

## 탄소연료를 이용하는 고체 산화물 연료전지의 연료극 반응 수치해석

임 호\* · 김종필\* · 송주헌\*\* · 장영준\*\* · 전충환\*\*†

\*부산대학교 기계공학부 대학원, \*\*부산대학교 기계공학부  
(2010년 8월 21일 접수, 2010년 9월 18일 수정, 2010년 9월 18일 채택)

### Numerical Modeling of Anodic Reaction of Carbon-Rich Fuel at Solid Oxide Fuel Cell

Ho Lim\*, Jong-Pil Kim\*, Ju-hun Song\*\*, Young-june Chang\*\*, and Chung-hwan Jeon\*\*†

\*Graduate School of Mechanical Engineering, Pusan National University,

\*\*School of Mechanical Engineering, Pusan National University

(Received 21 August 2010, Revised 18 September 2010, Accepted 18 September 2010)

#### 요 약

DCFC는 가스 터빈이나 엔진과 달리 탄소를 사용하여 전기화학반응을 통해 직접 전기를 생산하는 연료전지이며, 주요 특징으로 기존의 발전설비 보다 높은 효율과 낮은 배기 배출물을 발생한다. 본 연구에서는 간단한 열역학 평형 해석을 통해 CO와 CO<sub>2</sub>가 이론 기전력에 미치는 영향을 확인하였으며, 2차원 CFD 해석 방법을 이용하여 온도에 따른 반응 생성물 변화를 살펴보았다. 그 결과, CO 생성 반응(Boudouard 반응)을 동시에 고려한 이론 기전력 값은 CO<sub>2</sub> 생성 반응만 고려한 값(약 1.02 V)보다 크며, 특히 온도가 증가할수록 그 값이 증가함을 보여주었다. 2차원 수치해석 결과를 통하여서 Boudouard 반응이 고온으로 갈수록 중요하며, 비활성 기체로 인하여 Boudouard 반응이 지연됨을 확인하였다.

**주요어** : 직접탄소연료전지, 탄소, Boudouard 반응, 이론기전력, 전산유체역학

**Abstract**—Direct Carbon Fuel Cell(DCFC), unlike gas turbines or engines, is a kind of fuel cell which directly generates electricity by electrochemical reaction from a carbon fuel. The advantages of DCFC are higher efficiency and lower emission in comparison with existing power generation facilities. In this study, the effects of CO and CO<sub>2</sub> on theoretical potential are examined using the thermodynamic equilibrium method, and the dependence of product on operating temperature is examined via two dimensional CFD method. As a result, when the reaction of CO production (Boudouard reaction) considered, theoretical potential is higher than that in only CO<sub>2</sub> reactions, and its value increases as temperature increases. Two dimensional results of computational fluid dynamics(CFD) confirm that the Boudouard reaction becomes more important to be considered as temperature increases and inert gas affects the equilibrium composition of the Boudouard reaction.

**Key words** : Direct Carbon Fuel Cell(DCFC), Carbon, Boudouard Reaction, Theoretical potential, Computational Fluid Dynamics(CFD)

†To whom correspondence should be addressed.

Energy Conversion System Lab. School of Mechanical Engineering,  
Pusan national University Gijeingwan 30 San Jangjeondong,  
Geumjeong-Ku, Busan, 607-735, Korea  
E-mail : chjeon@pusan.ac.kr

## 1. 서 론

연료전지는 공기와 연료가 전기화학적 반응을 통하여 다른 부가적인 장비 없이 직접 전기를 생산할 수 있는 에너지 변환 장치로 에너지 이용 효율이 높고, 소음 및 공해물질 배출량이 적다는 점에서 차세대 전력 생산 방법으로 각광받고 있다 [1-3]. 연료전지는 동작온도에 따라 저온형과 고온형으로 나뉘며, 사용되는 전해질의 종류에 따라 알칼리 연료전지(AFC), 고분자 전해질 연료전지(PEMFC), 용융 탄산염 연료전지(MCFC), 고체 산화물 연료전지(SOFC) 그리고 직접탄소 연료전지(DCFC)로 또한 나누어질 수 있다 [4].

DCFC는 고온형 연료전지인 MCFC, SOFC의 원리와 유사하다. 그러나 이들이 기체의 수소를 연료로 사용하는 것과 달리 DCFC는 고체의 탄소(탄소)를 연료로 사용한다. 연료로 사용되는 탄소는 고온에서 연료극 표면에서 직접 전기화학반응을 일으켜 전기를 발생한다. DCFC는 다음과 같은 특징들이 있다. 첫째로 MCFC나 SOFC에 비해 높은 이론 효율을 가지며, 그 효율은 100%까지 도달한다. 두 번째로 석탄 화력 발전 시설에 비해 낮은 배기물을 배출한다. 석탄, 석유, 바이오매스 등 탄소를 포함하고 있는 다양한 자원을 연료로 사용할 수 있으며, 개발되는 수소 연료전지와 달리 개질기가 필요 없기에 장치의 구현이 다른 연료전지에 비해 간단하다 [5]. 또한 Cooper 등 [6,7]은 DCFC가 화력 발전 시설에 비해 약 50%의 탄소 배출물 감소 효과가 나타날 것으로 예상하였다.

현재 DCFC는 미국, 중국 등 석탄의 매장량이 풍부한 국가 중심으로 연구가 진행되고 있다. 한국에서는 Graphite를 연료로 원통 형태의 DCFC 기초 특성 실험이 이미 완료 되었다 [8]. 실험 조건은 작동온도를 650°C에서 950°C로 증가시키면서 연료전지의 성능을 평가하였으며, 그 결과로 950°C에서 1.115 V를 얻었다. 이를 바탕으로 실험 결과와의 검증에 위해 이론 해석의 DCFC 연구가 필요하다.

기존 이론 해석 연구로는 용융염 탄산염 전해질을 사용하는 DCFC의 모델링 및 그에 따른 해석이 이루어졌다 [9]. 이는 MATLAB를 이용하여 탄소의 크기 및 작동온도에 따른 성능을 예측하였다. 그러나 이는 CO에 대한 반응을 고려하지 않았다.

따라서 본 연구에서는 고체 산화물 전해질의 DCFC에서 CO의 생성 반응(Boudouard 반응)을 포함하였을 경우 온도에 따른 이론 기전력 계산과 화학

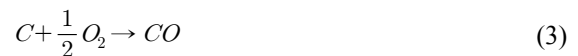
반응을 통해 나타내었다. 이론 기전력 계산을 통하여 전기화학 반응의 생성물로 CO를 고려하였을 경우와 그렇지 않은 경우를 비교하여 나타내었다. 또한 실험을 통하여 측정된 배기가스를 전산 해석적 방법을 도입하여 그 결과와 비교하였다. 연료(탄소)와 공기의 열화학 반응을 위해 Boudouard 반응을 도입하였다. 이를 통해 DCFC 연료극 주위의 유동 및 온도 분포, 출구를 통해 배출되는 생성물을 작동 온도에 따른 변화를 알아보려고 한다.

## 2. DCFC의 이론 기전력

수소 연료전지의 전기화학 총괄반응은 수소 연소 반응과 같다 [10]. 이와 같이 DCFC의 총괄반응도 탄소의 연소반응과 동일하며, 이 때 반응식은 다음과 같다.



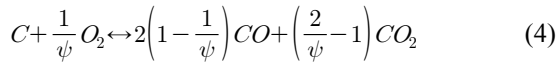
위 총괄반응은 CO의 영향을 고려하지 않는다 [9]. 그러나 탄소 산화 반응은 고온(1000 K 이상)에서 CO의 생성이 증가하고, 이와 반대로 CO<sub>2</sub> 생성이 감소한다. 이는 탄소의 가스화 반응인 Boudouard 반응에 의해 일어나며, 반응은 식 (2)와 같다 [11]. 이때 비활성 기체는 존재하지 않는다. 식 (3) 역시 탄소의 직접 산화 반응으로 CO 생성반응이다.



이와 같은 현상은 액체 전해질을 이용하는 MCFC 방식의 DCFC에서는 식 (2)의 반응에 의한 영향이 적는데, 이는 최대 작동온도가 약 900 K 정도이기 때문이다. 그와 달리 고체 전해질의 SOFC 방식의 DCFC는 작동온도가 900~1300 K으로 CO의 생성이 CO<sub>2</sub>보다 더 활발할 것으로 예상된다.

대부분 DCFC 연구에서 이론 기전력은 앞에서 언급한 식 (1)의 CO<sub>2</sub> 생성만을 고려하고 있다. 이 때, 이론 기전력은 900 K에 약 1.02 V이며, 활동도를 1로 가정하고 계산되어 진다. 그러나 탄소의 산화 반응을 통한 생성물은 고온일수록 CO<sub>2</sub> 뿐만 아니라 식 (2)에 의한 CO의 생성이 고려되어야 하며, 반응식도

식 (1)과 다르다. 반응식은 실험 및 이론 계산에 의해 도출될 수 있으며, 반응식 [12]은 다음과 같다.



이 때,  $\psi$ 는 화학평형에 의해 결정되어지는 화학량 인자로서 식 (4)의 CO와 CO<sub>2</sub> 몰분을 변화는 온도에 의해 달라진다. 온도에 따른 CO와 CO<sub>2</sub>의 몰분율은 Boudouard 반응에 의한 변화를 따르고 있으며, 또한 평형 상수 비교를 통해 식 (4)가 Boudouard 반응이 고려되었음을 확인하였다.

일반적으로 연료전지의 이론 기전력을 구하기 위해서 열역학적인 방법으로 Nernst 식을 이용하여 계산하며, 이를 식 (5)에 나타내었다.

$$E = \frac{-\Delta G^0}{nF_e} + \frac{RT}{nF_e} \ln \left( \frac{a_{\text{reactant}}}{a_{\text{product}}} \right) \quad (5)$$

여기서,  $\Delta G^0$ 는 반응에 따른 깁스 에너지 변화량,  $n$ 은 반응에 참여하는 전자수,  $F_e$ 는 패러데이 상수,  $R$ 은 기체상수,  $T$ 는 온도이다. 이 때 식의 우변에서 두 번째 항은 반응물과 생성물의 가스 분압에 의한 활동도를 나타낸다. 식 (5)를 이용하여 반응(1), (3) 그리고 (4)에 의한 이론 기전력 결과를 Fig. 1에 나타내었다. 이 때, 반응물과 생성물의 활동도는 1로 가정하였으며, 식 (5)의 우변에서 두 번째 항은 0이 된다. 따라서 Fig. 1에 나타난 이론 기전력은 각 반응을 통한 깁스 에너지 변화량에 의해 계산된다.

Fig. 1을 통하여 CO<sub>2</sub> 생성 반응(식 (1))의 이론 기전력은 약 1.02 V로 온도에 따라 거의 변화가 없는

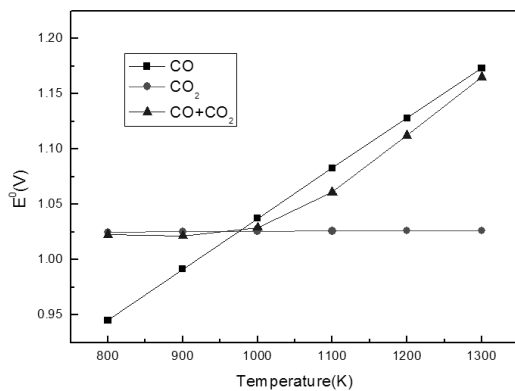


Fig. 1. Theoretical potential at 1 atm total pressure(unit activity).

것을 보이나, CO 생성 반응(식 (3))에 의한 결과는 온도가 증가할수록 이론 기전력도 증가한다. 두 개의 반응이 동시에 고려된 경우(식 (5))의 이론 기전력은 반응 (1), (3)의 결과와는 다르게 나타난다. 약 1000 K 을 기준으로 낮은 온도에서는 식 (1)에 의한 이론 기전력을 따르며, 높은 온도에서는 CO 생성에 의한 결과를 따르고 있음을 확인할 수 있다. 이는 1000 K 이하의 온도에서 생성물의 대부분이 CO<sub>2</sub>로 생성되며, 1000 K 이상의 온도에서는 CO의 생성물이 대부분을 차지하고 있기 때문이다. 이와 같은 경향은 Lee 등 [13]에 의한 연구 결과와 유사함을 보여주고 있다.

이론 기전력 결과를 통해 고온 영역에 CO 생성반응이 큰 영향을 미칠 수 있음을 확인하였다. 따라서 기존의 연구와 달리 CO의 생성을 고려할 필요가 있다. Boudouard 반응을 적용하여 CO 생성이 고려된 현상을 모사하기 위해 2차원 전산 수치해석을 다음과 같이 진행하였다.

### 3. 모델링 및 수치 해석조건

#### 3-1. 형상 모델링

전산 해석을 위한 형상을 Fig. 2에 나타내었다. Fig. 2의 왼쪽은 실제 실험장비 [8]를 관찰하여 개략도를 나타내었으며, 오른쪽은 개략도를 바탕으로 실제 전산해석에 사용된 형상을 나타내었다. Inlet tube를 통하여 수송가스인 아르곤이 공급되며, Reaction area에서 화학반응이 일어나도록 모사하였다. 반응 후 생성물은 Outlet tube를 통하여 배출되도록 하였다. 그리고 빠른 해석을 위하여 2차원의 형상으로 해석을 진행 하였으며, 모델링된 반응부는 실제 면적과 동일한 평면 형태이다. Inlet, Outlet, Symmetry를 제외하고 형상 조건은 Wall로 설정하였다. 형상 모델링 후 전산 해석을 위해 모델링 및 격자 생성 프로그램을 이용하여 격자 생성을 하였으며, 격자의 개수는 약 15만개이다.

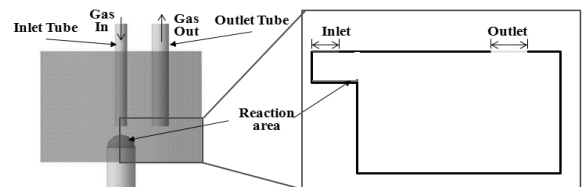


Fig. 2. Schematic configuration of fuel cell used in the experiment.

### 3-2. 지배방정식

반응 해석을 위해서 사용된 상용 코드는 유한 체적법을 기초로 하는 Fluent를 사용하였다. 지배방정식은 질량과 모멘텀, 에너지등과 같은 수송방정식에 대해 풀게 된다. 식 (6)은 시간에 따라 변하는 비정상항과 대류 열전달이 일어나는 대류항, 확산이 일어나는 확산항과 열 발생항으로 이루어진다.

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_A \rho \phi dV}_{\text{Unsteady}} + \underbrace{\int_A \rho \phi v dA}_{\text{Convection}} = \underbrace{\int_A \Gamma \nabla \phi dA}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\int_V S_\phi dV}_{\text{Generation}} \quad (6)$$

유동 해석을 위해서 사용되는 식은 다음과 같다 [14].

· 질량 보존방정식

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (7)$$

· 모멘텀 보존방정식

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\vec{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (8)$$

식 (7)는 압축성 유체와 비압축성 유체에 모두 적용할 수 있으며,  $S_m$ 은 증발과 같은 현상으로 일어나 질량의 증가분을 나타낸다. 식 (8)은 해석의 경계 안에서 모멘텀 보존식을 나타낸다.  $\rho \vec{g}$ 는 중력에 의한 모멘텀을,  $\vec{F}$ 는 증발에 의해 나타나는 외부적인 힘을 나타낸다. 본 연구에서는  $S_m$  항을 고려하지 않았으며 그로 인한  $\vec{F}$  항 역시 고려되지 않았다.

· 화학종 보존 방정식

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_j Y_i - F_{i,j}) = S_i \quad (9)$$

· 에너지 보존방정식

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho h u_j + F_{h,i,j}) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_h \quad (10)$$

식 (9)에서는 각 화학종에 대한 질량 및 운동량은 보존이 되며, 각 화학종에 따른 확산 플럭스( $F_{i,j}$ )가 고려된다. 또한 Source 항( $S_i$ )은 반응에 의해서 생성되는 화학종을 고려하게 된다. 식 (10)에서 열적인 요

소와 화학적 요소의 합을 나타내는 열유속, 온도 구배에 따른 전도, 화학종의 농도 구배에 의한 엔탈피 확산을 포함한다. 그리고 Source 항( $S_h$ )은 화학반응에 의해 생기는 에너지를 나타내게 된다.

### 3-3. 해석 및 경계 조건

해석을 위하여 Pressure based solver를 사용하였다. 이는 u, v, w의 속도에 의한 모멘텀 방정식을 계산하고 그 값을 입력한 상태에서 연속 방정식을 풀어 에너지 방정식의 값이 수렴할 때까지 반복한다. 이 경우 지배방정식이 비선형적이고 여러 인자에 의해 결합되어 있는 경우, 수치적 결과에 수렴하기 위해 반복되는 과정에서 순차적으로 계산을 해나가는 방식이다. Viscous 모델은 층류를 해석하기 위한 모델로써, Laminar 모델을 사용하였다. 복사에 의한 열전달은 고려하지 않았으며, 고체 입자에 대한 해석을 위해 Discrete Phase Model을 사용하였다.

Table 1은 해석을 위한 경계 조건을 나타낸 표이다. 실험 장치는 전기로가 감싼 형태를 취하고 있기에, Wall 온도에 의한 열전달이 일어나도록 설정하였다. 또한 반응에서 산화제 역할을 하는 공기는 반응부 표면에서 21%의 산소 몰분율을 가지고 일정하게 유입되도록 설정하였다. Inlet을 통해 유입되는 기체는 수송 가스의 역할을 하는 아르곤으로 설정하였으며, 이 때 온도 상승을 고려하여 아르곤의 온도를 650 K, 속도를 0.58 m/s 설정하였다. 속도는 실험 시에 사용되는 아르곤의 유량을 통하여 결정하였다. 이 때 연료가 되는 탄소는 수송가스를 통해 Inlet으로 들어오며, 탄소의 모멘텀은 0이며, 비활성 기체인 아르곤을 통해 DCFC 내부로 공급된다. 그리고 연료전지의 반응은 내부 체적에서 일어나지 않기 때문에 반응부 표면에서 일어나도록 설정하였다. Wall 온도를 제외한 경계 조건은 실험 조건과 동일하다.

Table 1. Boundary conditions.

Zone	Type	Conditions
Inlet	Velocity-inlet	Velocity of argon Temperature 650 K
Outlet	Outflow	N.A
Reaction wall	Wall	Temperature
Wall	Wall	Temperature
Symmetry	Symmetry	N.A

### 4. 수치해석 결과

본 해석을 위한 유동은 3.3절에 나타낸 것처럼 층류로서 반응은 Arrhenius rate 에 지배를 받는다. 사용된 Arrhenius rate 은 식 (11)과 같으며, 이를 위하여 Kinetic parameter 값이 필요하다.

$$k = AT^\alpha \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \quad (11)$$

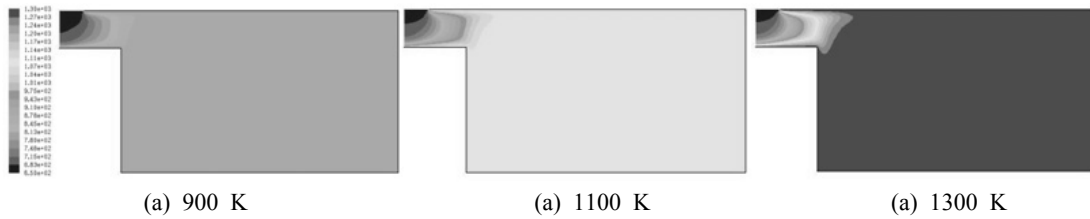
이 때 Boudouard 반응을 위해 사용된 Kinetic parameter는 Mayers 등이 수행한 CO<sub>2</sub>에 의한 탄소의 산화 반응 실험을 통해 얻어진 결과 값 [15,16]을 적용하였다. Table 2에 나타내었으며, 이를 전산 해석에 적용하기 위해서는 단위 변환이 필요하다. Kinetic parameter와 경계조건을 적용하여 해석한 결과를 Fig. 3~5에 나타내었고, 작동 온도에 따른 각각의 내부 온도와 CO, CO<sub>2</sub> 분포를 나타내고 있다. 실험과의 비교를 위해 온도의 범위를 900~1300 K 으로 설정

하였다.

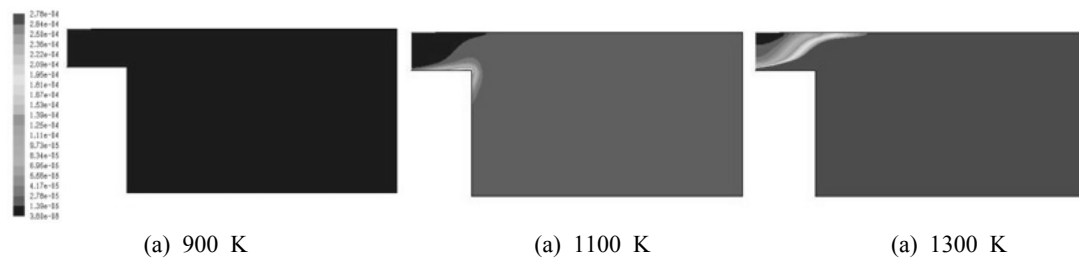
Fig. 3을 보면 Inlet 주위를 제외하고는 온도 변화는 거의 나타나지 않는다. 이는 반응에 의한 온도 효과보다는 벽면을 통한 열전달이 내부 온도 변화 영향을 미치는 것으로 판단된다. Fig. 4, 5를 통해 온도 변화에 따른 CO와 CO<sub>2</sub> 분포의 변화를 알 수 있다. Fig. 4에서 Wall 온도가 (a) 900 K일 때 CO 발생하지 않았으며, 반응부에서도 역시 발생하지 않는다. 이는 반응 온도에 도달하지 못한 것을 나타낸다. 그러나 (b) 1100 K일 경우 CO 분포가 나타나며, 반응부에서는 최대 300 ppm의 몰분율로 나타나고 있다. 반

**Table 2.** Kinetic parameters of the Boudouard reaction.

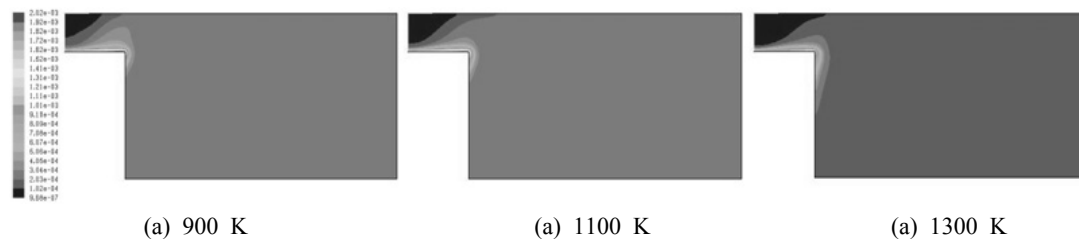
	Mayers [15,16]	This study
Pre-Exponential factor	4.4 m/K·s	7.26×10 <sup>6</sup> kg/m <sup>2</sup> ·s
Activation energy	38.7 kcal/mol	1.656×10 <sup>8</sup> J/kmol
Temperature exponent	1	1



**Fig. 3** Temperature distribution as function of wall temperature.



**Fig. 4** Distribution of mole fraction of CO as function of wall temperature.



**Fig. 5** Distribution of mole fraction of CO<sub>2</sub> as function of wall temperature.

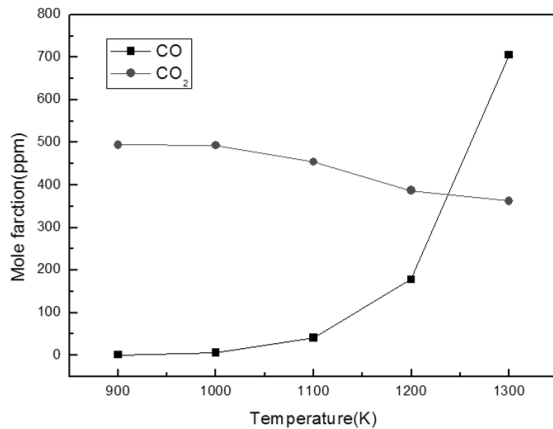


Fig. 6. Simulation result of mole fraction of CO, CO<sub>2</sub> at outlet as function of operating temperature.

응부 끝으로 갈수록 물분율이 높아지는 것을 확인할 수가 있는데 이는 아르곤에 의한 영향으로 판단된다. 온도가 (c) 1300 K일 경우는 Inlet 영역을 제외하고 CO의 분포가 고르게 나타나고 있다. 이는 높은 온도로 인한 CO의 발생이 활발하며, 아르곤에 의한 영향은 Inlet 주위를 제외하고는 나타나지 않음을 알 수 있다.

Fig. 5를 통해서 온도에 따른 CO<sub>2</sub>의 변화는 CO의 경우와 다른 것을 확인할 수 있다. 온도가 상승할수록 CO<sub>2</sub> 물분율의 값은 감소하고 있으며, 특히 반응부 주위의 CO<sub>2</sub>가 감소하였다. 이와 같은 결과는 Boudouard 반응의 효과로 인해 온도가 상승할수록 CO의 발생은 증가하고, CO<sub>2</sub>의 발생은 감소하고 있음을 나타낸다.

위의 결과들을 바탕으로 Outlet에서의 CO와 CO<sub>2</sub>의 물분율을 온도에 따라 Fig. 6에 나타내었다. Outlet의 분포는 일정하지 않아 평균값을 취하였다. Fig. 6를 통해 온도에 따라 배출되는 양의 변화를 명확히 확인할 수 있다. 이를 통해 약 1250 K 기준으로 CO와 CO<sub>2</sub>의 역전현상이 나타나고 있음을 알 수 있다. 이는 서론에서 언급한 1000 K 보다 높은 온도로, 비활성 기체의 존재가 Boudouard 반응의 평형 조성 분율을 변화시켜 CO 발생을 감소시켰다. 이로 인해 역전현상의 기준 온도를 상승시킨 것으로 판단되며, 향후 비활성 기체의 공급 비율에 따른 CO, CO<sub>2</sub> 발생량 변화 및 온도에 대한 연구가 필요하다.

실험의 측정값과 CFD 해석을 통해 얻은 결과 값을 Fig. 7에 나타내었다. 실험값은 김종필 등에 의해 구축된 장비 [8]의 출구에서 가스분석기(Testo 350-S)

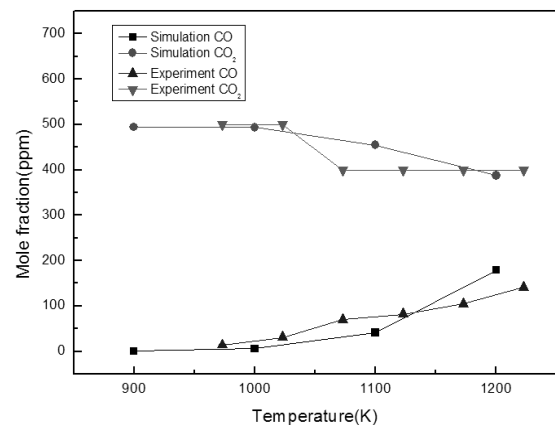


Fig. 7. Comparison of experiment and simulation result in mole fraction of CO, CO<sub>2</sub>.

를 이용하여 CO, CO<sub>2</sub>를 측정하였다. 실험을 위해 수송가스로 99.999%의 아르곤을 사용하였으며, 이는 수송가스가 반응에 영향을 미치지 않도록 하기 위함이다. 이 때 400SCCM의 유량으로 공급하였다. 또한 전기로를 사용하여 측정시 온도가 일정하게 유지되도록 하였으며, 측정 온도범위는 973~1223 K이다. 이 때 측정된 값은 평균값을 취하여 나타내었다. 실험조건을 전산 해석의 경계 조건에 맞추어 변환하여 적용하였으며, 온도 변화는 실험과 유사하도록 900 K~1200 K로 설정하여 전산해석을 수행하였다. Fig. 7을 통해 CFD의 해석 결과가 실험과 유사함을 확인할 수 있다. CFD 해석은 Boudouard 반응을 통한 CO의 생성을 고려한 것으로, 고온에서 CO 생성이 영향을 미치고 있음을 알 수 있다. 또한 실험과의 비교를 통해 Boudouard 반응이 전기화학 반응에도 영향을 미치고 있음을 확인하였다.

## 5. 결 론

탄소를 연료로 사용하는 고체 산화물 연료전지의 고온영역에서의 CO 생성반응의 영향을 알아보기 위해 열역학 평형을 통한 이론 기전력 계산과 전산 해석을 동시에 수행하였으며, 결론은 다음과 같다.

- (1) 이론 기전력을 통하여 온도에 따라 CO와 CO<sub>2</sub>가 DCFC에 미치는 영향이 다르다는 것을 확인하였다. 1000 K을 기준으로 저온 영역에서는 CO<sub>2</sub> 생성반응의 영향이, 고온 영역에서는 CO 생성반응의 영향이 지배적으로 나타난다.

- (2) 수치해석을 통한 CO와 CO<sub>2</sub> 변화는 고온 영역에서는 CO는 증가하고 그에 따른 CO<sub>2</sub>는 감소하였다. 이는 Boudouard 반응에 의하여 CO 생성을 고려한 결과이다. 실험과의 비교를 통해 전기화학 반응에 Boudouard 반응이 영향을 주고 있음을 확인하였다. 따라서 이론 기전력 및 실험 결과와 비교를 통해 고온형 DCFC에 대한 연구시 CO 반응이 고려되어야 할 것으로 사료된다.
- (3) 비활성 기체인 아르곤이 존재할 경우 평형 조성 분율의 변화로 인해 Boudouard 반응을 지연되어 CO 발생량에 영향을 미친다. 그로 인해 CO와 CO<sub>2</sub> 역전현상이 일어나는 온도를 상승시켰다. 이를 토대로 향후에는 비활성 기체의 공급비율이 CO의 발생량과 온도 변화에 미치는 연구가 필요할 것으로 판단된다.

## 후 기

본 연구는 2010년도 지식경제부의 재원으로 한국 에너지기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구과제입니다(No. 2007-P-EP-H-ME-03-0000).

## 참고문헌

1. Lee, K. S., Cho, H. H., 2005, "Numerical Analysis of Molten Carbonate Fuel Cell Stack using Computational Fluid Dynamics," *Journal of the Korean Electrochemical Society*, Vol. 8, No. 4, pp. 155-161.
2. Hwang, J. Y., Yoon, J. E., Kang, K. T., Kim, J. H., Lee, B. J., 2009, "Effects of Anode and Current Collector Materials on the Power Density of Solid Oxide Electrolyte Direct Carbon Fuel Cell," *Proceeding of the KSNRE 2009 Spring Conference*, pp. 392-394.
3. Lee, T. H., Choi, J. H., Park, T. S., Yoo, Y. S., Nam, S. W., 2009, "Design and Self-Sustainable Operation of 1kW SOFC System," *Tras. of the Korean Hydrogen and New Energy Society*, Vol. 20, No. 5, pp. 384-389.
4. Larminie, J., Dicks, A., 2003, *Fuel Cell System Explained*, 2nd, Chichester, Wiley, pp. 1-24.
5. Cao, D., Sun, Y., Wang, G., 2007, "Direct Carbon Fuel Cell: Fundamentals and Recent Developments," *Journal of Power Sources*, Vol. 167, No. 2, pp. 250-257.
6. Cooper, J. F., Berner, K., Presented in Fuel Cell Seminar, Direct Carbon Fuel Cell Workshop, Palm Springs, CA, USA, 14th November, 2005, Proceedings online: [http://www.fuelcellseminar.com/pdf/Direct Carbon Fuel Cell Workshop/Cooper John.pdf](http://www.fuelcellseminar.com/pdf/Direct%20Carbon%20Fuel%20Cell%20Workshop/Cooper%20John.pdf).
7. Cooper, J. F., Presented in Direct Carbon Fuel Cell Workshop, NETL, Pittsburgh, PA, USA, 30th July, 2003, Proceedings online: <http://www.netl.doe.gov/publications/proceedings/03/dcfcw/Cooper%20202.pdf>.
8. Kim, J. P., Lim, H., Jeon, C. H., Chang, Y. J., Koh, K. N., Choi, S. M., Song, J. H., 2010, "Performance Evaluation of Tubular Fuel Cells Fuelled by Pulverized Graphite," *Journal of Power Sources*, Vol. 195, No. 22, pp. 7568-7573.
9. Liu, Q., Tian, Y., Xia, C., Thompson, L. T., Liang, B., Li, Y., 2008, "Modeling and Simulation of a Single Direct Carbon Fuel Cell," *Journal of Power Sources*, Vol. 185, No. 2, pp. 1022-1029.
10. Barbir, F., 2005, *PEM Fuel Cells - Theory and Practice*, Elsevier, pp. 17-31.
11. Tang, Y., Liu, J., Sui, J., 2009, "A Novel Direct Carbon Solid Oxide Fuel Cell," *ECS Transaction*, Vol. 25, No. 2, pp. 1109-1114.
12. Vamvuka, D., Woodburn, E. T., 1998, "A Model of the Combustion of a Single Small Coal Particle using Kinetic Parameters Based on Thermogravimetric Analysis," *International Journal of Energy Research*, Vol. 22, pp. 657-670.
13. Lee, A. C., Mitchell, R. E., Gur, T. M., 2009, "Thermodynamic Analysis of Gasification-Driven Direct Carbon Fuel Cells," *Journal of Power Sources*, Vol. 194, pp. 774-785.
14. Fluent User Guide 6.3
15. Silaen, A., Wang, T., 2010, "Effect of Turbulence and Devolatilization Models on Coal Gasification Simulation in an Entrained-flow Gasifier," *International Journal of Heat Mass Transfer*, Vol. 53, pp. 2074-2091.
16. Smoot, L. D., Smith, P. J., 1985, *COAL Combustion and Gasification*, Plenum Press, New York, pp. 168-174.