

## 용융탄산염 연료전지용 공기극과 연료극의 저항 모델링

이창환<sup>1,†</sup> · 정정열<sup>2</sup>

<sup>1</sup>서울과학기술대학교 기계시스템디자인공학과, <sup>2</sup>광운대학교 화학공학과

### Modelling of the Resistance Model for Anode and Cathode for Molten Carbonate Fuel Cells

CHANG-WHAN LEE<sup>1,†</sup>, JUNG-YUL JUNG<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Mechanical System Design Engineering, Seoul National University of Science and Technology, 232 Gongneung-ro, Nowon-gu, Seoul 01811, Korea

<sup>2</sup>Department of Chemical Engineering, Kwangwoon University, 20 Gwangun-ro, Nowon-gu, Seoul 01897, Korea

†Corresponding author :  
cwlee@seoultech.ac.kr

Received 1 June, 2018  
Revised 27 June, 2018  
Accepted 30 June, 2018

**Abstract >>** From the experiments of various temperature and gas compositions, total resistance which is composed of ohmic resistance, anode resistance, cathode resistance and Nernst loss was calculated with simple assumption. In this work, the anode and the cathode resistance was modelled with new equation which can account for the correlation between the operating temperature and the gas composition. The proposed model can predict the resistance with maximum error of 2.57% and employed in the simulation of molten carbonate fuel cells.

**Key words :** MCFC(용융탄산염 연료전지) Anode(연료극), Cathode(공기극), Performance model(성능 모델), Polarization(분극저항)

## 1. 서론

최근 환경오염 문제, 화석 연료 발전소의 위험성 등에 따른 대체 에너지 개발의 중요성이 대두되면서 연료전지에 대한 연구, 개발이 활발하게 진행되고 있다. 용융탄산염 연료전지는 650°C의 고온에서 운전하기 때문에 촉매 없이 전기화학반응이 잘 일어나며, 폐열의 재사용이 가능하다는 장점이 있다<sup>1)</sup>.

일반적으로 용융탄산염 연료전지의 성능은 전류 밀도-셀전압의 특성으로 표현한다. 이 때, 전류 밀도

(current density)는 연료전지의 총 저항에 반비례한다. 용융탄산염 연료전지에서 총 저항은 Ohmic 저항, 연료극 분극 저항, 공기극 분극 저항의 합이다<sup>2)</sup>. Ohmic 저항, 연료극, 공기극 분극 저항은 연료전지의 작동 환경(온도, 가스 이용률, 가스 조성)에 따라 다르다. 따라서 용융탄산염 연료전지의 정확한 성능 예측을 위해서는 정확한 Ohmic 저항, 연료극 분극 저항, 공기극 분극 저항의 계산이 필요하다<sup>3)</sup>.

연료극과 공기극의 저항 모델링을 통하여 연료극과 공기극의 성능을 비교, 분석할 수 있고, 각 가스에

성능 의존성<sup>4)</sup>을 분석할 수 있다. 또한 장기 운전성 평가에 큰 도움이 될 수 있다. 장시간 운전 중 가스 조성을 바꾸어 셀을 평가하여 연료극과 공기극 저항을 분리하게 되면, 시간에 따른 연료극 분극 증가, 공기극 분극 증가를 분리할 수 있다<sup>5)</sup>. 여기서 전체 분극 저항이 어디에 원인이 있는지 분석할 수 있다.

본 연구에서는 용융탄산염 연료전지의 온도 및 가스 투입 조건(온도, 가스 이용률, 가스 조성) 등의 실험 결과로부터 Ohmic 저항, 연료극 분극 저항, 공기극 분극 저항을 계산하고, 이를 모델링하였다.

## 2. 용융탄산염 연료전지의 저항

### 2.1 용융탄산염 연료전지의 전류밀도 분포 계산

용융탄산염 연료전지의 전체 비가역 저항은 Ohmic 저항, 연료극 분극 저항, 공기극 분극 저항으로 구성된다. 전지에서 전압( $V_{cell}$ )은 식 (1)과 같이 네른스트 전위( $E_{Nernst}$ )에서 총 분극 저항( $R_{irr}$ )에 의한 손실을 뺀 값으로 정의된다<sup>3)</sup>.

$$V_{cell} = E_{Nernst}^{x,y} - i^{x,y} R_{total}^{x,y} \quad (1)$$

여기서 총 저항( $R_{total}$ )은 Ohmic 저항( $R_{ohm}$ ), 연료극 분극 저항( $R_A$ ), 공기극 분극 저항( $R_C$ )의 합이다. 네른스트 전위는 식 (2)와 같이 정의된다.  $E^0$ 는 엔탈피에 의하여 결정되는 전위이고,  $E_T$ 는 가스 농도에 의해 결정되는 전위차이다.

$$E_{Nernst} = E^0 + E_T \\ = E^0 + \frac{RT}{2F} \ln \left( \frac{P_{H_2, Anode} \sqrt{P_{O_2, cathode}} P_{CO_2, cathode}}{P_{H_2O, Anode} P_{CO_2, anode}} \right) \quad (2)$$

따라서 용융탄산염 연료전지에서 전류 밀도( $i_{x,y}$ )는 식 (3)과 같다.

$$i^{x,y} = \frac{E_{Nernst}^{x,y} - V_{cell}}{R_{total}} = \frac{E_{Nernst}^{x,y} - V_{cell}}{R_{ohm} + R_A + R_C} \quad (3)$$

이에 따라,  $E_{Nernst}$ 와  $R_{total}$ 을 알고 있으면, 해당하는 전위 차에 따른 전류 밀도를 계산할 수 있다.  $E_{Nernst}$ 는 온도와 가스 농도에 의해 정의되는 값이므로 가스 농도를 알면 계산할 수 있다. 하지만 Ohmic 저항, 연료극 분극 저항, 공기극 분극 저항의 합인  $R_{total}$ 은 온도, 가스농도 분포 모두 영향을 받기 때문에, 이에 대한 정확한 모델을 알아야 전류밀도를 계산할 수 있다.

### 2.2 분극 저항 모델링

일반적으로 연료전지의 Ohmic 저항은 전해질, 셀 프레임 구조, 집전판, 온도에 따라 결정된다. 특히 Ohmic 저항은 온도가 달라짐에 따라 큰 차이를 보이므로, 온도에 대한 함수를 사용하여 표현한다. 이 때, Arrhenius type equation<sup>5)</sup>을 사용하여 모델링 한다.

Yuh와 Selman<sup>2)</sup>은 연료극 분극 저항과 공기극 분극 저항은 식 (4)와 같이 표현하여, 온도와 각 화학종의 농도영향임을 보고한 바 있다.

$$R_a = 2.27 \times 10^{-9} \exp\left(\frac{6435}{T}\right) P_{H_2}^{-0.42} P_{CO_2}^{-0.1742} P_{H_2O}^{-1.0} \\ R_c = 7.51 \times 10^{-10} \exp\left(\frac{9289}{T}\right) P_{O_2}^{-0.43} P_{CO_2}^{-0.09} \quad (4)$$

연료극과 공기극 가스 농도 분포의 경우, 각 가스 분압에 일정한 지수를 갖는다. 하지만 온도에 따라 가스 분압에 일정한 지수로 영향을 받지 않기 때문에, 온도에 따른 가스 분압의 영향을 고려할 수 없다. 본 연구에서는 이 부분을 새로운 식으로 표현하고자 한다. 각 가스 분압의 지수를 Arrhenius type equation을 사용하면 온도에 의한 영향을 포함할 수 있기 때문에, 더 정확히 연료전지의 성능을 모사할 수 있다.

### 2.3 네른스트전압에 따른 전압 손실

일반적으로, 분극 저항을 측정하기 위해서는 가스 이용률이 매우 낮은 button cell을 이용하여 실험을 진행한다. 이 경우, 이용률은 보통 1-5% 범위에 위치

한다. 이용률이 낮은 경우, 전기화학 반응이 발생하여도 가스 분압의 차가 크게 발생하지 않기 때문에 네른스트 손실(Nernst loss)을 무시할 수 있다. 하지만 이용률이 높은 경우, 이를 전체 저항에서 고려해 주어야 한다.

### 3. 용융탄산염 연료전지 성능실험

#### 3.1 용융탄산염 연료전지 실험 조건

실험을 통하여 분극 저항을 분리할 수 있다. 이를 위해 단위전지를 이용한 실험을 진행하였다. 실험은 KIST 연료전지 연구센터에서 진행하였다. 반응 면적  $100 \text{ cm}^2$ 의 단위 전지를 사용하였고<sup>6)</sup>, 전해질은  $(52+48) \text{ mol\% (Li+Na)}_2\text{CO}_3$ 를 사용하였다. 연료극은 Creep 저항성 향상을 위하여 Cr이 첨가된 Ni-5%Al+5wt%Cr을 사용하였고, 공기극은 일반적인 Lithiated NiO를 사용하였다. 실험 조건은 Table 1과 같다.

실험을 통하여 운전 온도와 가스 조성에 대하여 공기극과 연료극의 성능을 분석하고 한다. 따라서 온도는  $580^\circ\text{C}$ ,  $600^\circ\text{C}$ ,  $620^\circ\text{C}$ ,  $650^\circ\text{C}$ ,  $670^\circ\text{C}$ 에 대하여 실험하였다. 마찬가지로, 가스 조성에 대하여 연료극과 공기극의 분극 저항을 구해야 하기 때문에, 연료극은 수소 분율 0.2에서 0.8까지 0.1 간격,  $\text{CO}_2$ 는 0.05에서 0.2로 0.05 간격으로 실험하였다. 공기극은  $\text{O}_2$  농도 0.2에서 0.7까지 0.1 간격으로,  $\text{CO}_2$  농도는 0.2에서 0.5까지 0.1 간격으로 실험하였다. 이 때, 공기극의 가스 이용률(gas utilization)은 0.4, 연료극의

가스 이용률은 0.1로 고정하였다.

#### 3.2 용융탄산염 연료전지 실험 결과

연료극과 공기극의 저항 모델을 위하여, 실험은 각각의 운전 온도( $580^\circ\text{C}$ ,  $600^\circ\text{C}$ ,  $620^\circ\text{C}$ ,  $650^\circ\text{C}$ ,  $670^\circ\text{C}$ )에 대하여, 16가지의 가스 조합에 대하여 실시하였다.  $100 \text{ cm}^2$  단위전지 실험 결과의 일부를 Fig. 1에 나타내었다. 운전 온도는  $620^\circ\text{C}$ 이고, 연료극의 이용률은 10%, 공기극의 이용률은 40%이다. Case 1은 가스 조성은 연료극의 경우  $\text{H}_2:\text{CO}_2:\text{H}_2\text{O}=0.72:0.18:0.1$ 이며, 공기극의 경우  $\text{N}_2:\text{O}_2:\text{CO}_2=0.55:0.15:0.3$ 이다. Case 2는 연료극 가스 조성이  $\text{H}_2:\text{CO}_2:\text{H}_2\text{O}=0.3:0.2:0.1:0.4$ 이며, 공기극 가스 조성은 case 1과 동일하다. Case 3은 연료극 가스 조성은 case 1과 동일하고 공기극 가스 조성은  $\text{N}_2:\text{O}_2:\text{CO}_2=0.3:0.4:0.3$ 이다. 세 경우 모두 I-V 곡선을 직선으로 표현 가능하고, 이 때 직선의 기울기가 저항을 모두 더한 전체 비가역 저항이 된다. 총 비가역 저항에서 나머지 저항을 계산하는 경우, 연료극과 공기극 반응에서의 저항을 계산할 수 있다.

### 4. 총 비가역저항 계산

#### 4.1 Ohmic 저항(Ohmic resistance)

Ohmic 저항은 electro impedance spectroscopy (EIS)

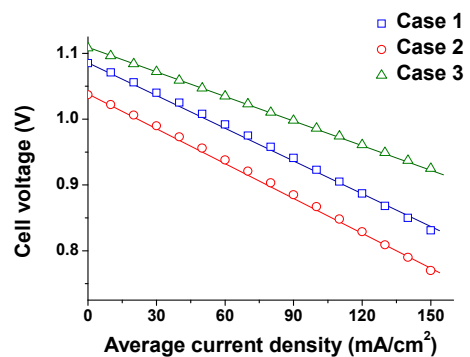


Fig. 1. Experimental results of internal resistance with respect to temperature and fitting results using Eq. (5)

Table 1. MCFC Standard operation condition

Variable	Specification
Sealing pressure	2 kgf/cm <sup>2</sup>
Anode	Ni-5%Al+5wt%Cr
Cathode	Lithiated NiO
Matrix	$\gamma$ -LiAlO <sub>2</sub>
Electrolyte	$(52+48) \text{ mol\% (Li+Na)}_2\text{CO}_3$
Active area	$100 \text{ cm}^2$

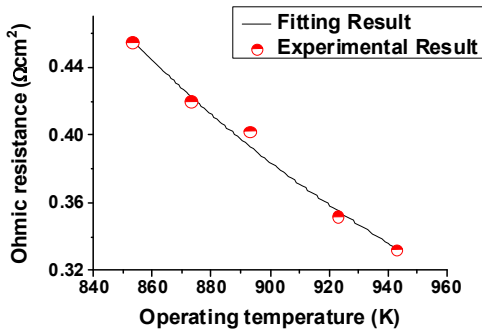


Fig. 2. Fitting result of the ohmic resistance with respect to the operating temperature

로 측정할 수 있다. 온도별로 Ohmic 저항을 측정하였다. 그리고 Ohmic 저항의 경우 온도와 반응속도의 표현식인 Arrhenius type equation을 사용하여 표현할 수 있다. 이와 같이 피팅된 식은 식 (5)와 같다. 피팅은 Origin 2017을 사용하였다. Fig. 2은 온도에 따른 Ohmic 저항 측정 결과와 이를 식 (5)를 사용한 피팅 결과를 보여준다.

$$R_{ohm} = 1.685 \times 10^{-2} \exp\left(\frac{2813.6}{T}\right) \quad (5)$$

#### 4.2 네른스트 손실(Nernst loss)

본 연구에서는 단순 가정을 통하여 네른스트 손실(Nernst loss)에 의한 저항을 계산하였다. 전기 화학 반응이 발생하지 않는 경우, 일정한 가스 농도를 유지한다. 따라서 식 (2)의  $E_T$ 가 일정한 값을 유지한다. 하지만 전기화학반응이 발생함에 따라 소모된 가스의 농도는 감소한다. 따라서 반응 가스가 소모되며, 출구 쪽으로 진행할수록 가스의 농도 구배가 발생한다. 이에 따라  $E_T$ 가 감소한다. 여기서 발생하는 전압 손실이 네른스트 손실(Nernst loss)이다. 전류 밀도가 증가함에 따라, 농도 구배 발생이 더 증가하기 때문에 네른스트손실 역시 증가한다.

본 연구에서는 네른스트 손실에 의한 전압 손실을 평균 전류밀도로부터 계산하였다. 특정 평균 전류밀도에서 이용률이 결정되는 경우, 출구에서의 가스량

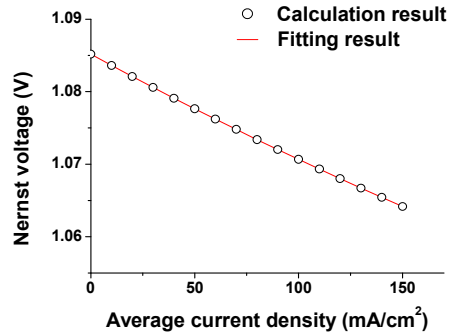


Fig. 3. Distribution of Nernst voltage with respect to current density and the linear fitting result

은 간단한 계산을 통하여 구할 수 있다. 가스 분율과 이용률로부터 분압을 계산하고, 이를 네른스트 전압, 식 (2)에 위에서 계산한 가스 농도를 대입하면, 전류 밀도에 따른 네른스트 전압에 대한 분포를 구할 수 있다. 그리고 이를 평균을 구하여 손실로 계산하였다.

이를 100 cm<sup>2</sup>의 반응 면적을 갖고 공기극과 연료극 모두 이용률이 150 mA/cm<sup>2</sup>에서 10%이고 작동 온도 893 K인 경우에 대하여 계산하면 평균 전류밀도에 대해  $E_{Nernst}$ 를 구할 수 있다. 여기서 평균  $E_{Nernst}$ 를 구하고, 평균 전류밀도 (i)와의 관계를 그래프로 표현하면 Fig. 3와 같다.

이 때, 150 mA/cm<sup>2</sup>에서 네른스트 손실에 의한 전압 강하는 21 mV이다. 네른스트 전압과 평균 전류밀도의 관계는 선형 비례관계로 표현 가능하다. 평균  $E_{Nernst}$ 와 전류밀도 관계는 식 (6)과 같다. 여기서  $E_{Nernst}^0$ 는 개회로 상태에서의 네른스트 전압이다. 식 (6)을 사용하면, 네른스트 손실을 저항으로 표기할 수 있고, 그 값은 식 (6)의 비례상수가 된다. Fig. 3에서의 Nernst 저항은 그래프의 기울기인 0.140 Ωcm<sup>2</sup>이다. 또한 전류 밀도의 관계식 식 (3)에서, 네른스트 전압에 대한 표현을 식 (7)과 같이 표현할 수 있다.

$$E_{Nernst} = E_{Nernst}^0 - i_{avg} \times R_{Nernst} \quad (6)$$

$$i = \frac{E_{Nernst}^0 - V_{cell}}{R_{ohm} + R_a + R_c + R_{Nernst}} \quad (7)$$

### 4.3 연료극 분극 저항

Fig. 2의 case 1에 대한 I-V curve의 식은  $V=1.086-1.7 \times i_{\text{avg}}$ 로 표현된다. 여기서  $1.7 \Omega\text{cm}^2$ 은 전지의 총 비가역 저항이다. 총 비가역 저항은 연료극 분극 저항, 공기극 분극 저항, Ohmic 저항, 네른스트 저항의 합으로 구성된다.  $620^\circ\text{C}$  운전 결과이므로, Ohmic 저항은  $0.402 \Omega\text{cm}^2$ 이다. 네른스트 저항값은  $0.1756 \Omega\text{cm}^2$ 이다. 따라서 전체 분극 저항에서 이 두 값을 빼면, 연료극 분극 저항과 공기극 분극 저항의 합을 계산할 수 있다.

많이 사용하는 Yuh와 Selman<sup>2)</sup>의 분극 저항 모델링에서, 공기극 분극 저항을 공기극의  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$  분압으로 표현하고, 연료극 분극 저항은 연료극의  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ 의 분압으로 표현된다. 본 연구에서는 분압에 대한 영향(지수)을 온도에 대한 함수로 표현하였다. 분압의 지수는 반응 차수와 관련이 있다. 온도에 따라 달라지므로, 온도에 대한 함수로 표현하는 것이 분극 저항을 더욱 정확히 표현할 수 있다. 연료극의 경우, 실험의 단순화를 위하여  $\text{H}_2\text{O}$ 의 분압과 분압에 대한 지수는 일정하다고 가정하였다. 따라서, 연료극과 공기극 분극을 식 (7)와 같이 표현할 수 있다.

$$\begin{aligned} R_a &= K_a P_{\text{CO}_2}^\alpha P_{\text{H}_2}^\beta P_{\text{H}_2\text{O}}^{-1.0} \\ R_c &= K_c P_{\text{CO}_2}^\gamma P_{\text{O}_2}^\delta \end{aligned} \quad (7)$$

여기서, 공기극 가스 분압, 연료극  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  분압을 고정하고 변수를  $\text{H}_2$  분압으로 표현하면, 연료극 저항( $R_a$ )과 공기극 저항( $R_c$ )의 합은 식 (8)이 되고, 이때  $R_c$ 는 일정한 값을 갖는다. 실험에서는 연료극  $\text{H}_2$  분압만을 변화하고, 나머지 가스 조성은 모두 동일하게 유지해 준다. 연료극의 밸런스 가스로  $\text{N}_2$ 를 사용하였다.

$$\begin{aligned} R_a + R_c &= K_a' P_{\text{H}_2}^\beta + R_c \\ K_a' &= K_a P_{\text{CO}_2} \end{aligned} \quad (8)$$

이 경우,  $K_a$ 와  $R_c$ 는 상수이므로, 연료극의  $\text{H}_2$  분압

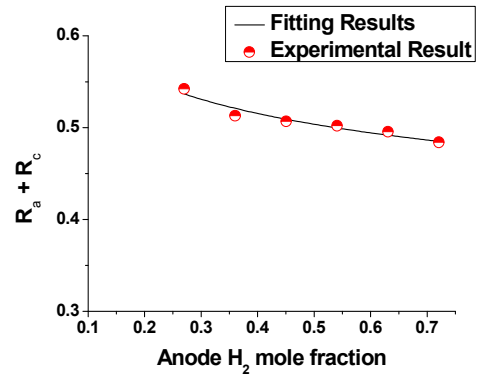


Fig. 4. Fitting result of  $R_a+R_c$  with respect to the anode  $\text{H}_2$  mole fraction at  $620^\circ\text{C}$

에 대해 위 식을 피팅해 주면, 연료극 저항에 대한  $\text{H}_2$  분압의 지수 ( $\beta$ )를 구할 수 있다. Fig. 4는  $620^\circ\text{C}$ , 공기극 가스 조성  $\text{Air}:\text{CO}_2=0.7:0.3$ 에서 수소 분율에 대하여  $R_a+R_c$ 를 피팅한 결과이다. 비선형 함수의 피팅은 Origin 2017을 사용하였다.

$$\begin{aligned} R_a &= 0.531 \times P_{\text{H}_2}^{-0.110} P_{\text{CO}_2}^{-0.115} & (580^\circ\text{C}) \\ R_a &= 0.382 \times P_{\text{H}_2}^{-0.095} P_{\text{CO}_2}^{-0.198} & (600^\circ\text{C}) \\ R_a &= 0.247 \times P_{\text{H}_2}^{-0.103} P_{\text{CO}_2}^{-0.304} & (620^\circ\text{C}) \\ R_a &= 0.239 \times P_{\text{H}_2}^{-0.145} P_{\text{CO}_2}^{-0.282} & (650^\circ\text{C}) \\ R_a &= 0.184 \times P_{\text{H}_2}^{-0.189} P_{\text{CO}_2}^{-0.349} & (670^\circ\text{C}) \end{aligned} \quad (9)$$

같은 방법으로,  $580^\circ\text{C}$ ,  $600^\circ\text{C}$ ,  $650^\circ\text{C}$ ,  $670^\circ\text{C}$ 에 대해서도  $\beta$ 를 구할 수 있다. 연료극에서  $\text{CO}_2$  농도를 조절하고, 나머지 가스(연료극  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , 공기극  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$ )의 농도를 일정하게 유지하면, 온도에 따른  $\text{CO}_2$  농도의 지수 ( $\alpha$ )를 구할 수 있다. 두 지수 ( $\alpha$ ,  $\beta$ )를 구한 경우, 식 (7)과 식 (8)을 사용하여 연료극에 대한 비례계수  $K_a$ 를 구할 수 있다. 온도에 따른 연료극의 저항은 식 (9)과 같다.

식 (9)에서 온도에 대하여  $K_a$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ 를 표현하면 식 (10)와 같다. 온도에 대한 영향은 Arrhenius type equation을 사용하였다.

$$\begin{aligned} R_a &= 3.39 \times 10^{-5} \exp\left(\frac{8094.3}{T}\right) \\ &\times P_{\text{H}_2}^{-2300.3 \times \exp\left(\frac{-8889.1}{T}\right)} \times P_{\text{CO}_2}^{-62.69 \times \exp\left(\frac{-4098.5}{T}\right)} \end{aligned} \quad (10)$$

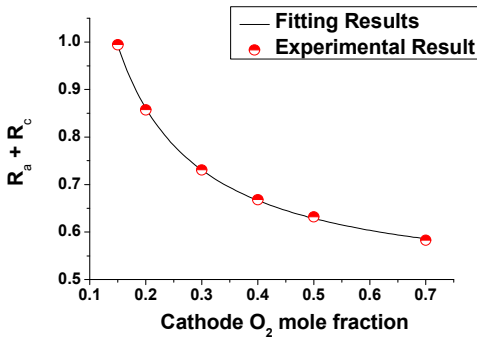


Fig. 5. Fitting result of  $R_a+R_c$  with respect to the cathode  $CO_2$  mole fraction at  $620^\circ C$

#### 4.4 공기극 분극 저항

같은 방법으로,  $580^\circ C$ ,  $600^\circ C$ ,  $620^\circ C$ ,  $650^\circ C$ ,  $670^\circ C$ 에 대하여 공기극 분극 저항을 계산할 수 있다. 공기극에 대한 분극 저항을 계산할 때는 연료극의 가스 투입을 고정하고 공기극의  $O_2$ ,  $CO_2$  농도를 변경하여 각 조건에서의 저항을 계산한다. 이 때, 공기극  $O_2$  농도를 변경하는 경우 공기극의  $CO_2$  농도를 고정하고, 공기극의  $CO_2$  농도를 변경하는 경우 공기극의  $O_2$  농도를 고정한다. 그리고 밸런스 가스로  $N_2$  가스를 사용하였다. Fig. 5는  $620^\circ C$ 에서 공기극  $CO_2$  농도에 따른 연료극 저항과 공기극 저항함이다.

온도에 따른 공기극 분극 저항을 계산해 보면 식 (11)과 같다. 작동 온도가 증가함에 따라  $O_2$  분압의 지수는 크게 변하지 않는 반면에,  $CO_2$  농도의 경우 큰 변화를 보인다. 이에 따라, 공기극  $O_2$  농도의 지수 ( $\gamma$ )는 온도에 따른  $\gamma$ 의 평균값을 사용하였고, 공기극  $CO_2$  농도의 지수 ( $\delta$ )는 온도에 따른 선형 비례를 사용하였다. 그리고 가스 농도에 대한 지수와 비례 상수를 온도에 대하여 표현하면, 식 (12)과 같이 표현할 수 있다.

$$\begin{aligned}
 R_c &= 0.271 \times P_{O_2}^{-0.989} P_{CO_2}^{0.480} & (580^\circ C) \\
 R_c &= 0.147 \times P_{O_2}^{-1.065} P_{CO_2}^{0.384} & (600^\circ C) \\
 R_c &= 0.102 \times P_{O_2}^{-1.045} P_{CO_2}^{0.334} & (620^\circ C) \\
 R_c &= 0.078 \times P_{O_2}^{-0.952} P_{CO_2}^{0.277} & (650^\circ C) \\
 R_c &= 0.049 \times P_{O_2}^{-0.998} P_{CO_2}^{0.175} & (670^\circ C)
 \end{aligned} \tag{11}$$

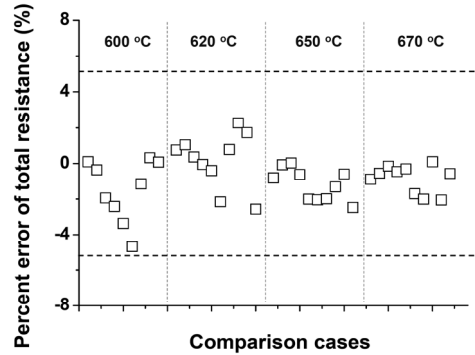


Fig. 6. Fitting result of the total resistance with respect to other operating conditions

$$\begin{aligned}
 R_c &= 1.95 \times 10^{-7} \exp\left(\frac{11803.5}{T}\right) \\
 &\times P_{O_2}^{-1.099} \times P_{CO_2}^{-2.4471 + (2487.8)}
 \end{aligned} \tag{12}$$

전체 저항은 식 (5)의 Ohmic 저항, 식 (9)의 네른스트손실, 식 (10)의 연료극 저항, 식 (12)의 공기극 저항으로 표현할 수 있다. 이 결과를 사용하여 전체 분극 저항의 실험 결과와 본 연구를 통하여 얻은 결과를 비교하였다.

Fig. 6은 평균 전류 밀도  $150 \text{ mA/cm}^2$ 에서 Ohmic 저항, 네른스트 손실, 연료극, 공기극 손실을 총 더한 비교 결과이다. 측정 결과와 해석 결과를 비교해 보면,  $620^\circ C$  이상에서 최대 오차 2.57%가 발생한다. 본 모델에서 제안한 해석 모델이 용융탄산염 연료전지의 성능을 예측할 수 있음을 확인하였다.

#### 4.5 해석모델 적용

앞서 구한 분극 저항 모델을 사용하여 1개 채널 형상에 대한 해석을 진행하였다. 그리고 이 해석 결과를 실험 결과와 비교하였다. 운전 조건은 Fig. 2의 case 1과 동일하다. 여기서 water gas shift reaction을 고려하지 않았다. 또한 전기 화학반응에서의 발열 역시 고려하지 않았다. 해석 모델은 기존 연구와 동일하며, 연료극, 공기극, Ohmic 저항 모델을 각각 식 (10), 식 (12), 식 (5)를 사용하였다.

Fig. 7은 새로운 해석 모델을 적용하였을 때의 전

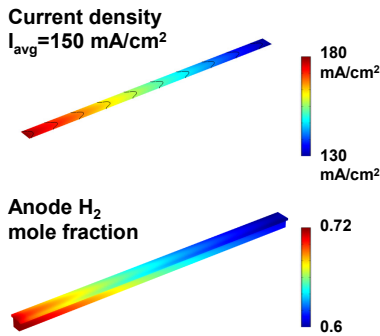


Fig. 7. Simulation result using the developed polarization model

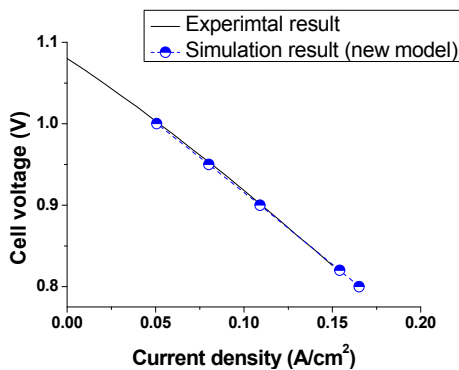


Fig. 8. Simulation result of the Average current density - Cell voltage curve using developed polarization model

류밀도 분포 및 연료극 H<sub>2</sub> 몰 분율 분포이다. Fig. 8은 실험, 해석 결과의 I-V 곡선이다. 실험 결과와 해석 결과는 동일한 결과를 보이는 것을 알 수 있다. 이를 통해 도출한 연료극, 공기극 분극이 용융탄산염 연료전지를 모사할 수 있음을 확인하였다.

## 5. 결론

본 연구에서는 새로 개발된 연료극(Ni-5%Al+5wt%Cr)에 대하여 저항을 표현할 수 있는 새로운 모델을 계산하였다. 실험 결과에서부터 Ohmic 저항, 네른스트 손실을 제외하고, 연료극 저항과 공기극 저항을 구하였다. 그리고 저항 모델이 각 극의 투입 가스에 비례한다는 가정 하에서 저항 모델을 계산하였다. 그리고 이를 실험 결과와 비교하여 개발된 해석

모델의 유효성을 검증하였다.

1) Ohmic 저항은 Arrhenius type식을 사용하여 피팅하였다. 네른스트 손실의 경우, 간단한 이론 모델을 만들어 손실을 계산하였다.

2) 연료극과 공기극 저항에서 반응 모델은 각 가스 분압의 지수는 온도에 따라 다른 값을 갖는다. 이를 온도에 대한 함수로 표현하였다.

3) 저항 모델은 620°C 이상에서 최대 오차 2.57%를 보였고, 이를 단위 전지 해석 모델에 적용하여 실험 결과 I-V 곡선과 비교하였다.

## 후 기

본 연구는 2018년도 산업통상자원부의 재원으로 한국에너지기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구 과제(No. 20163030031860)이다. 그리고 실험을 도와주신 한국과학기술연구원 연료전지 연구센터에 감사드립니다.

## References

1. R. O'Hyare, S. W. Cha, W. Collela, and F. B. Prinz, "Fuel cells - Fundamentals", New York, John Wiley & Sons, 2006.
2. C. Y. Yuh and J. R. Selman, "The polarization of molten carbonate fuel cell electrodes. 1. Analysis of steady-state polarization data", J. Electrochem. Soc., Vol. 138, 1991, pp. 3642-3648.
3. C. W. Lee, S. J. Lee, and C. Y. Lim, "Design of Cell Frame Structure of Unit Cell for Molten Carbonate Fuel Cell Using CFD Analysis", J. of Korean Hydrogen & New Energy Soc., Vol. 29, 2018, pp. 56-63.
4. G. Wilemski, "Simple porous electrode models for molten carbonate fuel cells", J. Electrochem. Soc., Vol. 130, 1983, pp. 117-121.
5. H. Morita, M. Komoda, Y. Mugikura, Y. Izaki, T. Watanabe, and Y. Masuda, "Performance analysis of molten carbonate fuel cell using a Li/Na electrolyte", Journal of Power Sources, Vol. 112, 2002, pp. 509-518.
6. C. W. Lee, M. Lee, S. C. Chang, S. P. Yoon, H. C. Ham, and J. Han, "Effect of the flow directions on a 100 cm<sup>2</sup> MCFC single cell with internal flow channels", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 41, 2016, pp. 18747-18760.