

Computational Analysis of Transport Phenomena in a Planar-Type Solid Oxide Fuel Cell with a Simplified Treatment of the Electrochemical Heat Generation

Hoon Cha, Jeong Lak Sohn,[†] and Sung Tack Ro

School of Mechanical and Aerospace Engineering Seoul National University, Seoul 151-742, Korea

(Received November 1, 2005; Accepted November 20, 2005)

전기화학 반응에 의한 생성 열의 단순화된 처리 기법을 이용한 평판형 고체산화물 연료전지 내부의 이동현상에 대한 전산 해석

차 훈 · 손정락[†] · 노승탁

서울대학교 기계항공공학부

(2005년 11월 1일 접수; 2005년 11월 20일 승인)

ABSTRACT

For the performance prediction of a planar-type solid oxide fuel cell, the computational analysis of transport phenomena with a simplified treatment of heat generation by the electrochemical reaction is conducted. From the result of the computational analysis, it is shown that the electrochemical reaction is closely related to the transport phenomena inside a solid oxide fuel cell. Transport phenomena including heat and mass transfer influences on the distribution of local current density and, as a result, on the performance characteristics of the fuel cell. Computational analysis is also extended to the parametric study to investigate the performance behavior of the fuel cell with different amount of supplied fuel flow rates. It is also demonstrated that the mathematical formulation and computational procedures proposed in this study can be applied to prove the importance of the specific TPB area in the manufacturing process of electrodes in solid oxide fuel cells.

Key words : Solid oxide fuel cell, Transport phenomena, Computational analysis, Heat generation, Mass transfer

1. 서 론

수백 °C 이상의 고온에서 작동하는 고체 산화물 연료 전지는 고분자 전해질 연료전지 등의 저온형에 비해서 효율이 높을 뿐만 아니라 내부 개질 반응이 가능하여 수소 이외의 탄화수소 등 다양한 연료의 사용이 가능하다. 또한 저온형 연료전지와는 달리 고가의 촉매 사용이 필요가 없으며, 전기화학 반응에서 발생하는 액체 상태의 물을 처리하기 위한 특수 설비가 필요 없어 시스템을 비교적 단순하게 구성할 수 있다. 그럼에도 불구하고 고체 산화물 연료전지는 고온 작동 특성으로 인하여 초기 시동 시간이 매우 길고, 구성 소재의 특성상 고온 작동 상태에서의 기계적 취약성 때문에 내구성 확보가 어려운 단점이 있다.¹⁾ 최근 들어서는 이러한 문제점들을 해결하기 위하여 전세계적으로 고체 산화물 연료전지의 작동 온도를 낮추기 위한 연구가 활발하게 진행되고 있으며, 특히, 낮

은 작동 온도에서도 높은 효율을 유지할 수 있는 구성 소재의 개발에 관심이 집중되어 있다.²⁾

연료전지의 성능은 연료전지 내부에서의 열 및 물질전달을 포함한 이동현상(transport phenomena)의 특성과 밀접한 관계가 있다. 특히 고체 산화물 연료전지의 경우에는 고온 작동으로 인하여 전극 내부에서의 전기화학 반응에 의해 생성되는 열의 전달 특성이 물질전달과 밀접한 관련이 있고, 궁극적으로 연료전지의 성능에 영향을 미치는 중요한 요인이 된다. 이와 같은 연료전지 내부에서의 열 및 물질전달을 포함한 이송 현상이 연료전지의 성능에 미치는 영향을 자세하게 고찰하기 위해서는 전기화학 반응이 포함된 열유동 현상에 대한 전산해석 기술의 적용이 필요하다. 전산해석 기술을 연료전지와 관련된 문제에 적용하기 위한 연구는 Wang³⁾의 논문에서 조사된 바와 같이 비교적 최근에 들어 널리 진행되고 있으나, 대부분 고분자 전해질 연료전지와 같은 저온형 연료전지에 집중되고 있다.

저온형 연료전지의 경우에는 전극 내부에서의 전기화학 반응으로 인하여 생성된 열이 연료전지의 성능특성에 미치는 영향을 수 처리(water management) 등의 특수한 경우 외에는 무시할 수 있는 반면에 고체 산화물 연료전

[†]Corresponding author : Jeong Lak Sohn

E-mail : jlsohn@snu.ac.kr

Tel : +82-2-880-7434 Fax : +82-2-889-6205

지와 같은 고온형의 경우에는 이를 반드시 고려하여야만 한다. 이를 위해서는 전기화학 반응에 의하여 생성된 열이 이동현상에 미치는 영향과 관련된 물리적 현상을 수학적으로 표현할 수 있는 모델의 정립이 필요하다. 특히, 연료극과 공기극에서의 열의 생성량은 전극 내부에서의 전자와 이온의 전달 특성에 따라 지배를 받으며 이를 위해서는 열전(thermoelectric)현상에 대한 정확한 이해가 필요하다.⁴⁾

본 연구에서는 평판형 고체 산화물 연료전지 내부에서의 열유동 특성과 관련된 선행 연구^{5,6)}의 후속 연구로써, 전극내부에서의 전기화학 반응에 의해 생성된 열을 단순하게 처리할 수 있는 모델을 제안하여 이를 전산해석 과정에 적용시켰다. 선행 연구^{5,6)}에서는 전산해석 영역을 연료 및 공기 공급 유로내부로 국한시켰으며, 이를 위하여 전극 및 전해질 영역에서 생성되는 열을 유로와 전극의 접촉면에서의 경계조건으로 처리하였다. 이 모델은 복잡한 물리적 현상이 발생하는 전극 및 전해질을 전산해석 영역으로부터 배제시킴으로써 계산 과정을 단순화시킬 수 있었으나 3차원 문제에 있어서 연결자(interconnector)에서의 비유로 영역과 접촉된 전극에서의 물리적 현상을 반영하는 데는 한계가 있음을 발견하였다. 본 연구에서는 이를 해결하기 위해서 전극 및 전해질 내부에서의 전기화학 반응과 열 및 물질 전달현상을 반영할 수 있는 새로운 모델을 개발하여 고체 산화물 연료전지 내부의 열유동 특성 고찰을 위한 전산해석 과정에 반영하였다.

2. 물리적 특성 및 수학적 모델링

2.1. 전기화학 반응특성

평판형 고체산화물 연료전지 스택(stack)을 구성하는 단위 전지(unit cell)는 Fig. 1과 같이 6개 영역으로 구분된다. 먼저, 연결자는 전극 및 전해질에서의 전기화학 반응에 의해서 생성된 전자의 흐름을 유도하는 전기 전도체의 역할을 함과 동시에 전극에 연료 및 공기를 공급하고 생성

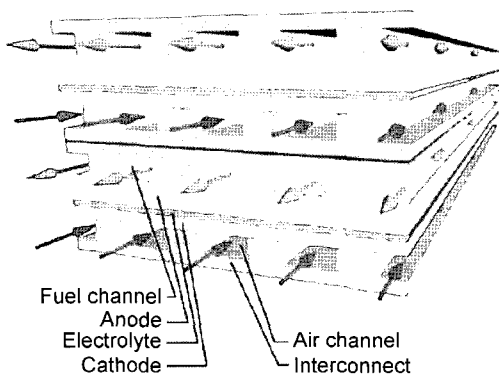
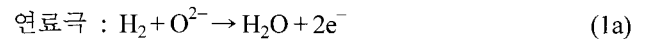


Fig. 1. Schematics of a planar-type solid oxide fuel cell stack.

물질을 배출하기 위한 유로가 설치된 곳이다. 연결자에 설치된 유로를 통하여 공급되는 연료와 공기는 유로의 바닥면에 해당하는 다공성 물질인 전극의 기공(gas pore)으로 스며들게 되며, 전극 내부에서의 이온 전도체와 전자 전도체의 혼합체인 고체 입자와의 경계면인 삼상 계면(TPB : Three-Phase Boundary)에서 전기 화학 반응이 일어나게 된다. 수소를 연료로 사용하는 고체 산화물 연료전지 전극 내부 삼상 계면에서의 전기 화학 반응은 다음과 같다.



위의 반응에서와 같이 연료극의 삼상계면에서 생성된 전자(e^-)는 연료극 내부의 전자 전도체를 따라 연결자를 통하여 인접 단위 전지의 공기극으로 이동하게 된다. 반면에 공기극의 삼상계면에서 생성된 이온(O^{2-})은 공기극 내부의 이온 전도체를 따라 전해질을 통하여 연료극으로 이동하게 된다. 여기서 전해질이란 전자의 이동은 차단하고 이온의 이동만을 허용하는 역할을 담당한다. 연료극의 삼상계면에서 생성된 물은 연료극 기공을 통하여 연료극 연결자 유로로 배출된다.

2.2. 물질전달 특성

연료전지 내부에서의 전기화학 반응을 지배하는 가장 중요한 변수는 공급 연료(수소)의 소모량이며, 이는 아래와 같이 삼상계면의 단위 면적당 전자의 이동 유량에 해당하는 전류밀도에 비례한다.

$$\Delta \dot{n}_{\text{H}_2} = -\frac{j}{2F} A_c \quad (2)$$

위의 관계로부터 전극의 단위체적당 소모되거나 감소되는 물질의 질량은 다음과 같이 유도될 수 있다.

$$\text{연료극} : \dot{\omega}_{\text{H}_2} = -\frac{j}{2F} M_{\text{H}_2}, \quad \dot{\omega}_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{j}{2F} M_{\text{H}_2\text{O}} \quad (3a, b)$$

$$\text{공기극} : \dot{\omega}_{\text{O}_2} = -\frac{j}{4F} M_{\text{O}_2} \quad (3c)$$

위의 식에서 j 는 전극의 단위 체적당 전류를 의미하며, 전류밀도와와의 관계는 아래와 같다.

$$j = a_c i \quad (4)$$

여기서 a_c 는 전극의 단위체적당 전기화학 반응이 일어나는 삼상계면 면적의 비로 정의되는 삼상계면 비면적(specific TPB area)으로 정의되며, 이 값이 클수록 전기화학 반응이 활발함을 알 수 있다.

2.3. 열전달 특성

고온에서 작동하는 고체 산화물 연료전지의 경우 연료 전지 내부에서의 온도 분포 특성이 성능에 영향을 미치는 중요한 요인 중의 하나이다. 특히 전극 및 전해질을 포함한 각 구성부는 작동 온도에 따라 기계적, 전기적 성질이 달라지며, 각 구성부 간의 열팽창계수의 차이는 고온 환경에서의 내구성을 저하 시키는 원인이 되기도 한다.

연료전지에서의 전기화학 반응으로 인하여 생성되는 열은 아래와 같이 (1) 전기화학 반응 과정 중의 엔트로피 변화량의 함수로 표시되는 가역 생성 열과 (2) 전기화학 반응의 활성화(activation)에 의해서 생성되는 열과 전자 및 이온의 이동에 따른 Joule 열 등에 의한 비가역 생성 열의 합으로 나타낼 수 있으며, 이는 또한 공급 연료의 발열량과 생성 전력(셀 전압(V_c)과 전류(I)의 곱)의 차이를 의미한다.

$$\dot{Q} = \dot{Q}_{rev} + \dot{Q}_{irr} = -\Delta\dot{H}_f - \dot{W}_{FC} \quad (5)$$

여기서,

$$\dot{Q}_{rev} = -T\Delta\dot{S} \quad (6a)$$

$$\dot{Q}_{irr} = \eta I + (R_e^- + R_{O_2^-}) I^2 \quad (6b)$$

위의 식에서 가역 생성 열(식6(a))과 비 가역 생성 열(식6(b)) 중 전기화학 반응 활성화에 의한 생성 열(ηI)은 두 전극 내부에서의 삼상계면에서 발생하는 열이다. 반면에, 또 다른 비가역 생성 열에 해당하는 Joule 열은 전극과 전해질에서의 이온의 이동 및 전극과 연결자에서의 전자의 이동에 따라 발생된다. 이와 같이 전기화학 반응에 의해서 생성된 열은 연료전지 모든 부위에서의 열 및 물질전달 과정에 영향을 미치게 되며, 궁극적으로는 연료전지의 성능 특성 및 내구성에 영향을 미치게 된다.

3. 전산해석 방법 및 계산 절차

3.1. 전산해석 방법

평판형 고체 산화물 연료전지 내부에서의 열유동 특성을 고찰하기 위해서는 앞에서 기술한 전기화학 반응에 따른 열 및 물질전달 특성을 고려한 이동현상에 대한 전산해석을 수행하여야 한다. 본 연구에서는 이를 위하여 유한 체적법을 기반으로 하는 열유동 해석 전용 상용 프로그램인 CFD-ACE+를 기본으로 활용하였으며, 전기화학 반응과 관련된 별도의 module을 만들어 이에 접목시켰다.

3.2. 전기화학 반응 생성 열의 처리 기법

연료전지 내부에서의 전기화학 반응에 의한 생성 열을

구하기 위해서는 각 해당 영역에서 식(6)을 정확하게 계산할 수 있어야 한다. 그러나, 이를 위해서는 가역 생성 열의 경우 각 전극에서 전기화학 반응에 따른 이온 및 전자의 이송 엔트로피(transport entropy) 값을 정의하기가 용이하지가 않고, 비 가역 생성 열의 경우에도 전극 내부에서의 전위장(electric potential field)에 대한 정확한 이해와 전기화학 반응의 활성화 에너지량을 정확히 구하여야 한다. 본 연구에서는 이러한 복잡한 계산 과정을 단순화하기 위하여 평판형 고체 산화물 연료전지의 경우 전기화학 반응과 관련된 전극 및 전해질의 두께가 다른 영역에 비하여 매우 얇다는 점에 착안하여 전기화학 반응에 의해 생성된 열이 전해질 두께방향의 중앙부에서 발생한다고 가정하였다. 이때의 생성 열은 식(5) 및 (6)으로부터 구할 수 있으며, 여기에 필요한 셀 전압은 아래와 같이 구할 수 있다.

$$V_c = V_{OC} - r_{cell} i \quad (7)$$

여기서, 개방회로 전압인 V_{OC} 는 온도 및 화학 반응 물질의 분압의 함수로 표현되는 Gibbs 에너지 차의 함수로부터 구할 수 있다.

$$V_{oc} = -\frac{\Delta G^0}{2F} + \frac{RT}{2F} \ln \left[\frac{P_{H_2}/P^0 (P_{O_2}/P^0)^{1/2}}{P_{H_2O}/P^0} \right] \quad (8)$$

그리고, 면적 비 저항(area-specific resistance)과 전류 밀도의 곱인 $r_{cell} i$ 은 전기화학 반응에 의한 활성화 전압손실과 전기적 저항에 의한 전압손실(ohmic loss) 등 연료전지 내부에서의 각종 전압손실의 합을 의미한다. 면적 비 저항 값을 구하기 위해서는 여러 가지의 실험적 모델을 사용할 수 있겠으나 본 연구에서는 아래와 같이 Yakabe 등⁷⁾이 기 보유하고 있던 평판형 고체 산화물 연료전지로부터 실험적으로 구한 성능 특성 곡선인 V-I curve로부터 구한 식을 사용하였다.

$$r_{cell} = \left(\frac{T}{-34 + 1.25 \times 10^6 \exp(-7185/T)} + 0.04 \right) \times 10^{-4} \quad (9)$$

3.3. 계산 절차

평판형 고체 산화물 연료전지 내부에서의 열유동 특성을 고찰하기 위해서 연결자, 연료 및 공기 공급 유로, 연료극 및 공기극, 그리고 전해질을 포함한 전체의 영역을 차별화한 후 위에서 기술한 내용을 바탕으로 하여 다음과 같은 절차로 전산해석을 수행하였다.

(i) 전산 해석 영역을 설정하고 유한체적법 적용을 위한 전산 격자를 구성한다.

(ii) 전해질 중앙 평면상 각 격자 점에서의 두께방향 평균온도와 전해질 상하부 인접 전극 면에서의 해당 물질의

분압으로부터 식(8)을 이용하여 개방 회로 전압을 구한다.

(iii) 면적 비 저항 식(9)를 이용하여 식(7)로부터 전해질 중앙 평면상의 각 격자 점에서의 전류밀도를 구한다.

식(5)로부터 전해질 중앙 평면상의 각 격자 점에서의 전기화학 반응에 의한 생성 열을 구한다.

(v) 식(3)으로부터 전극 내부 각 격자 점에서의 해당 물질의 소모량 및 생성량을 구한다.

(vi) CFD-ACE+을 이용하여 연결자, 연료 및 공기 공급 유로, 연료극 및 공기극, 그리고 전해질을 포함한 전체 영역에서의 각종 보존 방정식으로부터 각 격자점에서의 온도, 해당 물질의 유속 및 질량 분율을 구한다.

(vii) 전체 계산과정이 수렴할 때까지 과정(ii)-(vi)를 반복한다.

위의 계산과정에서 전류밀도는 연료전지의 두께방향으로 일정하다고 가정하였으며, 전극은 다공성 물질로 가정하여 Darcy의 법칙을 적용하였다. 그리고, 연료 및 공기 공급 유로 내부에서의 유동은 층류로 가정하였다.

4. 결과 및 고찰

4.1. 기본 단위전지 작동 조건 및 전산해석 영역

본 연구에서 고찰하고자 하는 고체 산화물 연료전지의 기본 단위전지(reference unit cell)는 Fig. 2(a)에서와 같이 가로와 세로의 길이가 50 mm로 동일한 정방형 평판형으로써 연료와 공기를 공급하기 위한 단면적이 1×1 mm인 미세유로 12개가 각 전극에 인접한 두 개의 연결자 상에 균일한 간격으로 가공되어 있다. 기본 단위전지는 동일한 성능 특성을 가진 여러 개의 단위전지의 적층으로 구성된 연료전지 스택의 중앙부에 위치하고 있다고 가정하여 인접 단위전지의 영향으로 윗면과 아랫면에서 외부로의 열 방출이 없다고 가정하였다.

평판형 연료전지의 특성상 연료 및 공기 공급유로가 동일한 크기로 반복적으로 위치해 있기 때문에 모서리 영역이 아닌 단위전지의 중앙부에 위치한 유로 주변에서의 물리적 특성은 유사하다고 가정할 수 있다. 이러한 가정하에 본 연구에서 채택한 전산해석 영역은 Fig. 2(b)에서와 같이 단위전지의 중앙부에 위치한 유로의 중앙 수직 단면($x = 0.0$ mm)으로부터 유로와 유로 사이 연결자의 중앙 수직 단면($x = 2.0$ mm)까지의 영역과 유로 길이 방향으로 구성된 3차원 직육면체로 설정하였으며, 각 부위의 형상 수치와 소재특성은 Table 1과 같다. 기본 단위전지의 전산 해석 영역에서의 유로 입구 조건은 Table 2와 같으며, 셀 전압은 0.7 V이고 각 전극에서의 삼상계면 비 면적인 a_c 는 8×10^4 m^2/m^3 으로 설정하였다. 또한 연료와 공기는 동일한 온도로 동일한 방향의 평행류(parallel flow)로 공급되고, 공급 연료는 수소와 수증기의 혼합물, 공급 공기는 질소와 산소의 혼합물로 가정하였다.

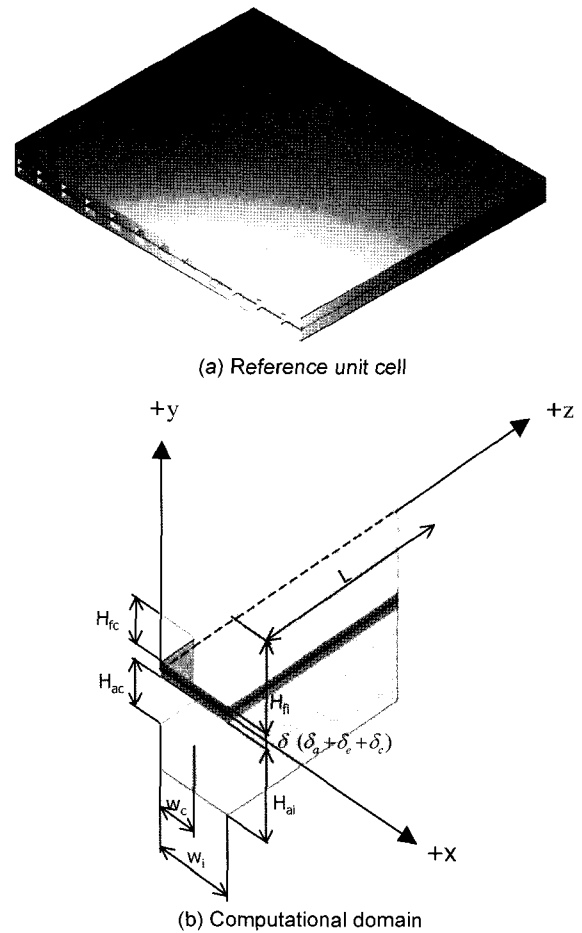


Fig. 2. Reference unit cell and computational domain.

Table 1. Dimensions and Material Characteristics of Components of the Reference Unit Cell

Part name	Dimension (mm)	Material	
Interconnector (Anode)	H_{fi}	2.0	
	H_{fc}	1.0	
	W_i	2.0	
Anode	δ_a	0.1	Li/YSZ
Electrolyte	δ_e	0.1	YSZ
Cathode	δ_c	0.15	LSM/YSZ
Interconnector (Cathode)	H_{ac}	1.0	
	H_{ai}	2.0	
	W_i	2.0	
Fuel flow channel (Anode)	H_{fc}	1.0	N/A
	W_c	1.0	
Air flow channel (Cathode)	H_{ac}	1.0	N/A
	W_c	1.0	

전산해석을 위한 격자 수는 길이방향 199개, 폭 방향 12개, 높이 방향 69개이며, 전체 영역에서의 격자 수는 164,772에 해당된다.

Table 2. Inlet Conditions of Flow Channels of the Reference Unit Cell

Channel	Values	
Fuel flow channel	Flow rate	1000 m ³ /s
	Temperature	923 K
	Mass fraction	0.7 (H ₂), 0.3 (H ₂ O)
Air flow channel	Flow rate	3000 m ³ /s
	Temperature	923 K
	Mass fraction	0.233 (O ₂), 0.767 (N ₂)

4.2. 기본 작동 조건에서의 전산해석 결과

Figs 3~6은 기본 단위전지의 기본 작동 조건(Table 2)에서의 전산해석 결과를 보여주고 있다. 유로 길이방향 중앙 단면에서의 구성 물질의 질량 분율 분포를 나타내는 Fig. 3를 보면, 유로 길이 방향의 하류로 갈수록 수소와 산소의 질량 분율은 감소하는 반면, 물(수증기)은 증가함을 알 수 있다. 또한 유로 내부에서 전극과 인접한 영역에서 수소와 산소는 전극방향으로 질량 분율이 감소하고 물의 경우에는 증가하는데 이는 전극 및 전해질 내부에서의 전기화학 반응에 의한 유로와 전극 사이의 물질전달에 따른 현상이다.

Fig. 4(a)는 기본 단위전지의 전산해석을 통하여 구해진 온도를 전산해석 영역 표면에서 가시화 시킨 것인데, 전반적으로 유로 길이 방향의 하류로 갈수록 온도가 증가함을 알 수 있다. 이는 연료전지 내부에서의 전기화학 반응으로 생성된 열이 유로 내부에서의 작동유체의 유동에 따른 대류 열전달 효과 때문이다. 또한 유로의 길이 방향의 x축 위치에 따른 세 가지 수직 단면에서의 온도 분포(Fig. 4(b))를 보면, 모든 단면에서 전기화학 반응이 일어나는 전극 및 전해질 부분(-0.2 mm < y < +0.15 mm) 이 온도가 가장 높음을 알 수 있다. 그리고, 유로 중앙 단면(x = 0.0 mm)에서는 작동 유체의 유동이 온도에 미치는 영향을 관찰할 수 있는데, 그 중에서도 연료 유로 영역(+0.15 mm < y < +1.15 mm)보다는 공기 유로 영역(-1.2 mm < y < -0.2 mm)에서의 영향이 더 큼을 알 수 있다. 이는 Table 2에서와 같이 공기 공급 유로로 공급된 공기의 유량이 연료 공급 유로로 공급된 연료의 유량보다 상대적으로 더 크기 때문에 과잉 공기 공급에 의한 냉각효과 때문으로 볼 수 있다. 그리고, 두 유로 영역에서는 모두 연결자와 인접한 방향으로 온도가 증가되는데 이는 전극 및 전해질에서 전기화학 반응에 의하여 생성된 열이 유로 영역을 거치지 않고 열전도에 의하여 전극과 인접한 연결자로 전달되기 때문이다. 이는 Fig. 4(b)에서 비유로 단면(x = 1.0 mm, 2.0 mm)에서의 온도가 유로 중앙 단면(x = 0.0 mm)에 비하여 상대적으로 높은 현상을 통해서도 추정 가능하다.

기본 단위전지에서의 온도의 거동을 보다 면밀하게 관

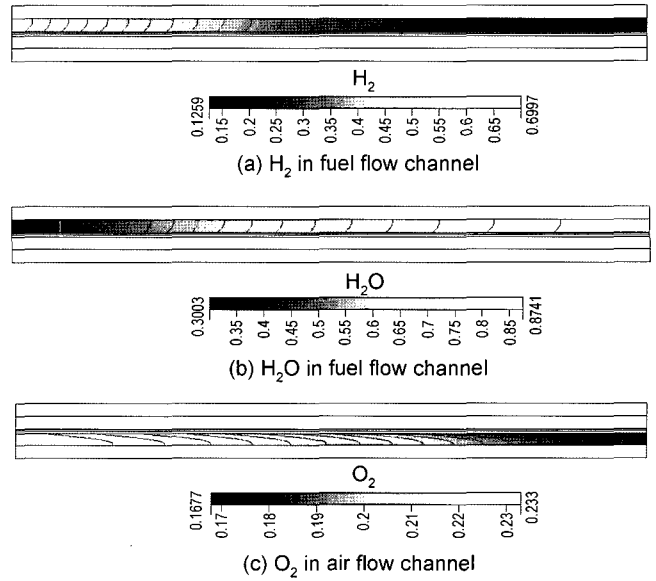


Fig. 3. Distributions of mass fractions of gas compositions in flow channels of the reference unit cell (vertical plane at x = 0.0 mm).

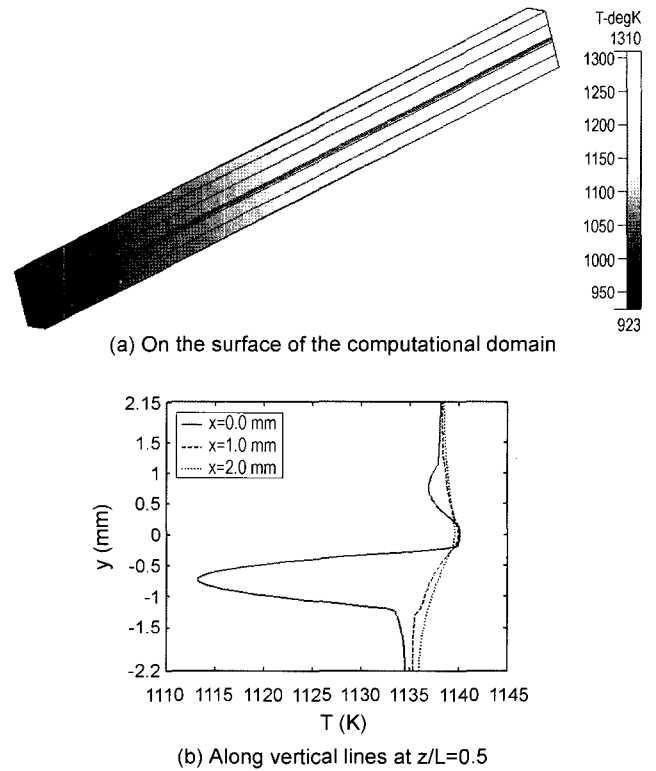


Fig. 4. Temperature distributions in the reference cell.

찰하기 위하여 연결자, 전극 및 전해질로 구성된 고체 영역에서의 유로 길이 방향의 수직 단면들에서의 온도 분포를 Fig. 5에 나타내었다. 여기서도 전반적으로 모든 단면에서 전극 및 전해질 영역에서 최대 온도가 나타나

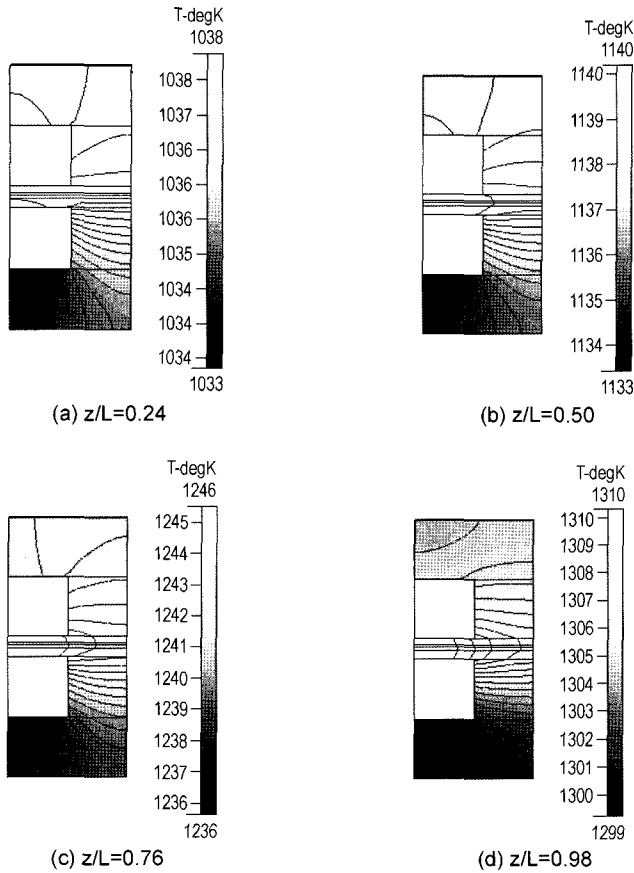


Fig. 5. Temperature distributions in solid parts of the reference unit cell at various cross-sections along the longitudinal direction.

며, 유로 길이방향 하류로 갈수록 온도가 증가함을 알 수 있다. 특히 연료극에 비하여 공기극 연결자에서의 온도가 더 낮는데, 이는 앞서 기술한 바와 같은 공기극 유로에서의 과잉 공기에 의한 냉각 효과에 의한 것으로 판단된다.

본 연구에서 제안된 단순화된 전기화학 반응 처리 기법을 전산해석 과정에 적용하려면 국부 전류밀도(local current density)는 전기화학 반응이 일어나는 전극 및 전해질 내부에서 수직방향(y 방향)으로는 일정하다고 가정하여야 한다. 보다 엄밀하게는 국부 전류밀도는 전극내부에서의 삼상계면의 해당 위치에서 단위면적 당 전기화학 반응에 따른 수소의 소모량으로 정의되어야 하지만 전극과 전해질의 두께가 다른 부위의 형상 수치에 비하여 매우 작은 값이므로 이러한 가정을 타당하게 적용할 수가 있다. 전해질 중앙 수평 단면에서 국부 전류밀도의 분포는 Fig. 6과 같다. Fig. 6(a)에서 전류밀도는 유로와 접한 영역(그림의 윗부분)이 연결자와 접한 영역(그림의 아랫부분)에 비하여 높음을 알 수 있는데, 이는 전기화학 반응에 참여하는 물질들이 유로 영역으로부터 유로와 인접한 전극 면을 통하여 전극 내부로 전달된 후 전극 내부

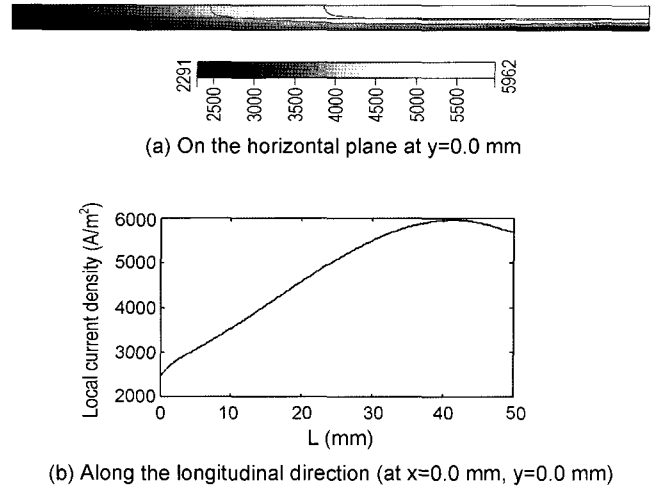


Fig. 6. Distributions of the local current density of the reference unit cell.

의 기공을 통하여 다른 영역으로 확산되어 가기 때문이다. 유로 길이 방향 하류로 갈수록 수평 단면의 직각 방향으로 전류밀도의 구배가 매우 커지는데 이는 유로 내부에서의 작동 유체의 유동에 의한 열 및 물질전달이 전류밀도에 미치는 영향 때문일 것으로 판단된다. 그리고, 전류밀도가 Fig. 6(b)에서와 같이 유로의 길이 방향으로 증가하다가 하류 영역에서는 감소하게 되는데, 이는 이 영역에서의 수소 및 산소의 분율의 감소에 따른 개방회로 전압의 감소 때문이다.

이상의 계산 결과로부터 구한 기본 단위전지의 기본 작동조건에서의 평균 전류밀도는 약 4131 A/m²이며, 셀 전압 0.7 V 조건에서의 출력밀도는 2981.7 A/m²이다. 그리고 공급된 연료 중 전기화학 반응에 소모된 연료량의 비로 정의되는 연료 이용률(Fuel utilization factor)은 41%로 예측되었다.

4.3. 공급 연료 유량의 영향

공기극 유로로 공급되는 공기 유량을 Table 2에서와 같은 기본 작동 조건으로 고정시킨 상태에서 연료극 유로로 공급되는 연료 유량의 변화에 따른 연료 전지 성능특성을 고찰해 본 결과, 공급 연료 유량의 증가가 반드시 전류밀도의 증가를 의미하지 않음을 발견할 수 있었다. 그 이유는 연료극 유로로 공급되는 연료 유량과 유로 바닥면을 통하여 연료극으로 스며들어 전기화학 반응에 소모되는 연료 유량의 차이에 의해서 연료전지 내부에서의 물리적 특성이 달라지기 때문이다. 이와 관련하여, 공급 연료 유량이 단위전지 내부에서의 최대 온도차(ΔT)에 미치는 영향을 나타낸 Fig. 7(a)을 보면 연료 유량이 800 mm³/s 이상이 되면 ΔT 가 작아짐을 알 수 있다. 이는 Fig. 7(b)에서와 같이 공급 연료 유량의 증가에 따라 연료이용률이 줄어들게 되어 전기화학 반응에 소모되지 못한 연료가 유

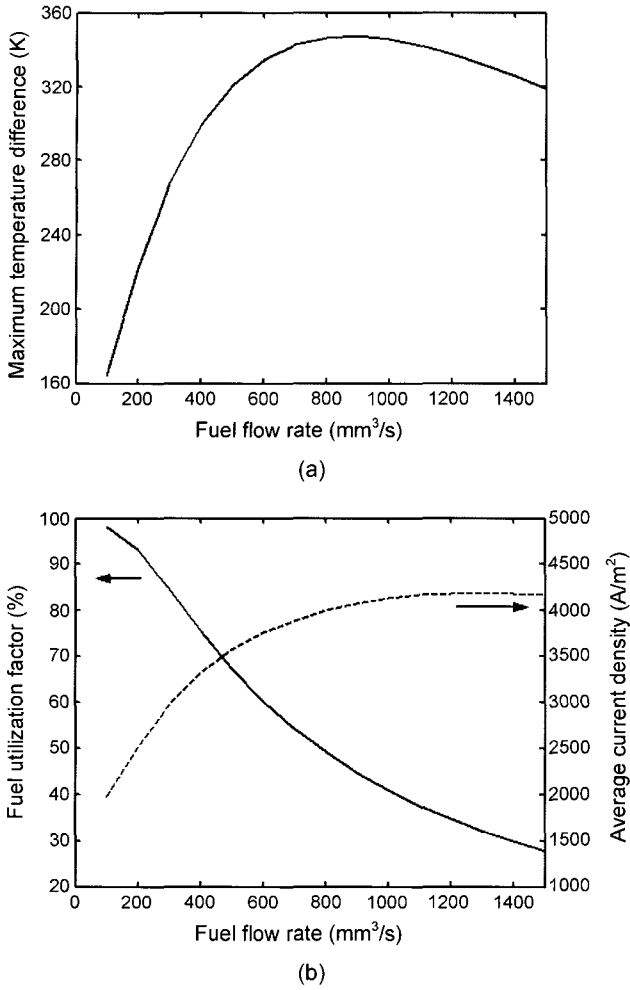


Fig. 7. Influence of fuel flow rates on the performance characteristic of the reference unit cell; (a) maximum temperature difference (ΔT) and (b) average current density and fuel utilization factor.

로 하류 방향으로의 배출에 따른 냉각효과 때문일 것으로 판단된다. 따라서, 평균 전류밀도가 공급 연료 유량의 증가에 따라 비례적으로 증가하지 않고 오히려 조금씩 감소하는 경향(Fig. 7(b)참조)은 공급 연료 유량이 큰 조건에서의 ΔT 의 감소 현상과 밀접한 관련이 있을 것으로 판단된다.

연료이용률이 공급 연료 유량이 증가할수록 감소하는 이유는 연료 유로 내부에서의 유로 길이방향 속도의 증가에 따른 대류 효과로 유로 바닥면에서 전극 내부로의 연료 유량의 물질전달량이 감소하기 때문이다. 또한, Fig. 7(b)로부터 대부분의 공급 연료 유량 조건($1200 \text{ mm}^3/\text{s}$ 이하)에서는 전기화학 반응에 소모되는 연료의 절대적인 양에 비례하는 전류밀도의 값은 증가하더라도, 연료이용률의 감소로 인하여 공급 연료유량 중 상당량이 전기화학 반응에 기여하지 않고 외부로 배출됨을 알 수 있다.

4.4. 전극 내부의 비 삼상계면 면적의 영향

본 연구에서 정리한 연료전지 내부의 이동현상에 대한 수학적 모델에서 정의된 전극 내부의 비 삼상계면 면적인 a_c 의 값을 변화시킴으로써 전극 내부의 삼상계면 면적이 연료전지 성능에 미치는 영향을 분석할 수가 있다. 이 값이 증가할수록 전극 내부에서의 전기화학 반응이 활발

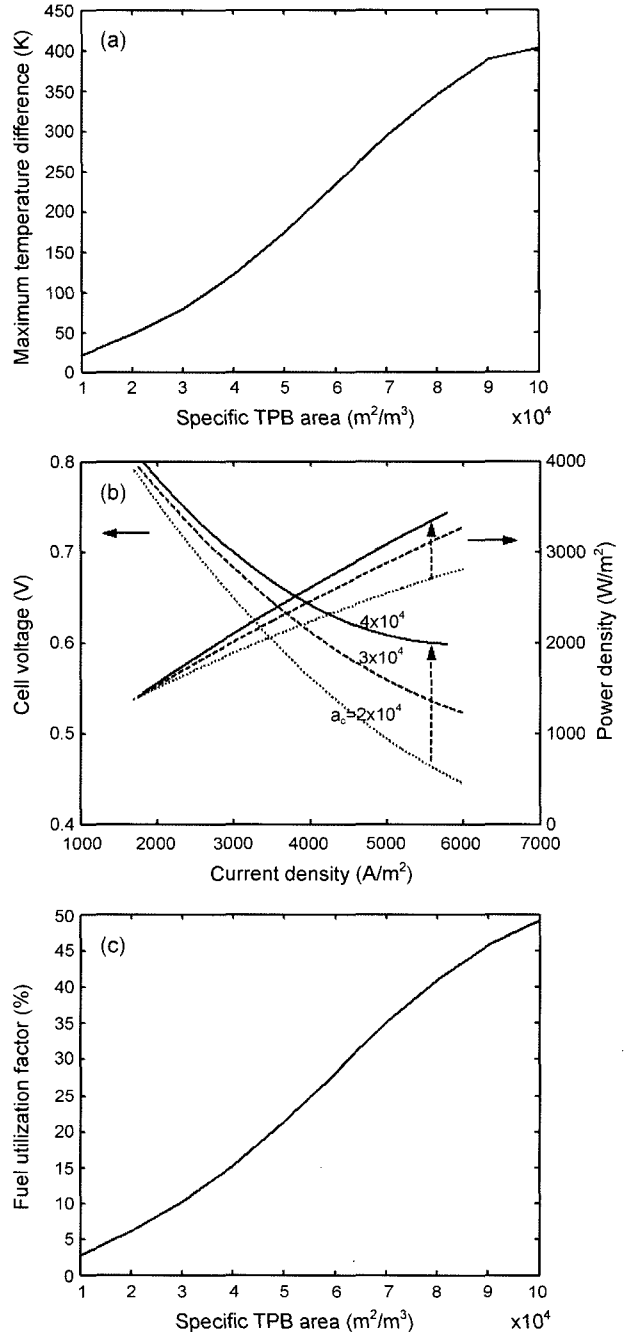


Fig. 8. Influence of specific TPB areas on the performance characteristics of the reference unit cell; (a) maximum temperature difference (ΔT), (b) V-I curve, and (c) fuel utilization factor.

하게 되어 결과적으로 연료전지 내부에서의 길이방향으로 온도가 상승하게 되고, 결과적으로 Fig. 8(a)에서와 같이 단위전지 내부에서의 최대 온도차인 ΔT 가 증가하게 된다. 또한, Fig. 8(b)에서와 같이 삼상계면의 증가는 동일한 셀 전압 조건에서 평균 전류밀도의 상승을 가져오게 되고, 궁극적으로 출력밀도도 증가하게 된다. 뿐만 아니라 연료이용률도 삼상계면 면적의 증가에 따라 증가함을 알 수 있다(Fig. 8(c)참조). 이 결과로부터 연료전지 출력을 증대시키기 위해서는 전극 내부에서의 비 삼상계면 면적을 확대시키는 것이 필수적이며, 이를 위해서는 전극 제조 공정의 고도화를 위한 기술 개발이 지속적으로 필요함을 알 수 있다.

5. 결 론

고체 산화물 연료전지의 성능특성을 해석적으로 고찰하기 위해서는 연료전지 내부에서의 전기화학 반응을 동반한 이송 현상의 물리적 특성을 수학적으로 표현하고, 이를 전산 해석 기술을 적용하여 처리할 수 있어야 한다. 본 연구에서는 이를 위하여 평판형 고체 산화물 연료전지 내부에서의 전기 화학 반응에 의한 생성열과 관련된 복잡한 물리적 현상을 단순하게 처리할 수 있는 기법을 도출하여 열유동 해석 전용 상용 프로그램에 적용시켜 전산 해석을 수행한 결과 아래와 같은 결론을 도출하였다.

1. 기본 작동조건에서의 단위전지에 전산해석 기술을 적용시킨 결과, 연료전지 내부의 전기화학 반응 및 그에 따른 물질 전달 및 온도 분포 특성을 합리적으로 예측할 수 있음을 확인하였다. 특히, 본 연구에서 채택한 기본 작동조건에서는 공기극 내부에서의 대류현상이 연료전지 전체의 냉각 특성을 지배하는 중요한 요인이 될 수 있음을 발견할 수 있었다. 또한, 단위 전지 내부에서의 각 구성부의 특성에 따라 국부적인 이동현상 특성을 고찰할 수 있었으며, 그 결과들이 연료전지의 성능특성과 밀접한 관련이 있음을 알 수 있었다.

2. 공급 연료 유량이 증가하게 되면 전기화학 반응에 소모되는 연료량을 증가시키는 효과로 인하여 연료전지 내부에서의 온도와 전류밀도의 크기가 증가되지만 공급 연료 유량이 일정량 이상으로 증가하게 되면 오히려 감소함을 알 수 있었다. 이는 공급 연료 유량이 매우 클 경우에는 연료이용률의 감소에 따른 연료 유로 하류로 배출되는 연료에 의한 냉각효과 때문인 것으로 판단된다.

3. 전극내의 삼상계면 면적이 증가하게 되면 전기화학 반응의 활성화로 인하여 전류밀도가 증가하게 되며 온도 및 연료이용률이 증가됨을 확인할 수 있었다.

기호 설명

a_c	삼상계면 비면적 [m^2/m^3]
A_c	반응면적 [m^2]
F	Faraday 상수
H	엔탈피 [J]
I	전류 [A]
i	전류밀도 [A/m^2]
j	단위체적 당 전류 [A/m^3]
M	분자량 [$kg/kmol$]
\dot{n}	몰유량 [$kmol/s$]
P	압력 [Pa]
\dot{Q}	열생성량 [W]
r	면적 비저항 [Ωm^2]
R	전기저항 [Ω] 혹은 기체 상수 [J/K]
S	엔트로피 [J/K]
T	온도 [K]
V_c	셀 전압 [V]
V_{oc}	개방회로 전압 [V]
\dot{W}	출력 [J]
x	x-축
y	y-축
z	z-축
η	활성화 전압손실 [V]
\dot{w}	단위 체적 당 물질 생성량 [kg/m^3s]

REFERENCES

1. S. C. Singal and K. Kendall, "High Temperature Solid Oxide Fuel Cells : Fundamentals," *Design and Applications*, Elsevier Ltd. (2003).
2. N. Brandon, "Development of Metal Supported Solid Oxide Fuel Cells Operating at 500-600°C," *Proceedings of the International Workshop on Fuel Cell and Fuel Cell Hybrid Systems*, 15-20 (2004).
3. C.-Y. Wang, "Fundamental Models for Fuel Cell Engineering," *Chemical Reviews*, **104** 4727-66 (2004).
4. U. Pasaogullari and C.-Y. Wang, "Computational Fluid Dynamics Modeling of Solid Oxide Fuel Cells," *Electrochemical Society Proceedings*, **2003-07** 1403-12 (2003).
5. H. C. Hyun, J. L. Sohn, J. S. Lee, and S. T. Ro, "Performance Predictions of the Planar-Type Solid Oxide Fuel Cell with Computational Analysis : (I) Isothermal Model(*in Korean*)," *KSME Journal (B)*, **27** 635-43 (2003).
6. H. C. Hyun, J. L. Sohn, J. S. Lee, and S. T. Ro, "Performance Predictions of the Planar-Type Solid Oxide Fuel Cell with Computational Analysis : (II) Non-Isothermal Model(*in Korean*)," *KSME Journal (B)*, **27** 963-72 (2003).
7. H. Yakabe, T. Ogiwara, M. Hishinuma, and I. Yasuda, "3-D Model Calculation for Planar SOFC," *J. Power Sources*, **102** 144-54 (2001).