분자동역학 시뮬레이션 및 실험 기법을 통한 Ni-Al 합금 저온 제조법의 이해

이민재[1,2], 이상헌[2], 함형철[2], 장성철[2], 윤성필[2], 한종희[2,*],
남석우[2], 윤도영[1]
[1]광운대학교; [2]한국과학기술연구원

용융탄산염 연료전지(MCFC)의 연료극은 우수한 creep 및 소결 저항성이 요구되어 Ni-Al 합금이 연료극용 물질로 사용된다. 그러나 Ni-Al 합금은 가격이 비싸며 일부 수입금지 품목이기 때문에 공급에 어려움이 있었다. 하지만 진공 조건에서 $AlCl_3$를 촉매로 이용한 화학증착법을 사용하면 효과적으로 저온에서 Ni-Al 합금 제조가 가능하다. 본 연구에서는 저온에서 Ni-Al 합금 제조 및 소결 현상 방지를 위하여 온도와 $AlCl_3$ 함량변화 등에 대한 연구를 진행하였다. 또한 분자동역학을 통하여 NVT 조건에서 저온 조건의 Ni-Al 합금에서 Al의 확산 현상에 대한 시뮬레이션을 진행하였다.