

금속수소화물 수소 저장 용기 내부의 수소방출에 대한 수치해석적 연구

강경문*, 남진무*, 유하늘*, 주현철*[†]

*인하대학교 기계공학과

Numerical Study of Hydrogen Desorption in a Metal Hydride Hydrogen Storage Vessel

KYUNGMIN KANG*, JINMOO NAM*, HANEUL YOO*, HYUNCHUL JU*[†]

*School of Mechanical Engineering, Inha University, 253 Yonghyun-dong,
Nam-gu, Incheon, 402-751, Korea

ABSTRACT

In this paper, a three-dimensional hydrogen desorption model is developed to precisely study the hydrogen desorption kinetics and resultant heat and mass transport phenomena in metal hydride hydrogen storage vessels. The metal hydride hydrogen desorption model, i.e. governed by the conservation of mass, momentum, and thermal energy is first experimentally validated against the temperature evolution data measured on a cylindrical LaNi₅ metal hydride vessel. The equilibrium pressure used for hydrogen desorption simulations is derived as a function of H/M atomic ratio and temperature based on the experimental data in the literature. The numerical simulation results agree well with experimental data and the 3D desorption model successfully captures key experimental trends during hydrogen desorption process. Both the simulation and experiment display an initial sharp decrease in the temperature mainly caused by relatively slow heat supply rate from the vessel external wall. On the other hand, the effect of heat supply becomes influential at the latter stages, leading to smooth increase in the vessel temperature in both simulation and experiment. This numerical study provides the fundamental understanding of detailed heat and mass transfer phenomena during hydrogen desorption process and further indicates that efficient design of storage vessel and heating system is critical to achieve fast hydrogen discharging performance.

KEY WORDS : Hydrogen storage(수소저장), Metal hydride(금속수소화물), Hydrogen desorption(수소방출), Numerical simulation(수치적 시뮬레이션), LaNi₅(란타넘니켈합금)

Nomenclature

[†]Corresponding author : hcju@inha.ac.kr

[접수일 : 2011.4.4 수정일 : 2011.6.8 게재확정일 : 2011.6.20]

C_d : rate constant, s⁻¹

c_p : specific heat, J/kg·K

E_a : activation energy, J/mol
 H/M : hydrogen to metal atomic ratio
 ΔH : reaction heat of formation, J/kg
 ΔS : entropy change, J/kg·K
 h : heat transfer coefficient, W/m²·K
 K : permeability, m²
 k : thermal conductivity, W/m·K
 M : molecular weight, kg/mol
 P : pressure, Pa
 R : universal gas constant, 8.314 J/mol·K
 T : temperature, K
 t : time, s
 \vec{u} : velocity vector, m/s

Greek letters

τ : shear stress, N/m²
 ε : porosity
 μ : dynamic viscosity, kg/m·s
 ρ : density, kg/m³

Superscripts

g : gas phase
 s : solid phase
 eff : effective value

Subscripts

d : desorption
 emp : empty
 eq : equilibrium
 in : inlet
 out : outlet
 sat : saturation
 m : mass equation
 ref : reference value
 T : energy equation
 u : momentum equation
 w : wall
 0 : initial

방법, 금속수소화물(metal-hydride)저장법, 탄소나노튜브 저장법 등을 중심으로 연구가 집중되고 있으며 안전성과 저장효율을 향상시키기 위한 새로운 시도들도 다양하게 전개되고 있다. 그 중 금속수소화물(metal hydride) 수소저장법은 수소를 안전하고 효과적으로 저장할 수 있는 방법으로 주목되고 있다. 작동원리는 식 (1)에 나타난 것처럼 수소를 고체상태의 물질(예를 들면, 금속수소화물)의 원자 사이에 흡착을 시켜 저장을 하고 필요할 때 분리시키는 방법으로 고체물질의 종류에 따라 다른 저장/방출 반응엔탈피(adsorption/desorption reaction enthalpy), ΔH 를 가진다.

$$M + (n/2)H_2 \leftrightarrow MH_n + \Delta H \quad (1)$$

일반적으로 금속수소화물에서 수소 저장반응은 열을 발생하는 발열 반응(exothermic reaction)인 반면 수소 방출반응은 열을 필요로 하는 흡열 반응(endothermic reaction)이다. 그러므로 금속수소화물 용기의 수소 충·방전 성능은 작동수소압력 뿐만 아니라 용기의 열 및 물질전달 제어 능력에 의해 크게 영향을 받는다. 따라서 용기 내에서 발생하는 여러 가지 수소 충·방전 특성을 정확히 규명할 수 있는 이론 연구가 우선적으로 수행되어야 하며, 이를 바탕으로 금속수소화물 저장용기의 디자인 및 작동 변수들을 최적화할 수 있는 기술이 필요하다.

본 논문에 다룬 주요 내용은 선행 논문¹⁾에서 개발된 3차원 수소 저장(absorption)모델을 기반으로 수소 방출(desorption)시 일어나는 주요 물리/화학적 현상들을 연구/분석하여 3차원 수소 방출 해석모델을 개발하고 실험데이터와 비교/분석을 통해 개발된 모델을 검증하는 것이다. 지금까지 수소 방출 해석 연구는 많이 이루어진 반면 저장모델개발을 통한 이론 연구는 상대적으로 적었다. Dhaou²⁾등은 수소 방출 및 저장모델을 개발하여 LaNi₅ 수소저장 용기에 적용하여 시뮬레이션을 수행하였다. 수소 저장 및 방출 시 시간에 따른 온도변화를 측정하여 시뮬레이션 결과와 비교하였는데 수소저장용기와 외부의 열 전달계수를 보정계수로 가정하였다. Chung³⁾등은 수소

1. 서 론

수소의 저장은 고압기체수소저장법, 액체수소저

저장용기 내에 순수 수소로만 채워져 있는 팽창지역(expansion volume)을 추가적으로 고려하여 팽창지역이 수소 저장 및 방출에 미치는 영향성을 2차원 시뮬레이션을 통하여 분석하였다. 그들은 팽창지역 크기가 수소 저장 및 방출 성능에 영향을 주며, 팽창지역이 포함된 수소저장용기 시뮬레이션 시 대류(convection)효과가 모델에서 반드시 고려해야 한다는 사실을 시뮬레이션 결과들을 통해 입증하였다. Melloui⁴⁾ 등은 수소저장용기의 성능을 향상시키기 위해 3가지 타입의 열교환기 디자인을 제안하였고 2차원 시뮬레이션을 통해 수소 충·방전 시 열교환기 영향성을 분석하였다. 그들은 열교환기 성능 향상을 통해 저장용기의 수소 충·방전 시간을 현격하게 줄일 수 있음을 시뮬레이션을 통해 설명하였다. 비록 수소 방출 이론 연구를 수행한 선행논문이 소수 있지만 기존의 수소방출모델에서는 금속수소화물 용기 내 대류(convection)효과를 무시했거나⁴⁾, 수소방출 평형압력을 온도만의 함수로 가정하였다³⁾.

본 논문에서는 기존에 수행된 선행 연구들을 바탕으로, 수소 방출 시 금속수소화물 수소저장용기 내부에서 일어나는 주요 화학 반응, 열 및 물질전달 메커니즘 등을 고려해 개발된 3차원 금속수소화물 수소 방출모델을 소개한다. 본 방출모델에서는 기존의 해석모델에서 간과되었던 대류효과와 평형압력의 원자수 비율(hydrogen-metal ratio) 영향성이 새로이 고려되었다. 개발된 모델은 기존에 측정된 실험결과들과 비교/분석을 통해 검증된 후 시뮬레이션을 통해 수소 방출반응이 진행되는 동안 저장용기 내에서 발생하는 여러 가지 핵심 현상들을 예측할 것이다.

2. 금속수소화물 수소방출 모델

본 연구에서 개발될 3차원 금속수소화물 수소방출반응 모델은 수소방출반응으로 인한 열 및 물질전달 과정을 포함한다. 본 모델을 개발하기 위해 사용된 가정들은 다음과 같다:

- ① 수소는 이상기체임.
- ② 수소저장 금속용기는 동종 다공성 미디어로 가정함.

- ③ 금속수소화물과 기체 수소기체 사이에는 국부적 온도평형 존재함.
- ④ 수소저장에 기인한 금속의 부피팽창은 무시함. 그러므로 금속의 다공도 및 기체투과도(gas permeability)는 수소저장농도와 무관함. 또한 금속의 열전도도도 수소저장농도와 무관하다고 가정함.

2.1 지배방정식 및 생성항

본 모델은 질량(mass), 모멘텀(momentum), 열에너지(thermal energy)의 보존법칙에 의해 표현되었다. 지배방정식을 정리하면 다음과 같다.

질량 보존식:

수소:

$$\frac{\partial \rho^g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^g \vec{u}) = -S_m \quad (2)$$

금속:

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial \rho^s}{\partial t} = S_m \quad (3)$$

여기서 ε 은 공극율을 나타내며, S_m 은 방출반응이 일어남으로써 생기는 시간 변화에 따른 수소의 질량변화를 표현하는 생성항으로 수소저장 반응에서는 양의 값을, 방출반응에서는 음의 값을 가지게 된다. 방출반응에서의 S_m 은 다음과 같이 표현된다.

$$S_m = C_d \exp\left(-\frac{E_d}{R^g T}\right) \left(\frac{P^g - P_{eq}}{P_{eq}}\right) (\rho^s - \rho_{cmp}^s) \quad (4)$$

여기서, C_d 와 E_d 는 각각 방출반응에 대한 반응계수, 활성화 에너지, ρ_{cmp}^s 는 다공성금속에 수소가 모두 방출되었을 때의 베드(bed) 밀도, P_{eq} 는 평형압력을 나타낸다.

방출반응에 대한 평형압력은 Van't Hoff relationship에 의해 결정될 수 있다. Nasrallah⁵⁾에 의해 유도된 평형압력의 상호관계식(correlation)은 온도와 수소-메탈의 원자수 비율, 즉 H/M에 따라 변한다.

$$P_{eq} = \exp\left(\frac{\Delta H}{R^g T} - \frac{\Delta S}{R^g}\right) = f\left(\frac{H}{M}\right) \times \left(\frac{\Delta H}{R^g} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \quad (5)$$

식 (5)에서의 평형압력에 대한 관계식은 H/M 비율에 종속적(dependent)이며, 일반적으로, H/M 비율의 함수 관계식은 다항식(polynomial) 형태의 보간법(interpolation)으로 구할 수 있다.

모멘텀 보존식:

$$\frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial \rho^g \vec{u}}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot (\rho^g \vec{u} \vec{u}) \right] = -\nabla P + \nabla \cdot \tau + S_u + \rho^g \vec{g} \quad (6)$$

생성항 S_u 는 Darcy's forces로 나타내어지며 아래와 같이 표현된다.

$$S_u = -\left(\frac{\mu}{K}\right) \vec{u} \quad (7)$$

거기서 μ 는 동점성계수, K 는 투과도를 의미한다.

에너지 보존식:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{c}_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^g \bar{c}_p \vec{u} T) = \nabla \cdot (k^{eff} \nabla T) + S_T \quad (8)$$

여기서 $\bar{\rho} \bar{c}_p$ 와 k^{eff} 는 공극율에 대한 함수로 다음과 같이 표현된다.

$$\bar{\rho} \bar{c}_p = (1 - \varepsilon) \rho^s c_p^s + \varepsilon \rho^g c_p^g \quad (9)$$

$$k^{eff} = (1 - \varepsilon) k^s + \varepsilon k^g \quad (10)$$

비열 c_p 와 열전도도 k 는 상수로 가정하고 기체 밀도인 ρ^g 는 이상기체 방정식을 적용하였으며 다음과 같이 표현된다.

$$\rho^g = \frac{P^g M^g}{RT} \quad (11)$$

공극율을 갖는 금속에서의 에너지 생성항은 다음과 같이 나타내어진다.

$$S_T = S_m [\Delta H - T(c_p^g - c_p^s)] \quad (12)$$

여기서 ΔH 는 금속과 수소의 반응간 엔탈피생성을 의미하며 S_T 는 S_m 의 함수로서 온도의 증감은 수소와 금속의 반응속도에 의존한다.

2.2 초기/경계 조건 및 모델 구현

온도, 압력, 다공성 금속 밀도의 초기조건은 다음과 같이 가정하였다.

$$T = T_{in}, P = P_{out}, \rho^s = \rho_{sat}^s \quad (13)$$

거기서 ρ_{sat}^s 는 다공성금속에 수소가 포화상태로 저장되었을 때의 베드 밀도를 의미한다.

한편, 용기 내부와 벽면의 냉각효과에 의한 온도 경계조건은 다음과 같이 표현할 수 있다.

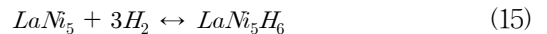
$$-k^{eff} \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_w) \quad (14)$$

지금까지 기술된 금속수소화물 수소 방출 모델은 상용 Star-CD 전산유체(computational fluid dynamics, CFD) 패키지를 이용하여 실행되었으며, 질량, 모멘텀 및 에너지 보존식과 이와 관련된 생성항들은 유저코드(user code) 기능을 이용해 코드화 되었다.

3. 결과 및 고찰

본 연구에서 개발된 수소방출모델은 LaNi_5 합금 소재 수소 저장용기에 적용되어 수소방출반응 시 용기 내부의 열 및 물질전달 특성 연구를 위한 시뮬레이션을 수행하였다.

LaNi_5 금속 용기에 수소가 저장 및 방출되는 화학반응식은 다음과 같이 표현된다.



식 (15)는 수소 저장 반응일 때는 정반응, 방출반응일 때는 역반응을 의미한다.

본 연구에서 사용된 LaNi_5 수소저장용기의 기하

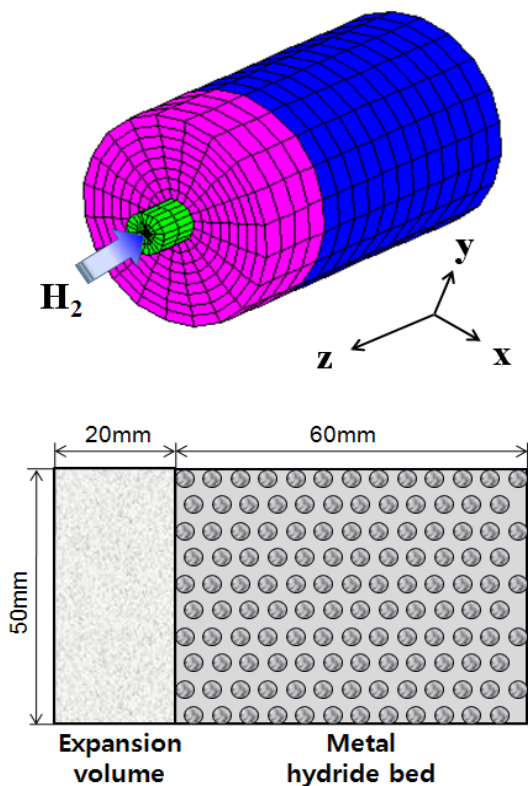


Fig. 1 Computational domain and schematic diagram of the cylindrical LaNi₅ hydrogen storage tank

학적 형상 및 치수(dimension)는 Fig. 1에 나타나 있다. 본 연구에서 사용된 물성치(property)들과 작동 조건은 Table 1에 정리되어 있다. 수소 방출 반응에 대한 평형 압력은 문헌에 의해 주어진 평형 관계식을 사용하였으며, 9차의 다항식 형태의 보간법(interpolation)으로 표현되었다⁶⁾.

$$P_{eq} = \exp\left(\frac{\Delta H}{R^g T} - \frac{\Delta S}{R^g}\right) \quad (16)$$

$$= \left(a_0 + \sum_{n=1}^9 a_n \left(\frac{H}{M}\right)^n\right) \times \exp\left(\frac{\Delta H}{R^g} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right)$$

Table 2 The equilibrium pressure polynomial function coefficient

	a0	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7	a8	a9
Desorb	0.420605	-4.11352	14.1799	-13.1085	4.55729	0.165833	-0.5923	0.178977	-0.023008	0.00112613

Table 1 Geometrical, physical, and operating parameters

Description	Value
Tank dimension, height/diameter	80/50 mm
Initial/ inlet temperature, T_0/T_{in}	20/20°C
Outlet pressure, P_{out}	0.4 bar
Desorption rate constant, C_d	9.57 s ⁻¹
Activation energy, E_d	16473 J/mol
Specific heat of hydrogen gas, c_p^g	14.890 kJ/mol·K
Specific heat of the metal, c_p^s	0.419 kJ/mol·K
Thermal conductivity of the hydrogen gas, k^g	0.167 W/m·K
Thermal conductivity of the metal, k^s	3.18 W/m·K
Porosity of the metal, ϵ	0.63
Permeability of the metal, K	10 ⁻⁸ m ²
Heat transfer coefficient, h	1652 W/m ² ·K
Wall temperature for heating, T_w	20°C
Hydrogen-free metal density, ρ_{emp}^s	5300 kg/m ³
Saturated metal density, ρ_{sat}^s	5369 kg/m ³

식 (16)에서 평형압력 계산 시 사용된 다항식의 계수는 Table 2에 기록하였다. 식 (16)을 이용하여 온도 및 H/M 비율의 변화에 따른 평형압력 곡선을 Fig. 2에 나타내었다.

Fig. 3은 Jenni⁷⁾ 등이 LaNi₅ 수소저장용기에서 수소 방출 시간에 따라 실험적으로 측정된 저장용기 내 평균온도를 본 연구에서 개발된 탈장 모델을 이용하여 계산된 시뮬레이션 결과와 비교한 그림이다. 용기 내에서의 수소 방출 반응은 흡열반응이다. 따라서 용기의 온도는 방출 초기에 급격하게 감소하다가 수소 방출이 계속 진행되면서 H/M 감소에 의한 평형 압력이 감소로 수소 방출률은 줄어든다. 반면 외부벽면으로부터의 가열효과로 용기의 온도는 점차 증가하는 경향을 실험 및 시뮬레이션 결과를 통해 확인할 수 있다. 예측된 시뮬레이션 결과가 실험데이터와 유사한 결과를 나타내며 이는 본 수

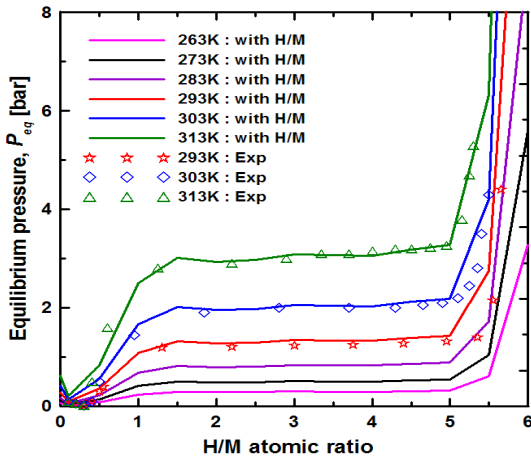


Fig. 2 The equilibrium pressure as a function of the H/M atomic ratio and temperature for hydrogen desorption on LaNi_5

소 방출 모델의 정확성을 입증해준다.

Fig. 4는 LaNi_5 수소저장용기 내에서 수소 방출의 시간에 따른 용기 내부 온도 분포를 보여준다. 1~10초까지의 온도 분포를 보면, 용기 온도는 방출 시작 온도 293.15K에서 최저 온도가 258.7K 까지 급격하게 낮아진다.

이는 반응 초기에는 용기 내부의 H/M 비율이 높아, 높은 수소 방출 평형압력으로 인해 수소 방출률이 높은 반면 외부로부터 가열효과는 낮기 때문이

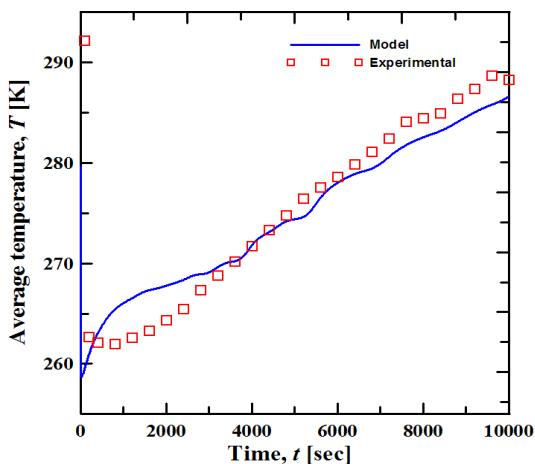


Fig. 3 Comparison between the measured and calculated temperature evolution profiles

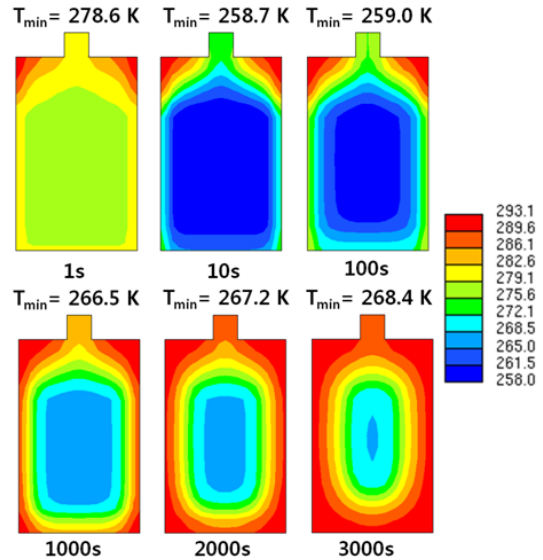


Fig. 4 Temperature contours in a cross-section of the hydrogen storage tank at 1s, 10s, 100s, 1000s, 2000s, and 3000s

다. 100초의 경우, 초기의 급격한 온도 하락 후 증가된 외부 유동의 가열효과로 인해 용기의 벽면 온도가 증가하는 경향을 보인다. 100초 이후에는 시간이 경과함에 따라 용기내부의 온도분포가 불균해 지는 것을 확인할 수 있다. 1000초의 경우를 보면, 벽면의 온도가 중심부의 온도에 비해 20K 이상 높다. 1000초 이후에는 벽면의 온도가 외부 온도와 같은 293 K를 유지한다. 이는 용기 외부의 가열효과 때문에 반응 초기 단계에서는 용기 벽면에서부터 수소 방출 반응이 빠르게 일어나고 시간이 경과함에 따라 벽면 부근에서부터 방출이 거의 완료되어 더 이상의 반응이 진행되지 않음을 의미한다. 3000초에서는 용기 내부의 중심 부분만이 낮은 온도 분포를 나타내며, 이는 용기의 중심부분에서는 여전히 수소 방출 반응이 진행되고 있음을 암시한다.

Fig. 5는 시간 경과에 따라 LaNi_5 화합물에 수소 원자의 비율(H/M 비율)을 계산한 결과이다. 10초까지는 용기 전면에 걸쳐 균일하게 H/M 비율이 감소하는 경향이 나타나며 이는 용기 내 균일하게 수소 방출 반응이 일어남을 의미한다. 하지만, 시간이 경과함에 따라 외부의 가열효과로 인해 낮은 H/M 비

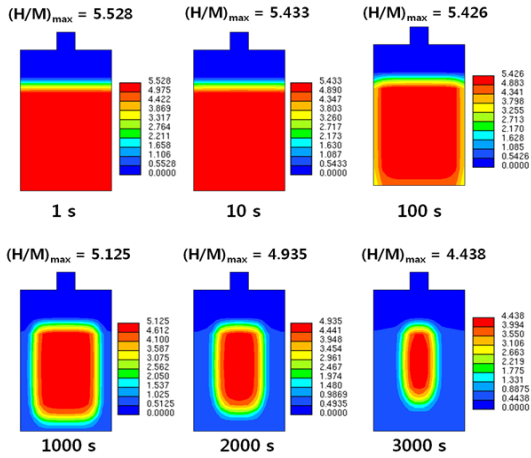


Fig. 5 The (H/M) ratio contours in a cross-section of the hydrogen storage tank at 1s, 10s, 100s, 1000s, 2000s, 3000s.

율이 벽면에서 예측되었다. 이는 흡열반응인 방출 반응은 벽면부근에서 더 활발히 진행되고 있기 때문이다. 방출 반응은 저장 반응보다 상대적으로 반응 속도가 느리기 때문에 3000초가 경과한 후에도 많은 양의 수소가 용기 중심부에 남아있음을 확인할 수 있다.

Fig. 6은 시간 경과에 따른 용기 내부에서의 평형 압력 분포를 보여준다. 방출 초기에는 높은 H/M 비

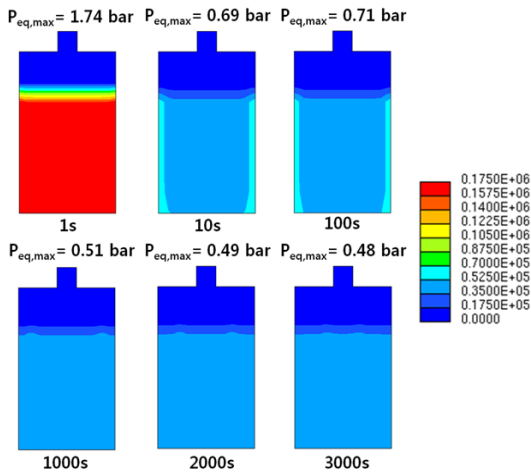


Fig. 6 Equilibrium pressure contours in a cross-section of the hydrogen storage tank at 1s, 10s, 100s, 1000s, 2000s, and 3000s

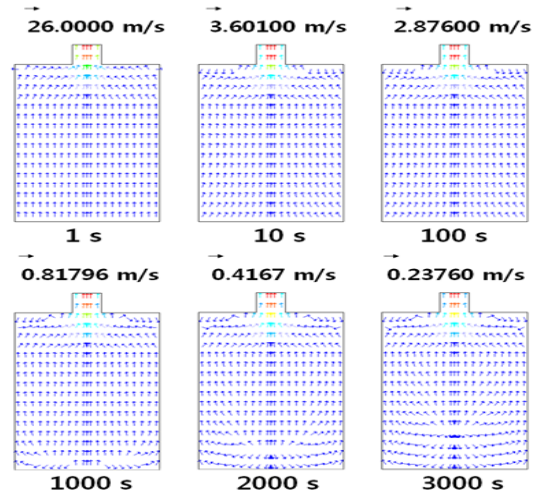


Fig. 7 The velocity distributions in a cross-section of the hydrogen storage tank at 1s, 10s, 100s, 1000s, 2000s, 3000s

율로 인해 높은 평형 압력이 예측되었다. 하지만, 수소의 방출이 빠르게 진행되면서 H/M 비율 및 용기 온도가 모두 감소하기 때문에 평형 압력은 용기 전면에 걸쳐 균일한 분포를 보이며 급격하게 감소한다. 그리고 100초 이후에도 벽면과 중심부의 평형 압력은 균일한 분포를 나타내는데 이는 온도 분포 (Fig. 4)와 H/M 비율 분포 (Fig. 5)가 시간이 흐름에 따라 불균일해지는 경향과는 다르다는 것을 알 수 있다. 이는 100초 이후에 벽면의 온도는 중심부보다 높은 반면 H/M 비율은 수소의 효율적 방전 때문에 중심부에 비해 낮기 때문이다.

Fig. 7은 시간 경과에 따른 수소 저장용기 단면의 수소 속도 분포를 보여준다. 식 (2)를 참조하면, 다공성 금속 용기 내에서 수소 가스의 속도 크기는 수소 방출률에 비례한다는 것을 알 수 있다. 따라서, 수소 속도 크기는 반응초기의 높은 H/M 비율로 인한 빠른 수소 방출률 때문에 매우 크지만 (1초), 1초 이후부터는 수소의 방출률이 점점 감소하기 때문에 수소 속도의 크기 또한 감소한다. 한편, 수소 가스의 방향은 100초 이전에는 벽면에서부터 용기 출구로 흘러 나가지만 1000초 이후에는 중심부에서 용기 출구로 흘러 나가는 것을 확인할 수 있다. 이러한 결과는 수소 방출이 진행되어 방출말기에는 용기 외벽은

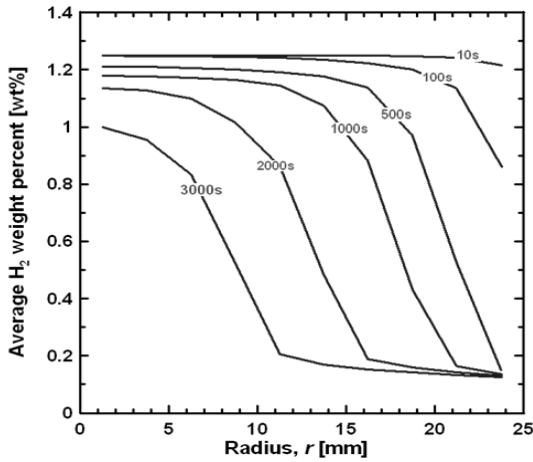


Fig. 8 The amount of hydrogen desorbed in the metal vessel (wt %) as a function of the radial location from the center ($r=0$ mm) to the wall ($r=25$ mm) at different elapsed times of hydrogen desorption(10s, 100s, 500s, 1000s, 2000s, 3000s)

수소방출이 거의 완료가 된 반면 중심부는 아직 수소 방출이 진행되고 있기 때문이다. 이러한 용기 내부에서의 속도 분포는 앞에서 논의된 온도 및 H/M 비율의 분포와 일관된 결과임을 확인할 수 있다.

Fig. 8은 시간이 경과함에 따라 용기 중심부에서 반경 방향으로의 금속에 방출된 수소 질량비(wt%)를 나타낸 그래프이다. 반응이 진행됨에 따라 벽면에서 저장된 수소의 양은 외부로부터 효율적 가열을 통해 급격히 감소하지만 중심부는 효율적인 수소 방출이 이루어지지 못해서 3000초 이후에도 1wt%의 수소가 아직 남아있음을 Fig. 7을 통해 확인할 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 금속수소화물의 수소 방전 시 일어나는 핵심 현상을 보다 상세히 연구하기 위해 3차원 수소 방출모델이 개발되었다. 개발된 수소 방출 3차원 모델은 원통형 LaNi_5 수소저장용기에 적용되어 실제 측정된 실험데이터와 비교를 통해 그 정확성이 입증되었다. 또한, 수소 방출 반응이 진행되는 동안 온도, 평형압력, 수소-메탈의 원자수 비율(H/M

ratio), 그리고 수소가속도 분포 등을 상세히 보여 줌으로써 LaNi_5 용기에 수소 방출 시 발생하는 주요 물리/화학적 현상들을 분석하였다. 시뮬레이션을 통해 발견된 핵심내용을 정리하면 다음과 같다.

- 1) 수소 방출 반응 초기단계에는 용기 내부 전면에서 걸쳐 균일하게 반응이 일어나는 반면 시간이 지나면서 가열 효과로 인해 용기의 벽면에서 수소 방출률이 높아진다. 결과적으로 용기내부에서 온도 및 H/M 비율 분포의 불균일도는 수소방전시간이 지남에 따라 점점 커지게 된다.
- 2) 방출 반응은 저장 반응보다 상대적으로 반응 속도가 느리기 때문에 0.4bar 출구압력 기준으로 3000초 이상 경과한 후에도 LaNi_5 수소저장용기 중심부에는 1wt% 정도의 수소가 아직 남아 있는 것으로 예측되었다. 이러한 결과는 금속수소화물 수소 방전 성능은 수소저장용기의 디자인 및 열전달 특성뿐만 아니라 수소출구압력조건이 중요한 요소라는 사실을 입증해준다.

본 논문에서 소개된 수소 방출 모델은 선행논문에서 개발된 저장모델과 함께 금속수소화물 수소충·방전 특성에 대한 이해도를 높이고 용기의 디자인 및 작동조건 최적화연구에 도움을 줄 것으로 기대된다.

후 기

본 논문은 국제핵융합실험로(ITER) 공동개발사업의 일환으로 수행되었으며, 지식경제부 지정 인하대학교 자동차동력계부품 지역혁신센터(INHA RIC)의 지원에 의해 수행된 연구 결과입니다. 수소방출 수치모델 시뮬레이션에 필요한 기술적인 부분은 CD-Adapco Korea를 통해 지원받았습니다.

참 고 문 헌

- 1) 남진무, 강경문, 주현철, “금속수소화물 수소 저장 용기 내부의 수소흡장에 대한 수치해석

- 적 연구”, 한국수소 및 신에너지학회 논문집, Vol. 21, No. 4, 2010, pp. 249-257.
- 2) H. Dhaou, S. Mellouli, F. Askri, A. Jemni and S. Ben Nasrallah, “Experimental and numerical study of discharge process of metal-hydrogen tank”, Int. J. Hydrogen Energ., Vol. 32, No. 12, 2007, pp. 1922-1927.
 - 3) C. A. Chung and C. J. Ho, “Thermal-fluid behavior of the hydriding and dehydriding processes in a metal hydride hydrogen storage canister”, Int. J. Hydrogen Energ., Vol. 34, 2009, pp. 4351-4364.
 - 4) S. Mellouli, F. Askri, H. Dhaou, A. Jemni and S. Ben Nasrallah, “Numerical study of heat exchanger effects on charge/discharge times of metal-hydrogen storage vessel”, Int. J. Hydrogen Energ., Vol. 34, No. 7, 2009, pp. 3005-3017.
 - 5) S. Ben Nasrallah and A. Jemni, “Heat and mass transfer models in metal-hydrogen reactor”, Int. J. Hydrogen Energ., Vol. 22, No. 1, 1997, pp. 67-76.
 - 6) H. Dhaou, F. Askri, M. Ben Salah, A. Jemni, S. Ben Nasrallah and J. Lamloumi, “Measurement and modelling of kinetics of hydrogen sorption by LaNi₅ and two related pseudobinary compounds”, Int. J. Hydrogen Energ., Vol. 32, No. 5, 2007, pp. 576-587.
 - 7) A. Jemni, S. Ben Nasrallah and J. Lamloumi, “Experimental and theoretical study of a metal-hydrogen reactor”, Int. J. Hydrogen Energ., Vol. 24, 1999, pp. 631-644.