

## 고체 산화물 연료전지의 공기극 유로내 크롬 피독에 관한 전산해석

박 준근<sup>1)</sup>, 배 중면<sup>2)</sup>, 이 신구<sup>3)</sup>, Heinz Nabelek<sup>4)</sup>

### Numerical analysis of chromium deposition through the SOFC cathode channel

Joonguen Park, Joongmyeon Bae, Shinku Lee, Heinz Nabelek

**Key words** : chromium(크롬), deposition(피독), SOFC(고체산화물연료전지), cathode(공기극)

**Abstract** : SOFC is a high temperature fuelcell with many advantages, but it also have several demerits. One of the issues is cathode poisoning of Cr coming from stainless steel interconnects. Diffusion process of Cr evaporated from the surface of interconnect steel was calculated by using CFD technique to understand factors for Cr deposition. It has been cleared that factors concerned in Cr deposition and how they affect Cr deposition. Major variables for Cr deposition are diffusion coefficient, air velocity and temperature. If diffusion coefficient decreases, Cr concentration increases in the air but decreases on the cathode surface. Increasing in air velocity, Cr concentration decreases in the air and on the cathode surface. Increase in temperature leads to rising Cr concentration on the cathode surface because of diffusion coefficient increment.

#### Nomenclature

- c: concentration of Cr<sup>6+</sup> species in the air channel
- D: diffusion coefficient of Cr<sup>6+</sup> species in air, m<sup>2</sup>/s
- v: air velocity, m/s
- w: width, m
- h: height, m
- α: evaporation coefficient, m/s
- c<sub>0</sub>: Cr density in t도 bipolar plate, g/cm<sup>3</sup>
- T<sub>0</sub>: reference temperature, K
- E<sub>a</sub>: activation energy, kJ/mol
- A: pre-exponential factor, ms<sup>-1</sup>
- D<sub>0</sub>: reference diffusion coefficient, m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>

#### subscrip

- g: gas state
- s: solid state

#### 1. 서론

고체 산화물 연료전지(SOFC)는 고온에서 동작하는 연료전지의 한 종류로서, 높은 전기변환율, 우수한 환경친화성, 다양한 연료사용, 폐열 이용 가능 등의 장점을 가지고 있다.<sup>1)</sup> 그러나 SOFC 시스템을 상용화하기 위해서는 해결되어야 하는 몇 가지 문제점이 있으며 그 중 하나가 크롬에 의한 공기극 피독현상이다.<sup>2)</sup> 평판형 SOFC 스택을 구성하는 분리판으로는 크롬 합금이 사용된다. 고온

- 
- 1) 한국과학기술원 기계항공시스템 학부  
E-mail : joonguen@kaist.ac.kr  
Tel : (042)869-3085 Fax : (042)869-8207
  - 2) 한국과학기술원 기계항공시스템 학부  
E-mail : jmbae@kaist.ac.kr  
Tel : (042)869-3085 Fax : (042)869-8207
  - 3) 한국과학기술원 기계항공시스템 학부  
E-mail : s.k.lee@kaist.ac.kr  
Tel : (042)869-3085 Fax : (042)869-8207
  - 4) Juelich, Germany  
E-mail : h.nabelek@fz-juelich.de  
Tel : +49-2461-61-3271

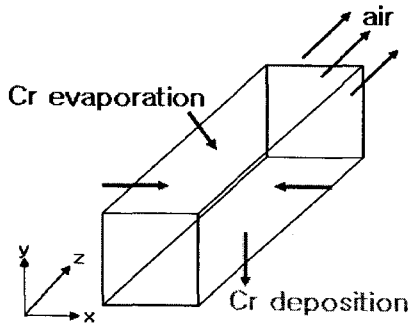
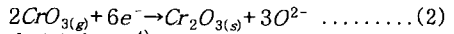
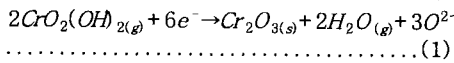


Fig. 1 model

의 환경에서 분리판에 포함된 크롬이 공기극 유로 속의 공기로 증발되고 확산을 통해 공기극과 전해질의 접촉면으로 이동한다. 크롬이 다공성매질인 공기극의 기공을 막음으로서 공기극의 성능감소가 발생한다. 공기극의 재질로서 크롬합금을 사용하는 경우에 비해 순수한 세라믹을 사용하는 경우 공기극의 성능감소가 거의 일어나지 않는다는 실험결과<sup>3)</sup>가 크롬 피독으로 인한 성능감소를 뒷받침한다. 본 논문에서는 공기극 유로내 크롬의 D(Diffusion coefficient)와 유로를 흐르는 공기의 속도가 크롬의 공기극 표면에 미치는 영향에 관하여 살펴보았다.

## 2. 지배방정식 및 경계조건

Fig 1은 해석을 위한 공기극 유로의 형상이다.



식 (1)과 (2)<sup>4)</sup>는 공기 중의 크롬이 고체표면에 침적되는 과정을 나타내는 화학반응식이다.

### 2.1 0차원 비정상상태

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c - \frac{v}{L} c \dots\dots(3)$$

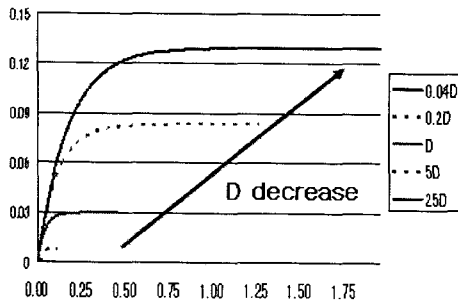


Fig. 2 air channel(Diffusion coefficient)

Table 1 grid dimension & coefficient

|                      |                        |  |                        |
|----------------------|------------------------|--|------------------------|
| h=w[mm]              | 1.5                    | D[m <sup>2</sup> /s]                             | 2.25*10 <sup>-5</sup>  |
| L[mm]                | 100                    | α [m/s]  | 2.75*10 <sup>-14</sup> |
| T <sub>0</sub> [°C]  | 800                    | c <sub>0</sub> [g/cm <sup>3</sup> ]              | 1.35                   |
| A[ms <sup>-1</sup> ] | 7.47*10 <sup>-11</sup> | E <sub>a</sub> [kJ/mol]                          | 69                     |
|                      |                        | D <sub>0</sub> [m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ] | 2.25*10 <sup>-5</sup>  |

식 (3)을 이용하여 xy 단면에서 발생하는 0차원 비정상상태를 해석한다. 이를 통해 시간에 따른 크롬 피독 변화 경향을 파악할 수 있다

### 2.2 1차원 정상상태

$$0 = \frac{(2h+w)ac_0}{wh} - \frac{2Dc}{h^2} - v \frac{\partial c}{\partial z} \dots\dots(4)$$

식 (4)를 이용하여 유로의 길이방향(z 방향)에 따른 크롬 피독을 정상상태로 해석한다.

### 2.3 온도 변화

$$a = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \dots\dots(5)$$

$$D = D_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1.5} \dots\dots(6)$$

식 (5), (6)을 이용하여 정상상태에서 온도변화에 따른 크롬 피독 변화를 살펴보고자 한다.

### 2.3 경계조건

c(x,y,t=0) = 0 공기극 표면

$$D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=\pm w/2} = \pm ac_0 \text{ 공기극 유로 옆면}$$

$$D \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_{y=h} = ac_0 \text{ 공기극 유로 윗면}$$

상세한 길이와 계수값은 Table 1과 같다.

## 3. 결과

### 3.1 0차원의 비정상상태

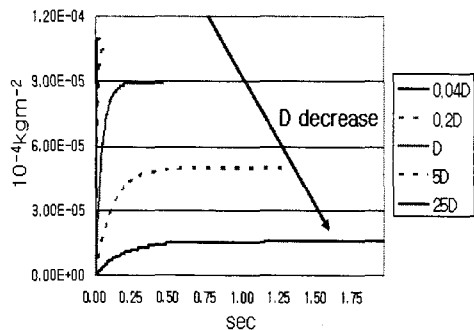


Fig. 3 cathode(Diffusion coefficient)

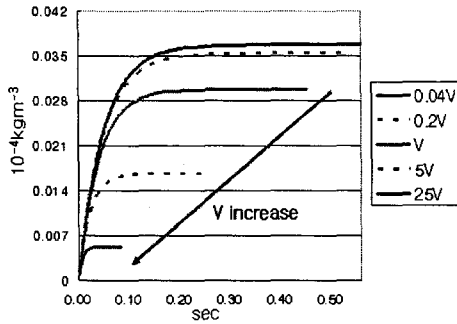


Fig. 4 air channel(air velocity)

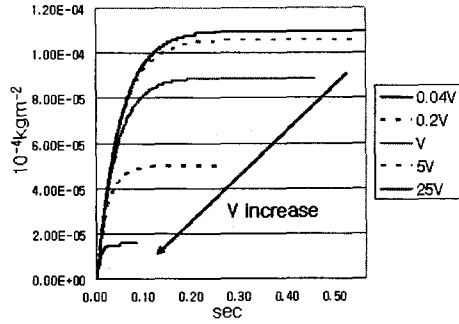


Fig. 5 cathode(air velocity)

### 3.1.1 크롬의 확산계수

Fig 2, Fig 3에서 D가 감소할수록 수렴시간이 길어지는 것을 확인할 수 있다. 이것은 D가 감소하면서 공기내의 크롬 농도구배가 커지기 때문이다. 따라서 Fig 2의 결과에서 알 수 있듯이 공기내의 크롬 농도는 증가하지만 Fig 3에서처럼 공기극 표면에 증착되는 크롬의 농도는 감소한다

### 3.1.2 공기 속도

분리판으로부터 공기로 전달되는 크롬의 양은 온도와 분리판에 포함된 크롬 농도의 함수이므로 공기의 속도에 관계없이 일정하다. 공기내에서 발생하는 크롬의 확산 역시 온도만의 함수이다. 그러므로 공기의 속도가 증가하면 분리판에서 공기로 이동한 크롬이 미처 공기극 표면에 도달하기전에 유로를 빠져나가게된다. 그러므로 Fig 4, Fig 5에서 확인할 수 있는 것처럼 공기의 속도가 빨라질수록 공기 내의 크롬 농도도 감소하고 공기극 표면의 크롬 농도도 감소한다.

## 3.2 1차원의 정상상태

### 3.2.1 크롬 확산계수

3.1.1절에서 고찰한 것과 마찬가지로의 결과를 보여준다. 또한 D가 증가하면 분리판에서 공기로 전달된 크롬이 공기 속을 빠른 속도로 이동하여 대부분이 공기극 표면에 증착된다. 그러므로 D가

클수록 공기 유로내의 크롬 농도는 미미하지만(Fig 6), 유로 앞단에서부터 증착되는 크롬이 많아짐을 알 수 있다.(Fig 7)

### 3.2.2 공기 속도

3.2.1절과 같은 결과를 보여준다. 그리고 공기의 속도가 느려지면 크롬이 분리판에서 공기로 전달되기 위한 충분한 시간을 가지게 되어 공기내의 크롬농도가 증가한다.(Fig 8) D가 일정하므로 농도가 증가하면 확산유속이 증가하는 것과 동시에 공기극 표면으로 이동할 시간도 충분하게 되어 유로의 앞단에서부터 포화상태로 크롬이 증착된다.(Fig 9)

## 3.3 온도 변화

분리판에 포함되어 있는 크롬의 밀도가 일정하다고 가정하였을 때 공기로 전달되는 크롬의 농도는  $\alpha$ (evaporation coefficient)에 의해 결정된다. 그리고 공기 속을 이동하는 크롬의 확산 유속은 D와 관계있음을 3.1.1에서 밝혔다. 식 (5), (6)에 나타나듯이  $\alpha$ 와 D는 온도에 비례하여 증가하므로 온도가 증가할수록 공기로 전달되는 크롬과 공기극 표면에 도달하는 크롬이 모두 증가함을 알 수 있다. (Fig 10)

## 4. 결론

본 논문에서는 전산해석을 통하여 D 및 공기속

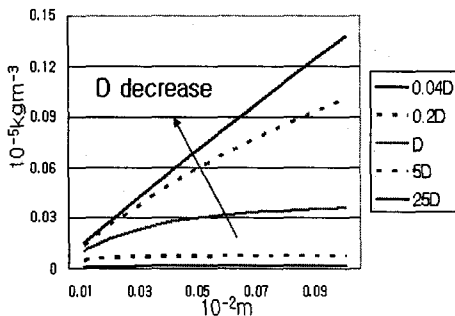


Fig. 6 air channel(Diffusion coefficient)

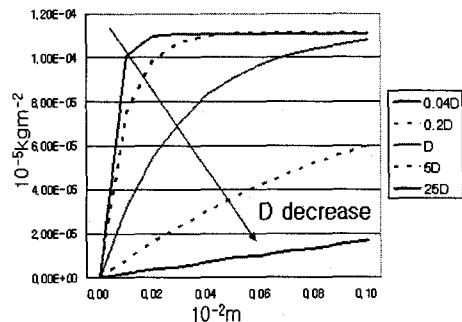


Fig. 7 cathode(Diffusion coefficient)

## 후기

본 연구는 산업자원부의 최우수 실험실 사업 출  
연금으로 수행한 결과입니다.

## References

- [1] James Larminie, Andrew Dicks, 2003, "Fuel Cell Systems Explained" second edition, WILEY.
- [2] K.Hilpert, W.J.Quadackers, L.Singheiser, 2003, "Interconnects in handbook of Fuel Cells-Fundamentals, Technology and Applications", W Vielstich, A Lamm, H A Gasteiger, WILEY
- [3] Heinz Nabielek, Klaus Hilpert, Elena Konyshева, Frank Tietz, Lzaak C Vinke, Egbert Wessel, Mohsine Zahid, "Correlation between Chromium Evaporation from SOFC Ferritic Steel Interconnects and Cell Degradation", Forschungszentrum Juelich
- [4] Hilpert K, Das D, Miller M, Peck D.H, Weiss R, 1996, "Chromium vapor species over solid oxide fuel cell interconnect materials and their potential of degradation processes", Journal of the Electrochemical Society

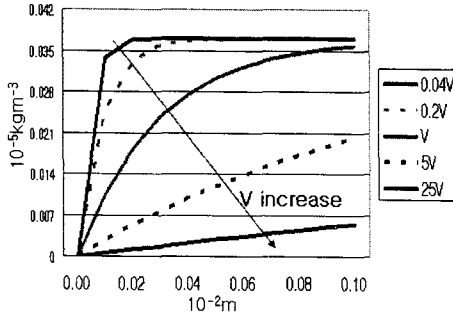


Fig. 8 air channel(air velocity)

도가 공기극 표면에서의 크롬 피독에 미치는  
영향에 관하여 살펴 보았다.

- 1) D가 감소하면 공기극에 포함되어 있는 크롬  
농도는 증가하지만 공기극 표면에 피독되는 크롬  
농도는 감소한다.
- 2) 공기의 속도가 증가할수록 공기와 함께 유  
로를 빠져나가는 크롬이 많아지므로 공기 내 크  
롬 농도가 작아짐은 물론, 공기극 표면에 피독되  
는 크롬 농도도 감소한다.
- 3) α와 D는 온도에 비례하는 함수이므로 온도  
가 증가할수록 공기극 표면에 피독되는 크롬이  
증가한다.

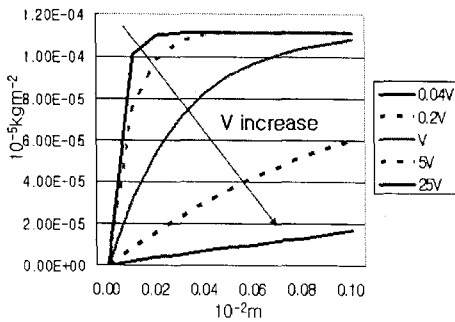


Fig. 9 cathode(air velocity)

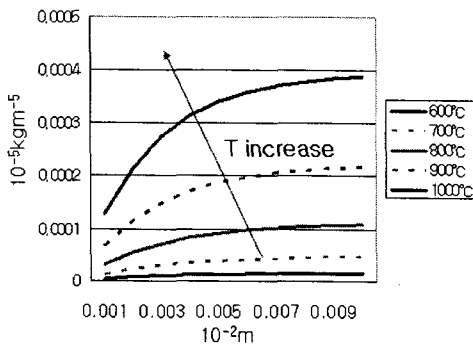


Fig. 10 cathode(temperature)