에서 수백 와트급까지의 크기로 개발되고 있으며, 휴대폰용 전원이나 노트북 컴퓨터 등에 사용이 가능할 것으로 보인다. 그러나, 아직까지는 직접메탄올 연료전지의 성능을 향상시키기 위한 연구에 초점이 맞추어져 있는 상태로서, 메탄올 저투과성 전해질막, 고성능 촉매, 고성능 전극 등에 관한 연구가 활발히 이루어지고 있다.

직접 메탄올 연료전지의 구조는 Fig.1.과 같으며, 고분자 전해질 연료전지와 거의 같은 구조를 갖고 있다. DMFC 셀의 구조는 크게 전해질막-전극 접합체 (MEA, membrane-electrode assembly)와 분리판으로 이루어져 있는데, 분리판은 그래파이트판으로 제조되며, 표면에 기체 또는 액체의 반응물이 공급되는 골(flow field)이 형성되어 있다.

본 연구에서는 상용 시뮬레이터를 이용하여 직접 메탄올 연료전지의 셀 내에서 유체의 유동을 전산모사함으로써 DMFC에서의 유체의 흐름을 분석하고, 이를 통해 DMFC의 성능을 예측하기 위한 연구를 수행하였다.

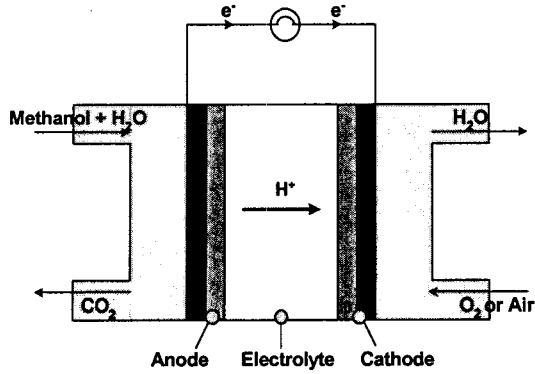


Fig.1 Schematic diagram of DMFCs

### 모델 전개

본 연구에서는 DMFC의 전기화학적 반응 및 유체의 유동을 해석하기 위해 상용 code인 Fluent ver. 6.0(Fluent, Inc., Lebanon, NH, USA)를 이용하였다. 확산층의 투과도에 따른 확산층 내에서의 물질의 유동을 통해 전류의 생성을 계산하였고, 반응물의 공급 속도에 따른 확산층 내에서의 반응물의 확산에 대해 해석하였다. Fig.2.는 본 연구에서 사용된 직접 메탄올 연료전지의 분리판 구조를 보여주고 있다. 그래파이트 분리판의 유로를 통해 반응물 및 생성물이 이동하며 전극에서 생성된 전자는 기체확산층을 통해 분리판으로 전달된다. 유한 체적법에 의한 전산모사를 위하여 본 그래파이트 분리판내 실제 유체가 흐르는 유로를 선택하여 본 연구에서는 해석하였다.

직접 메탄올 연료전지의 확산층의 투과도에 따른 전극 내 유체의 유동에 대한 전산 모사 및 유로의 전산모사를 위해 다음과 같은 가정을 사용하였다. 직접 메탄올 연료전지 내 반응 및 유체의 유동은 정상 상태를 유지하고 등온 상태를 유지하며, 모든 전기화학 반응은 전해질과 촉매층의 경계면에서 일어나고, 반응전환율은 100% 이다.

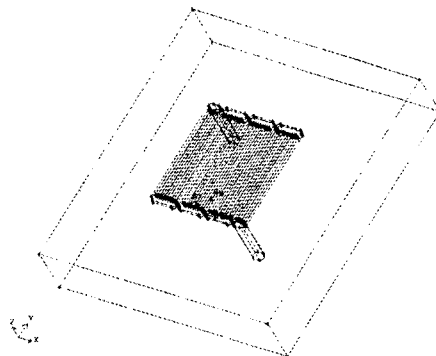


Fig.2 Schematic diagram of flow field in DMFC

## 결과 및 고찰

본 연구에서는 MEA(membrane and electrode assembly)와 anode 및 cathode channel의 유체의 유동 그리고 반응물의 농도들을 해석하였다. Fig.3는 채널 및 MEA내에서의 메탄올의 농도분포를 보여주고 있다. 또한, Fig.4는 채널, 기체확산층 및 전해질내에서의 메탄올 농도분포를 나타내고 있는데 채널내에서 전해질막쪽으로 갈수록 메탄올 농도가 감소하고 있음을 보여주고 있다. Fig.5은 본 모델의 촉매층내의 평균 메탄올 농도를 Nernst 식을 통해 구한 성능 곡선이다. 실제 시스템의 성능에 비해 더 높은 성능을 보이고 있는데, 이는 본 모델이 접촉 저항 및 메탄올 크로스 오버에 의한 mixed potential을 고려하지 않았기 때문이다. Fig.6은 anode 채널의 압력분포를 보여주고 있다. 채널에서 기체 확산층으로의 반응물의 원활한 공급을 위해서는 압력강하를 최소한으로 하여야 하는데, 따라서 이러한 전산모사를 통해 최적의 채널설계를 이룰 수 있다.

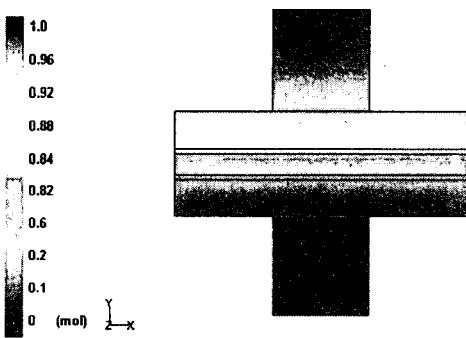


Fig.3 Contour of MeOH concentration in the MEA and anode channel

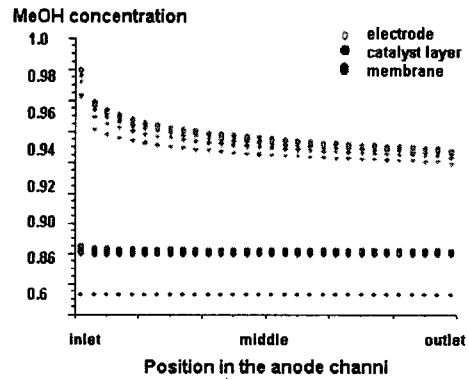


Fig.4 MeOH concentration distribution in the MEA

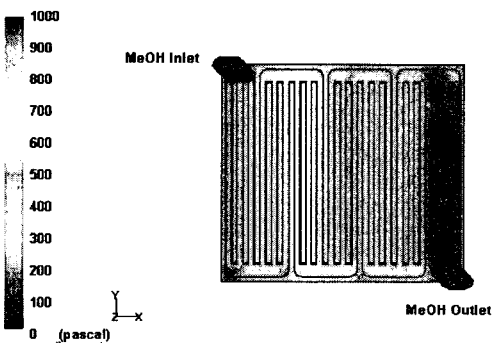


Fig.6 Contour of static pressure in the MEA and anode channel

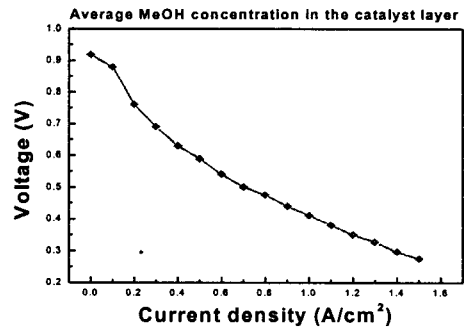


Fig.5 Polarization curve in the present model

## 결 론

직접 메탄올 연료전지 내에서의 유체흐름 및 전기화학반응에 대한 전산 모사를 통해 연료전지 셀 내에서의 유체의 유동 및 반응을 해석할 수 있었으며, 이를 통해 직접 메탄올 연료전지의 성능향상을 위한 유로의 설계와 및 최적의 운전을 위한 조건들을 분석할 수 있었다. 이러한 전산모사를 활용하면 전극 구조와 유로의 형태에 따른 전지 내에서의 반응 및 유체흐름에 대한 해석이 가능하며, 이를 통해 최적의 전극 구조와 유로형태를 설계하므로써 연료전지의 성능향상에 기여할 수 있다. 또한, 단위전지 뿐만 아니라 스택에 대한 모델링과 전산모사도 가능하기 때문에 연료전지 연구에 있어서 비용과 시간을 절약하고, 최적화된 고 성능의 스택제작이 가능할 것이다.

## Reference

1. J. S. Yi and T. V. Nguyen, J. Electrochem. Soc, 146, 2178(1999)
2. A.A. Kornyshev, A.A. Kulikovsky, Electrochimica Acta, 46, 4389(2001)
3. S. Dutta, S. Shimpalee, J. Applied Electrochemistry, 30, 135(2000)
4. R. B. Bird, W. E. Stewart, Transport Phenomena, John Wiley & Sons, New York(1960)
5. E. Passalacqua, G. Squadrito, J. Applied Electrochemistry, 31, 449(2001)