

Performance Modeling of Single-Chamber Micro SOFC

Jeong-Hwa Cha, Chan-Yeup Chung, Yong-Chae Chung,[†] Joosun Kim,* Jongho Lee,* and Hae-Weon Lee*

Department of Ceramic Engineering, Hanyang University, Seoul 133-791, Korea

*Nano-Materials Research Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul 136-791, Korea

(Received November 1, 2005; Accepted November 21, 2005)

단실형 마이크로 고체 산화물 연료전지의 작동특성 전산모사

차정화 · 정찬엽 · 정용재[†] · 김주선* · 이종호* · 이해원*

한양대학교 세라믹공학과

*한국과학기술연구원 나노재료연구센터

(2005년 11월 1일 접수; 2005년 11월 21일 승인)

ABSTRACT

Performance of micro scale intermediate temperature solid oxide fuel cell system has been successfully evaluated by computer simulation based on macro modeling. Two systems were studied in this work. The one is designed that the ceria-based electrolyte placed between composite electrodes and the other is designed that electrodes alternately placed on the electrolyte. The injected gas was composed of hydrogen and air. The polarization curve was obtained through a series of calculations for ohmic loss, activation loss and concentration loss. The calculation of each loss was based on the solving of mathematical model of multiphysical-phenomena such as ion conduction, fluid dynamics and diffusion and convection by Finite Element Method (FEM). The performance characteristics of SOFC were quantitatively investigated for various structural parameters such as distance between electrodes and thickness of electrolyte.

Key words : Micro single-chamber SOFC, Computer simulation, Performance characteristics, Polarization curve prediction

1. 서 론

연료 전지는 전기화학적 반응을 통해 화학에너지를 전기에너지로 직접 변환 가능한 시스템이다. 그 중 SOFC는 고온에서 작동되므로 변환 효율이 가장 높으며 가스 터빈과의 결합으로 80% 이상까지 효율을 높일 수 있다. 이러한 장점들로 인해 고정발전설비와 같은 대용량 발전 시스템이나 자동차의 보조전원 등의 용도로 적용될 수 있다. 한편으로 이동형 소형기기에 응용이 가능한 마이크로 SOFC 개발이 시도되고 있으며¹⁾ 고온에서 발생하는 재료의 파괴를 방지하고 재료선택의 범위를 넓힐 수 있는 중온형 SOFC의 개발도 활발히 진행되고 있다. 포터블 기기나 자동차의 보조전력 등에 SOFC가 응용되기 위해서는 초기구동시간을 줄이기 위해 구동온도를 낮추는 것이 중요하다.

최근 Ceria계 물질을 첨가하여 전해질로 사용하거나 전지와 전해질 사이에 촉매 층을 삽입하여 작동온도를 500~700°C로 낮추려는 시도들이 보고되고 있다.³⁻⁶⁾ 또한 SOFC

스택을 구성할 경우 연료와 공기를 분리하여 주입하여야 하는데 이 때에 사용되는 고온 밀봉 재료의 선택문제 때문에 새로운 셀 모델들도 보고되고 있다. 그 중 Hibino의 단실형 모델은 연료와 공기의 혼합가스를 주입함으로써 밀봉재를 필요로 하지 않으며 제작공정을 단순화 시킬 수 있다는 점에서 주목 받고 있다.⁷⁻⁹⁾

SOFC 내부에서 발생하는 현상은 복잡한 다중물리 현상으로 여러 물리화학법칙에 기반을 둔 모델들을 수치적으로 적용함으로써 전기특성을 이론적으로 예측할 수 있다. 이러한 이론적인 접근방법에 기초한 컴퓨터 시뮬레이션을 이용하여 SOFC 내부의 물질전달, 산소이온의 흐름 등을 예상할 수 있으며 이로부터 전지의 특성들을 예측하여 셀 제작과 특성 평가 등에 사용되는 시간과 비용을 절감할 수 있다. 수치적인 SOFC 모델링의 경우 크게 세 가지로 분류할 수 있다. 첫째로 제일원리나 분자동역학을 통한 셀 구성재료의 물성 시뮬레이션,¹⁰⁻¹⁴⁾ 두 번째는 전극내의 삼상계면(Three Phase Boundary, TPB)에서 일어나는 전기화학 반응을 예측하는 미시 모델링(micro modeling),¹⁵⁻¹⁸⁾ 마지막으로 유체의 유동과 확산, 이온의 흐름 등을 연속체 범위에서 계산하여 전압손실을 예측하여 전지의 작동특성을 모사하는 거시 모델링(macro modeling)이 있다.¹⁹⁻²²⁾

[†]Corresponding author : Yong-Chae Chung
E-mail : yongchae@hanyang.ac.kr
Tel : +82-2-2220-0507 Fax : +82-2-2281-5308

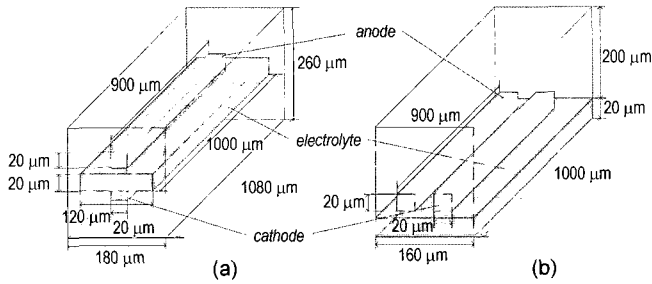


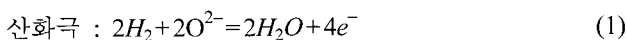
Fig. 1. Schematic diagram of calculation model based on Hinino's; (a) A-type and (b) B-type fuel cell.

본 연구에서는 3차원 유한요소 법(Finite Element Method, FEM)을 이용한 계산을 통하여 전극간격, 전해질 두께, 연료주입방향 등에 따른 단실형 IT-SOFC의 작동특성을 예측하였다.

2. 실험 방법

본 연구에서는 Hibino의 A-type/B-type 단실형 SOFC 시스템^{8,9)}을 사용하여 계산을 수행하였다. 계산에 사용된 모델은 A-type의 경우, 폭 120 μm, 길이 1000 μm, 두께 20 μm인 전해질의 양면에 폭 20 μm, 길이 900 μm, 두께가 20 μm인 전극 층이 평행하게 위치한 구조(Fig. 1(a))로 연료와 공기의 혼합기체는 전해질로부터 폭 방향 30 μm, 길이 방향 40 μm, 전극 위 100 μm 만큼 떨어져 존재하는 가상의 부피로 유입된다고 가정하였다. B-type의 경우, 폭 160 μm, 길이 1000 μm, 두께 20 μm인 전해질의 위에 폭 20 μm, 길이 900 μm, 두께가 20 μm인 전극이 20 μm 간격으로 떨어져 위치한 구조(Fig. 1(b))로 전해질 위 200 μm 에 존재하는 가상의 부피로 혼합기체가 유입된다고 가정하였다.

전해질 층은 기공이 존재하지 않는 치밀한 구조로 가스가 통과할 수 없으며 NiO-Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{1.95}(Ni-GDC)로 구성된 산화극 층과 Sm_{0.5}Sr_{0.5}CoO₃-10%Sm₂Ce_{0.8}O_{1.9}(SSC-10SDC)로 구성된 환원극 층은 전기전도성과 이온전도성을 동시에 지니는 복합 전도성 전극물질로 내부는 100 nm의 지름을 가지는 기공들로 균일하게 분포되어 있다고 가정하였다. 또한 연료의 산화반응은 산화 극에서만 나타나며 산소의 환원반응은 환원 극에서만 나타난다고 가정하였다. 기존연구에서는 산화와 환원반응이 일어나는 삼상계면(TPB)을 전극과 전해질의 계면으로 가정하였으나²¹⁾ 본 연구의 경우 전극 층의 두께가 20 μm로 일반적인 TPB 층인 50 μm보다 작으므로 전극전체를 통하여 전기화학반응이 일어난다고 설정하였다. 각 전극에서 일어나는 반응은 다음과 같다.



혼합기체는 수소, 질소, 산소, 수증기가 혼합된 기체이며 773 K 등온상태를 가정하여 이온전도와 유체의 이동, 확산 현상에 대한 계산을 수행하였으며 유한요소 계산을 위해 FEMLAB v3.1을 사용하였다. 계산된 결과를 이용하여 이론적인 Open Circuit Voltage(OCV)에서 각 손실(Loss)들의 합을 뺀 값으로부터 전류밀도에 따른 작동전압을 계산하였다.

2.1. OCV 구하기

이론적인 OCV 값은 Nernst 방정식에 의해 구한다. 전극반응을 통하여 총 두 개의 전자가 발생하므로 아래 식을 통하여 OCV 값을 구할 수 있다.²³⁾

$$E = -\frac{\Delta \bar{g}_f}{2F} \tag{3}$$

773 K에서 SOFC 전기화학 반응의 Gibbs 자유에너지는 -219.050 KJ/mol이다.

2.2. Ohmic Loss

전해질과 전극 내부를 통과하는 산소이온의 이동과 전극내부에서의 전자의 이동에 의해 ohmic loss가 발생한다. 전극에서 전자의 이동은 산소이온의 이동보다 매우 빠르므로 본 연구에서는 전자의 이동에 의한 손실을 고려하지 않았으며 전도는 전극과 전해질 전체를 통하여 이루어진다고 가정하였다. 앞서 발표된 논문들의 실험결과 값을 이용하여 Table 1에서 나타난 773 K 전극²⁴⁾과 전해질 내부²³⁾에서의 산소이온의 전도도를 구하고 식(4)를 이용해 포텐셜 값을 얻었다.

$$-\nabla \cdot (\sigma \nabla V) = 0 \tag{4}$$

산화 극 표면으로 양전하를 띠는 산소공공이 들어가고 환원 극 표면으로 나오게 되는 경계조건을 사용하였으며 가스채널과 셀 사이는 절연상태(insulation)로 고려하였다.

2.3. Activation Loss

전극 내부에서 전기화학반응이 일어나 전자가 방출되기 위해서는 전기적 에너지 장벽을 넘어야 하는데 이를 극복하는 과정에서 activation loss가 생기게 되고 이는 일반적으로 온도, 연료, 전극물질, 산소 분압 등에 의해 영향을 받는다. 저온의 경우 고온에서보다 전기화학 반응에 의한 전자의 방출, 이동이 원활하지 못하므로 전자 이동

Table 1. Conductivity (S/m) of Electrode and Electrolyte

Anode (Ni-GDC)	0.90
Electrolyte (YSZ)	0.95
Cathode (SSC-10SDC)	0.1433

에 의한 activation loss의 영향이 더 중요해진다. 식(5)의 Butler-Volmer 식은 전류밀도와 activation overpotential 간의 관계를 잘 나타내주고 있다.

$$i_e = i_0 \left[\exp\left(\alpha_a \frac{FV_{act}}{RT}\right) - \exp\left(-\alpha_c \frac{FV_{act}}{RT}\right) \right] \quad (5a)$$

$$\alpha_a + \alpha_c = 1 \quad (5b)$$

교환전류밀도 값은 앞서 연구된 Zhu와 Kee의 연구결과를 참고하였으며 식(5)의 수치적인 해를 얻기 위해 Newton-Raphson법을 사용하였다.²⁶⁾

2.4. Concentration Loss

Concentration loss는 가스채널과 TPB 사이에서의 가스의 농도 차이에 의해 발생한다. 이전의 연구에서는 전극과 전해질 사이의 계면을 TPB로 가정하고 전극내부에서의 유체 속도를 0으로 가정하였으나²¹⁾ 본 연구에서는 전극전체를 TPB로 설정하였고 전극내부에서의 대류성 확산(convective diffusion)도 고려하기 위해 속도를 계산하였다. 확산과 대류를 동시에 고려하기 위해서 채널영역에서 정상상태 Navier-stokes 방정식을 이용하여 유체의 속도를 구한다음 전극내부에서 Darcy's law를 이용하여 압력분포와 유동의 속도분포를 계산하였다. 식의 계산에 사용된 혼합 기체는 $H_2:O_2:N_2:H_2O=0.5:0.105:0.38:0.0105$ 로 구성되어 있으며, 유입되는 기체의 양은 180 sccm으로 설정하였다.

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) - \nabla \eta (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T + \nabla P) = 0 \quad (6a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6b)$$

식(6)에 쓰인 밀도(ρ)와 점도(η)는 이상기체 상태방정식을 이용하여 계산하였다. 가스 주입 면에서의 초기 가스주입 속도는 42.47 m/s로 설정하였고 가스 유출 면에서의 압력은 1 atm으로 설정하였다. 유체와 만나는 전극과 전해질의 표면을 속도가 0인 no-slip 조건을 적용하였다.

다공성 전극 내부에서의 압력분포와 속도분포를 구하기 위해서 Darcy's law를 이용하였다.

$$\nabla \cdot \left(-\frac{k}{\eta} \nabla P \right) = 0 \quad (7)$$

투과도(k)는 식(8)과 같이 정의되며 값이 작을수록 기공에 의한 표면적이 크다는 것을 의미한다. 본 계산에서는 투과도를 $1.0 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ 으로 가정하였다.

$$k = \left(\frac{\text{volume}}{\text{surface area}} \right)^2 \quad (8)$$

전해질은 기체를 통과시키지 않는다고 가정하였으므로 전해질과 전극 계면에서 수직한 가스의 입사량을 0으로 가

정하였고 전극표면에서의 압력조건을 설정하기 위해 앞의 Navier-Stokes 식에서 구한 압력 값을 사용하였다.

앞서 구한 식(4)-(7)의 결과를 이용하여 Fick's law를 기반으로 한 정상상태 확산과 대류(diffusion and convection) 식을 계산하여 최종적으로 전극내부에서의 반응물과 생성물의 농도분포를 구하였다.

$$\nabla \cdot (-D_i \nabla c_i + c_i \mathbf{u}) = R \quad (9)$$

채널과 전극에서의 확산계수는 Lennard-Jones Potential을 기본으로 한 Hirschfelder 모델에 의해 구하였다.²⁶⁾ 단, 전극내부의 기공의 지름이 100 nm로 균일하다고 가정하였을 때 $1.7 \leq K_n \leq 3.5$ 값을 보이므로 전극내부에서 가스의 확산을 실제에 가깝게 묘사하기 위해서 Knudsen 확산을 고려하였다. 또한, 전극내부에서 다양한 반경을 가지는 기공들이 서로 연결되어 있어 기체의 확산경로가 구불구불하게 되는 실제 기공의 형태와 유사하게 하기 위해 tortuosity factor가 1.5인 Bruggeman 모델²⁶⁾을 사용하였다. 전기화학반응에 의해 전극 내에서 소멸되고 생성되는 가스의 양을 알기 위해 체적반응속도(volumetric reaction rate)를 정의하였다.

$$R_i = \pm \frac{v_i i_e}{4F} \times \text{area of reaction site} \times \frac{1}{\text{electrode volume}} \times M_i \quad (10)$$

R_i 는 반응물일 경우 (-)이며 생성물일 경우 (+)로 나타내며 v_i 는 화학양론 비 계수로서 $v_{H_2} = v_{H_2O} = 2$, $v_{O_2} = 1$ 로 주어진다. 반응면적(Area of Reaction Site, ARS)는 투과도를 이용하여 구할 수 있다. 각 기체의 밀도와 유입량으로부터 입사되는 면으로의 물질 유동을 계산하고 기체가 빠져나가는 면에서는 대류적 확산 조건을 설정하였다. 전해질과 채널의 계면에서는 물질이동이 없다고 가정하였다. 확산방정식을 풀어 얻은 농도로부터 concentration loss를 구하였다.¹⁹⁾

$$V_{con,a} = \frac{RT}{4F} \left(2 \ln \frac{[H_2]_{channel}}{[H_2]_{TPB}} - 2 \ln \frac{[H_2O]_{channel}}{[H_2O]_{TPB}} \right) \quad (11)$$

$$V_{con,c} = \frac{RT}{4F} \left(\ln \frac{[O_2]_{channel}}{[O_2]_{TPB}} \right) \quad (12)$$

3. 결과 및 고찰

전극과 전해질의 크기가 같은 각 타입 별 전류밀도에 따른 손실(loss) 변화를 Fig. 2에 나타내었다. 그림에서 볼 수 있듯이 Hibino의 A-type과 B-type 모두 전극과 전해질 간의 이온전도에 따른 ohmic loss가 가장 크게 나타났다. 이는 다른 종류의 SOFC에서와 마찬가지로 대부분의 전

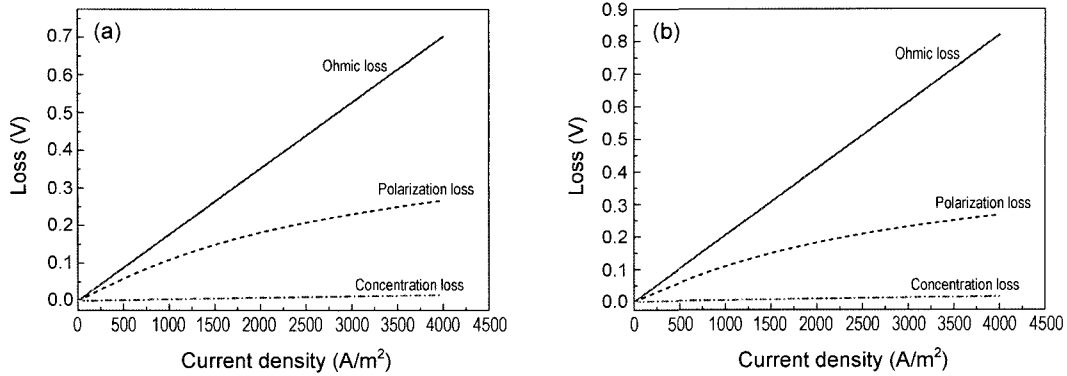


Fig. 2. Calculated losses as current density variation; (a) A-type and (b) B-type.

압 손실은 전극과 전해질 내부에서의 산소이온의 이동과 확산에 기인하는 것으로 μ SOFC에서도 역시 이온 전도가 가장 큰 영향을 미치는 것을 알 수 있다. 반면에 activation loss, concentration loss는 상대적으로 작게 나타났으며 특히 전류밀도가 4000 A/m^2 일 때 A-type에서 ohmic loss가 concentration loss의 45배, B-type에서는 74배 큰 것으로 나타났다. 전극과 전해질 사이의 전기화학반응에 따른 활성화 에너지와 교환전류밀도 값을 고려하는 activation loss의 경우 각 타입 별 차가 없었으며 다른 형태의 SOFC와는 달리 본 실험에서 사용한 모델에서는 전극부피 전체를 삼상계면으로 가정하였으므로 채널과 삼상계면내의 농도차가 적어지기 때문에 유체의 농도 차로 인한 concentration loss 부분 또한 두가지 타입 모두 매우 적게 나타났다.

전지 작동전압은 이론적으로 구한 OCV에서 각각의 손실(loss) 항들을 차감한 값으로 구할 수 있으며 각각의 전류밀도 변화에 따른 작동전압을 곱하면 전력밀도 값을 알 수 있다. Fig. 3은 A-type과 B-type에서의 전해질 두께 변화에 따른 작동전압과 출력밀도를 나타낸 것이다. 앞선 실험들에서^{7,9)} 나타난 바와 같이 A-type SOFC의 경우 B-type 보다 작동전압과 출력밀도가 높게 나타났다. 산소이온의 이동거리가 B-type 내에서는 전극 간 거리 \leq path length \leq 전극 + 전극 간 거리 인 반면 A-type의 경우 어느

지점에서나 항상 전극간 거리로 일정하게 되므로 같은 거리의 전극간 거리(A-type의 경우 전해질 두께)에서 A-type에서의 산소이온의 이동거리가 B-type 보다 짧아지므로 위와 같은 양상을 보이게 된다. A-type의 경우 전해질 두께가 증가할수록 출력밀도가 낮아지는데 이는 전해질 두께가 증가함에 따라 산소이온의 이동거리가 길어져 ohmic loss 항이 증가하기 때문이다. 반면에 B-type의 경우 전해질의 두께가 증가함에 따라 출력밀도가 높아지는데 이는 B-type의 경우 특정(약 $80 \mu\text{m}$) 두께 까지는 두께가 증가할수록 ohmic loss가 계속 감소하기 때문이다. $80 \mu\text{m}$ 이상에 대해서도 계산을 수행하였으나 더 이상의 손실(loss) 감소는 나타나지 않았다. 이는 전해질의 일정 깊이 내에서 산소이온 전도가 이루어지기 때문이라고 볼 수 있다.

Fig. 4는 B-type에서 환원극과 산화극간의 거리를 변화시키며 손실(loss)을 계산한 분극 곡선이다. A-type에서 전해질 두께가 감소할수록 즉, 전극간 거리가 감소할수록 작동전압이 높게 나타났듯이 B-type에서도 전극간 거리가 감소할수록 작동전압이 높게 나타나는데 이는 A-type에서와 마찬가지로 전극간격이 좁아질수록 산소이온이 이동하는 거리가 감소되므로 전해질을 통과하는 산소이온의 흐름이 원활해져 손실(loss) 중 가장 큰 값을 차지하는 ohmic loss 항이 감소하기 때문이다. 그러나 실제 실험의

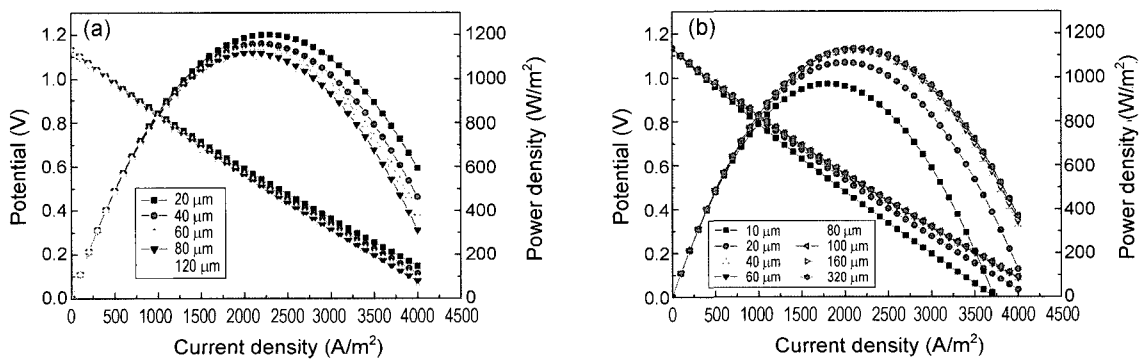


Fig. 3. Polarization curve as variation with electrolyte thickness; (a) A-type and (b) B-type.

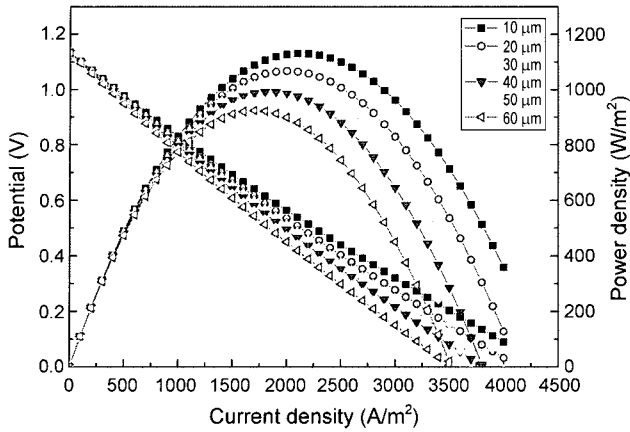


Fig. 4. Polarization curve as variation in the distance between two electrodes.

경우, B-type에서는 전극 간 반응물 혼합이 발생하여 실제적으로 OCV 강하가 일어나게 되며 이 영향은 전극간 간격이 좁아질수록 더욱 커질 것으로 예상된다.

4. 결 론

거시 모델링을 기반으로 한 단일형 μ SOFC(Hibino의 A-type, B-type) 내의 다중물리 현상 전산모사를 통하여 이온전도, 유체역학, 기체확산 등을 고찰하였다. 전해질의 두께, 전극 간의 거리에 따라 셀의 작동 특성이 상이하게 나왔으며 특히 ohmic loss의 변화가 큰 영향을 미치는 것으로 나타났다. A-type의 경우 전해질 두께가 증가할수록 ohmic loss가 증가하였으며 B-type에서는 특정 두께까지 ohmic loss가 감소하다가 그 이상에서는 거의 변화가 없는 모습을 보였다. 또한 B-type의 경우 산화극(Anode)과 환원극(cathode) 간의 거리가 좁을수록 ohmic loss가 작아졌다. 따라서 stack 구성 시 A-type과 B-type의 서로 다른 모델에 대해 변수의 변화에 따른 특성이 다르게 나타나는 것을 고려하고 전극 배치와 전해질 두께를 조절하여 ohmic loss를 최소화 하는 시스템 디자인이 필요할 것으로 예상된다.

Nomenclature

c_i	concentration of species i (kg m^{-3})
D_i	diffusivity of species i ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
F	Faraday constant (C mol^{-1})
Δg_f	Gibbs free energy (KJ mol^{-1})
$[i]_{\text{channel}}$	concentration of species at the gas channel (mol m^{-3})
i_e	current density (A m^{-2})
i_0	exchange current density (A m^{-2})

$[i]_{TPB}$	concentration of species i at three phase boundary (mol m^{-3})
M_i	molar weight of species i (kg mol^{-1})
R	gas constant ($\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$)
R_i	volumetric reaction rate of species i ($\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$)
T	temperature (K)
\mathbf{u}	velocity vector (m s^{-1})
ν_i	stoichiometric coefficient of species i
V	voltage (V)
$V_{\text{con},a}$	concentration loss in anode (V)
$V_{\text{con},c}$	concentration loss in cathode (V)

Greek Letters

α_a	charge transfer coefficient at anode
α_c	charge transfer coefficient at cathode
η	dynamic viscosity (Pa s)
k	permeability (m^2)
ρ	density (kg m^{-3})
σ	conductivity (S m^{-1})

REFERENCES

1. M. Lockett, M. J. H. Simmons, and K. Kendall, "CFD to Predict Temperature Profile for Scale Up of Micro-Tubular SOFC Stacks," *J. Power Sources*, **131** 243-46 (2004).
2. J. P. P. Huijsmans, F. P. F. Van Berkel, and G. M. Christie, "Intermediate Temperature SOFC-a Promise for the 21st Century," *J. Power Sources*, **71** 107-10 (1998).
3. K. Choy, W. Bai, S. Charojrochkul, and B. C. H. Steele, "The Development of Intermediate-Temperature Solid Oxide Fuel Cells for the Next Millennium," *J. Power Sources*, **71** 361-69 (1998).
4. J. M. Ralph, A. C. Schoeler, M. Krumpelt, and J. Mater, "Materials for Lower Temperature Solid Oxide Fuel Cells," *Science*, **36** 1161-72 (2001).
5. B. C. H. Steele, "Materials for IT-SOFC Stacks 35 Years R&D : The Inevitability of Gradualness?," *Solid State Ionics*, **143** 3-20 (2000).
6. T. Hibino, A. Hashimoto, T. Inoue, J.-I. Tokuno, S.-I. Yoshida, and M. Sano, "A Low-Operating Temperature Solid Oxide Fuel Cell in Hydrocarbon-Air Mixture," *Science*, **288** [16] 2031-33 (2000).
7. T. Hibino, H. Tsunekawa, S. Tanimoto, and M. Sano, "Improvement of Single-Chamber Solid-Oxide Fuel Cell and Evaluation of New Cell Designs," *J. Electrochem. Soc.*, **147** 1338-43 (2000).
8. T. Hibino, A. Hashimoto, T. Inoue, J.-I. Tokuno, S.-I. Yoshida, and M. Sano, "Single-Chamber Solid Oxide Fuel Cells at Intermediate Temperatures with Various Hydrocarbon-Air Mixture," *J. Electrochem. Soc.*, **147** 2888-92 (2000).
9. T. Hibino, S. Wang, S. Kakimoto, and M. Sano, "One-

- chamber Solid Oxide Fuel Cell Constructed from a YSZ Electrolyte with a Ni Anode and LSM Cathode," *Solid State Ionics*, **127** 89-98 (2000).
10. H. Inaba, R. Sagawa, H. Hayashi, and K. Kawamura, "Molecular Dynamics Simulation of Gadolinia-Doped Ceria," *Solid State Ionics*, **122** 95-103 (1999).
 11. M. S. Khan, M. S. Islam, and D. R. Bates, "Cation Doping and Oxygen Diffusion in Zirconia : A Combined Atomistic Simulation and Molecular Dynamics Study," *J. Mater. Chem.*, **8** 2299-307 (1998).
 12. Y. Yamamura, S. Kawasaki, and H. Sakai, "Molecular Dynamics Analysis of Ionic Conduction Mechanism in Yttria-Stabilized Zirconia," *Solid State Ionics*, **126** 181-89 (1999).
 13. T. P. Perumal, V. Sridhar, K. P. N. Murthy, K. S. Easwarakumar, and S. Ramasamy, "Molecular Dynamics Simulations of Oxygen ion Diffusion in Yttria-Stabilized Zirconia," *Physica A*, **209** 35-44 (2002).
 14. A. S. Ioselevich and A. A. Kornyshev, "Phenomenological Theory of Solid Oxide Fuel Cell Anode," *Fuel Cells*, **1** 40-65 (2001).
 15. S. H. Chan and A. T. Xia, "Anode Micro Model of Solid Oxide Fuel Cell," *J. Electrochem. Soc.*, **148** A388-94 (2001).
 16. M. Ihara, T. Kusano, and C. Yokoyama, "Competitive Adsorption Reaction Mechanism of Ni/Yttria-Stabilized Zirconia Cermet Anodes in H₂-H₂O Solid Oxide Fuel Cells," *J. Electrochem. Soc.*, **148** A209-19 (2001).
 17. X. J. Chen, S. H. Chan, and K. A. Khor, "Simulation of Composite Cathode in Solid Oxide Fuel Cells," *Electrochimica. Acta*, **49** 1851-61 (2004).
 18. H. Zhu and R. J. Kee, "A General Mathematical Model for Analyzing the Performance of Fuel-Cell Membrane-Electrode Assemblies," *J. Power Sources*, **117** 61-74 (2003).
 19. E. H. Racheo, D. Singh, P. N. Hutton, N. Patel, and M. D. Mann, "A Macro-Level Model for Determining the Performance Characteristics of Solid Oxide Fuel Cells," *J. Power Sources*, **138** 174-86 (2004).
 20. R. Suwanwarangkul, E. Croiset, M. W. Fowler, P. L. Douglas, E. Entchev, and M. A. Douglas, "Performance Comparison of Fick's, Dusty-Gas and Stefan-Maxwell Models to Predict the Concentration Overpotential of a SOFC Anode," *J. Power Sources*, **122** 9-18 (2003).
 21. T. Ackmann, L. G. J. de Haart, W. Lehnert, and D. Stolten, "Modeling of Mass and Heat Transport in Planar Substrate Type SOFCs," *J. Electrochem. Soc.*, **150** A783-89 (2003).
 22. J. Larminie and A. Dicks, "Fuel Cell Systems Explained," Second Ed., pp. 35-42, Wiley, 2003.
 23. B. C. H. Steele, "Appraisal of Ce_{1-y}Gd_yO_{2-y/2} Electrolytes for IT-SOFC Operation at 500°C," *Solid State Ionics*, **129** 95-110 (2000).
 24. C. Xia, W. Rauch, F. Chen, and M. Liu, "Sm_{0.5}Sr_{0.5}CoO₃ Cathodes for Low-Temperature SOFCs," *Solid State Ionics*, **149** 11-9 (2002).
 25. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, "Numerical Recipes in C," Second Ed., pp. 362-67, Cambridge University Press, 1992.
 26. J. R. Welty, C. E. Wick, R. E. Wilson, and G. Rorrer, "Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer," Fourth Ed., pp. 431-44, Wiley, 2001.