

2상 흐름을 고려한 직접메탄올연료전지의 3차원 모델링 및 전산모사

김홍성, 정일용, 문 일*, Valeri A. Danilov
연세대학교
(idbioo@yonsei.ac.kr*)

액체 메탄올을 원료로 하는 직접메탄올연료전지(DMFC)에 대한 3차원 모델링을 수행하였다. 액체공급 DMFC 시스템에서는 환원전극에서의 메탄올 산화반응으로 CO_2 가 생성되고 물과 메탄올의 기화와 응축이 전 운전범위에 걸쳐 일어나므로 기상과 액상을 모두 포함하는 2상 흐름(2-phase flow)을 고려하였으며, 3차원으로 반응물질의 농도변화와 전류밀도 분포를 관찰할 수 있도록 모델링을 수행하였다. DMFC의 성능저하 현상을 규명하기 위해 메탄올 crossover 현상과 이로 인해 산화전극에서 일어나는 혼합 포텐셜(Mixed potential)의 현상을 전산모사 하였고, 또한 CO_2 의 농도분포를 계산하여 CO_2 의 양에 따른 연료전지의 성능에 미치는 영향을 예측하였다. 연료인 메탄올 수용액과 공기가 공급되는 유로를 포함하는 환원전극과 산화전극의 Diffusion layer는 전기화학반응은 일어나지 않고 확산 및 전달현상만 일어난다고 가정하였다. Catalyst layer에서는 전기화학반응이 일어나 발생하는 CO_2 양과 메탄올 Crossover양을 계산하였고, 전기화학반응은 Butler-Volmer 식을 사용하였다. 모델링은 메탄올의 산화반응과 산소의 환원반응을 중심으로 물질전달 현상을 규명하고, 반응 메커니즘을 구성하였다. 이와 같이 구성된 모델을 바탕으로 메탄올의 농도 및 유량을 변화시켜 CFD 모델링을 수행하였으며, 그 결과 연료전지의 성능에 영향을 주는 성능인자의 분석을 통해 연료전지 시스템의 운전조건을 최적화 할 수 있다.