

탄소나노튜브 기반의 고체수소저장시스템에 관한 전산해석

김상곤* · 황보치형** · 유철희*** · 남기석*** · 임연호****†

*전북대학교 공과대학 반도체화학공학부
561-756 전북 전주시 덕진구 덕진동 1가 664-14
**수소연료전지특성화대학원
561-756 전북 전주시 덕진구 덕진동 1가 664-14
***가스안전연구원
429-712, 경기도 시흥시 대야동 322-1
(2011년 4월 1일 접수, 2011년 7월 25일 채택)

Numerical Simulation of CNTs Based Solid State Hydrogen Storage System

Sang-Gon Kim*, Chi-Hyung Hwangbo**, Chul Hee Yu***, Kee-Suk Nahm*** and Yeon-Ho Im****†

*School of Semiconductor and Chemical Engineering
664-14, 1ga, Deokjin-dong, Deokjin-gu, Jeonju-si, Jeonbuk 561-756, Korea
**Hydrogen & Fuel cell Specialized Graduate School, College of Engineering, Chonbuk National University,
664-14, 1ga, Deokjin-dong, Deokjin-gu, Jeonju-si, Jeonbuk 561-756, Korea
***Institute of gas safety R&D, 322-1 Daeya-dong, Siheung-si, Gyeonggi 429-712, Korea
(Received 1 April 2011; accepted 25 July 2011)

요 약

향후 도래할 수소경제에서 가장 유망한 기술 중에 하나인 고체수소저장 시스템들의 전체성능은 고체수소화물 내부의 열 및 물질전달 속도에 크게 영향을 받으며, 최적화된 시스템 설계를 위해서 이들에 대한 연구들이 선행되어야 한다. 본 연구에서는 Pt-CNTs 수소저장물질을 이용한 수소저장시스템에 대한 모델링 및 2차원 비정상상태 전산해석을 수행하였다. 기존 상용화된 CFD 소프트웨어를 이용하여 충전동안 발생하는 열 및 물질전달에 대한 현상들을 연구하였으며, 최적화된 수소저장시스템 설계는 고압에서 대류에 의한 냉각효과를 최대화하여 시스템 내부의 온도 상승과 충전시간 지연을 개선할 수 있음을 밝혀냈다. 아직까지 CNT 기반의 수소저장시스템에 대한 연구들이 보고되고 있지 않은 상황에서, 본 연구는 향후 CNT 기반의 고체수소저장시스템 최적 설계에 대한 방안들을 제시한다.

Abstract – Storing hydrogen in solid state hydride is one of the best promising methods for the future hydrogen economy. The total performance of such systems depends on the rate at which the amount of mass and heat migration is supplied to solid hydride. Therefore, an accurate modeling of the heat and mass transfer is of prime importance in optimizing the design of such systems. In this work, Hydrogen storage in Pt-CNTs hydrogen reactor has been intensively investigated by solving 2 dimensional mathematical models. Using a CFD computer software, systematic studies have been performed to elucidate the effect of heat and mass transfer during hydrogen charging periods. It was revealed that the optimized design of hydrogen storage vessel can prevent the increase of system temperature and the charging time due to the convective cooling effects inside the vessels at even high charging pressure. Because none has reported the critical issues of heat and mass transfer for CNT based hydrogen storage system, this work can support the first insight of the optimal design for solid state hydrogen storage system based on CNT in the near future.

Key words: Hydrogen Storage System, Numerical Simulation, Pt-Cnts, Heat and Mass Transfer

1. 서 론

수소연료전지 기술들은 수송용과 휴대용 전원 공급 분야에서 화학연료를 대체하기 위해 많은 연구들이 진행되고 있다. 이러한 분

야에서 상용화의 주요 걸림돌 중에 하나가 효과적인 수소저장 기술의 부재를 들 수 있다[1]. 현재 연구중인 수소저장기술에는 물리적 수소저장기술(압축수소, 액화수소), 재료의 가역 흡탈착 공정에 의한 수소저장(금속수소화물, 탄소나노재료), 화학반응에 의한 수소저장(복합금속수소화물, 화학적수소화물)으로 분류할 수 있다[1,2]. 수소를 극저온 액체상태와 상온 압축기체상태로 수소를 저장하는 방법은 실용화 단계에 있기는 하나, 이와 같은 기술적 방법은 수소저

† To whom correspondence should be addressed.
E-mail: yeonhoim@jbnu.ac.kr

‡ 이 논문은 전북대학교 김기주 교수님의 정년을 기념하여 투고되었습니다.

장 부피밀도나 중량밀도가 낮아서 수소를 용기에 저장하여 방출할 경우 비등손실과 에너지손실이 크기 때문에 수소저장 대비 효율적인 사용이 어렵다. 한편, 고체상태로 수소를 저장하는 방법은 앞서 기술한 두 가지 기술적 방법보다는 효율적인 저장이 가능할 것으로 평가되고 있으나, 아직까지는 고체재료별 낮은 수소저장량, 높은 흡방출열, 낮은 화학반응속도 등의 여러가지 기술적인 한계들이 있어 이들을 극복하기 위한 연구들이 진행되고 있다[1,2].

일반적으로 고체 수소저장방식들은 흡탈착열들을 수반하기 때문에 시스템에 대한 연구들이 필요하게 된다[3,4]. 특히, 수소저장 및 방출시에 발생하는 열전달 및 이에 따른 물질전달이 시스템의 성능에 큰 영향을 주게 된다. 그러나, 현재까지 효율적인 고체수소저장 물질 자체의 개발에 연구들이 집중되어 있어 상대적으로 시스템에 대한 연구들은 미비한 실정이다. 최근에, 고체수소저장물질 중에 하나인 탄소나노튜브(CNTs)는 튜브형 공간 때문에 수소저장재료로서 주목을 받았으나, 순수 CNTs만을 이용한 수소 저장량이 높지 않은 것으로 밝혀지면서 표면에 전이금속들을 첨가한 연구들을 통하여 이러한 한계를 극복하기 위한 연구들이 진행되고 있다[5,6]. 전이금속들에 의한 수소저장량이 증가된 이유는 탄소나노튜브 표면에서 수소분자의 spill-over 현상으로 파악되고 있으며, 순수 CNTs에 비교하여 수소저장량을 높일 수 있는 방법으로 알려져 있다[6,7]. 이러한 연구에도 불구하고 아직까지 수소저장량을 더욱 높이기 위한 다양한 방법들에 연구들이 집중되고 있으나, 이들 물질들을 이용한 수소저장시스템에 대한 연구들은 거의 전무한 실정이다. 이에 본 연구에서는 전이금속중 하나인 Pt가 표면에 도핑된 CNTs를 이용한 효율적인 수소저장시스템 설계를 위한 선행연구로 운동량, 열 및 물질전달의 이론들을 적용한 전산해석을 수행하여 수소저장용기 내부에서 발생하는 다양한 현상들을 고찰하고자 하였다.

2. 이론적 배경

본 연구에서 고려한 고체수소저장시스템은 Fig. 1과 같이 Pt nanodot으로 코팅된 CNTs(Pt-CNTs)로 충전된 실린더형 시스템이다. 수소저장시스템의 외벽은 stainless-steel로 구성되고, 다공성 매체에 Pt-CNTs들이 충전된다. 그림에 나타난 바와 같이 입구부분에서 수소가 공급되며, Pt-CNTs가 수소흡착열이 높지 않으므로 별도의 냉각시스템은 고려되지 않았고, 용기벽은 상온으로 유지되면서 고압에서 충전이 완료될 때까지 수소공급부의 압력이 일정하게 유지되면서 수소가 공급된다는 가정을 사용하였다. 본 연구에서는 비정상상태의 지배방정식들을 전산모사하여 수소저장 동안에 발생하는 시스템 내부의 유동, 열 및 물질전달에 대한 현상들을 해석하고자 하였다. 이 외에 충전 초기에 CNT 충전층은 균일 온도와 대기압의 수소에 노출되어 있고, 본 연구에서 사용한 압력은 10 bar와 100 bar이고, 이러한 압력에서 수소는 이상기체 거동을 갖는다고 가정하였다.

2-1. 질량 보존 방정식

앞서 설명한 가정 하에 CNT 충전층에서 수소에 대한 비정상상태 물질전달 관계식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon \rho_g) + \nabla \cdot (\epsilon \rho_g \vec{v} - D_k \nabla \rho_g) = -S_m \quad (1)$$

여기서, ϵ 는 CNT 충전층의 공극율, ρ_g 는 수소 밀도(kg m^{-3}), \vec{v} 는

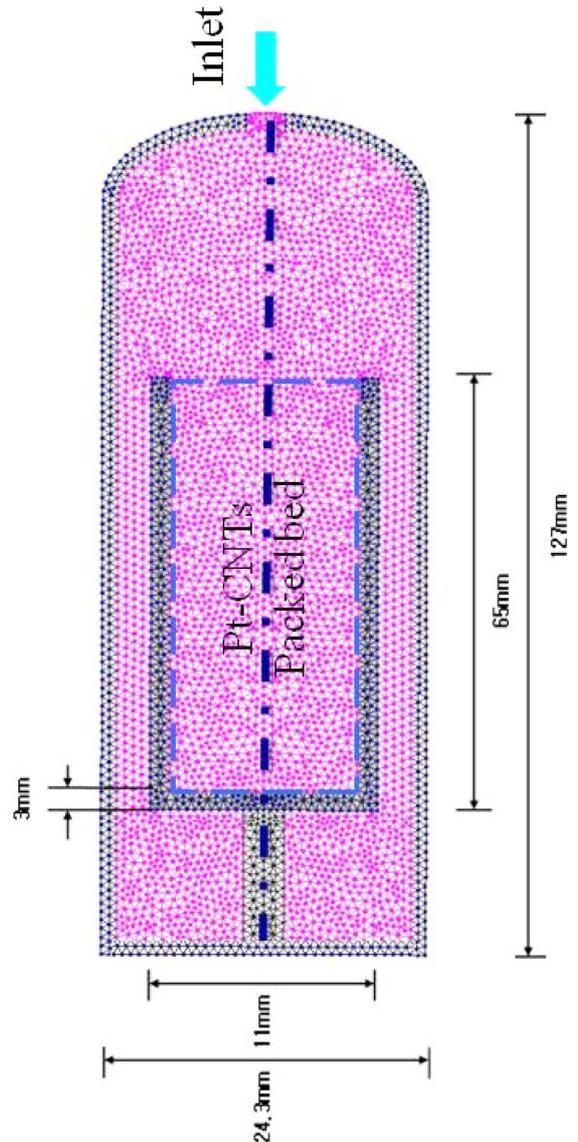


Fig. 1. Schematic diagram and grid generation for numerical simulation of Pt-CNTs based hydrogen storage system.

속도 벡터(ms^{-1})를 나타내며, S_m 은 수소저장으로 인한 질량손실량을 나타낸다. D_k 는 Enskog 관계식을 이용하여 수소의 자체 확산(Self-diffusion)을 고려하였다[8]. 질량손실량은 기상으로부터 CNT 충전층까지 수소의 흡착을 나타내며, 일반적으로 수소 흡착속도가 매우 빠르게 발생할 경우 다음과 같이 표현될 수 있다[9,10].

$$S_m = (1 - \epsilon) \rho_s M_H \frac{\partial n}{\partial t} \quad (2)$$

여기서 ρ_s 는 고체상의 밀도, M_H 는 수소의 분자량과 $\partial n / \partial t$ 는 수소의 흡착속도를 나타낸다($\text{mol kg}^{-1} \text{s}^{-1}$).

2-2. 운동량 방정식

비정상상태의 수소 기체의 운동량 방정식은 균일한 충전층에 대한 다음과 같은 관계식을 사용하였다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon \rho_g v_i) + \nabla \cdot (\epsilon \rho_g \vec{v} v_i - \epsilon \mu_g \nabla v_i) = -\epsilon \nabla P + F_D + \epsilon \rho_g g_i \quad (3)$$

여기서, P 는 기체의 압력, v_i 는 원통형 좌표계에서 방향 $i(r, \theta, z)$ 에 대한 속도 성분, μ_g 는 수소기체의 점도, g_s 는 중력가속도 벡터이고, F_D 는 충전층에서 마찰손실 항을 나타낸다. 본 연구에서 F_D 는 Darcy's law를 적용하여 다음과 같은 관계식으로 표현되었다.

$$F_D = \frac{\mu_g}{K} v_i \quad (4)$$

여기서 K 는 Pt-CNTs 충전층에서 수소의 투과율을 의미한다.

2-3. 에너지 방정식

수소 기체 및 CNT에 대한 에너지 수지식은 일반적으로 충전층에 대한 관계식들을 적용하였다. 수소기체에 대한 비정상상태 에너지 수지식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon \rho_g C_{pg} T_g) + \nabla \cdot (\epsilon \rho_g \vec{v} C_{pg} T_g - \epsilon \lambda_{eff} \nabla T_g) = h_{gs}(T_s - T_g) - S_H \quad (5)$$

여기서, C_{pg} 는 기체의 정압 열용량, T_g , T_s 는 기체와 고체의 온도, λ_{eff} 는 유효열전도도, h_{gs} 는 기체와 고체의 접촉열전달계수이고, S_H 는 수소 흡착열로 인한 열생성항을 나타낸다.

고체수소저장물질에 대하여 에너지 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial t}((1-\epsilon)\rho_g C_{ps} T_s) - \nabla \cdot (\epsilon \lambda_{eff} \nabla T_s) = h_{gs}(T_g - T_s) + S_H \quad (6)$$

여기서, C_{ps} 는 고체의 정압 열용량을 나타낸다. 한편, 열생성항은 다음과 같은 관계식으로 표현된다.

$$S_H = \Delta H \cdot S_m \quad (7)$$

여기서, ΔH 는 수소 흡착 엔탈피를 나타낸다. 기체와 고체의 접촉 열전달 계수는 다음과 같은 Ranz 방정식을 적용하였다[9].

$$h_{gs} = 2 + 1.1 Pr^{\frac{1}{3}} (Re \epsilon)^{0.6} \quad (8)$$

여기서 Pr 과 Re 는 각각 Prandtl과 Reynolds 수를 나타낸다.

2-4. 초기 및 경계 조건

본 연구에서는 Fig. 1의 수소저장용기가 축대칭형의 원통형 시스템이어서 2차원 축방향 대칭인 원통형 좌표시스템을 사용하였다. 본 시스템의 초기 상태는 Pt-CNTs가 25 °C, 충전압력으로 수소가 채워져 있고, 시간에 따라 고체저장물질로 흡착 평형상태까지 수소 저장이 발생한다고 가정하였다. 그리고, 충전 동안 용기벽의 온도는 상온으로 유지되고 2차원 축방향의 경계조건들은 유속과 온도에 대하여 축방향 대칭조건들을 사용하였다. 수소 공급 유량은 수소 공급부의 압력이 충전압력으로 일정하게 유지하면서 수소충전량에 의해 결정되도록 하였다.

2-5. 수소 흡착 모델

CNTs와 그 복합체들에 대한 수소저장에 대한 연구들이 진행되고 있으나, 수소 흡착에 대한 메커니즘들이 아직까지 불명확하며 관련된 등온 흡착 관계식들은 문헌상에서 보고되고 있지 않다. 본 연구에서는 그동안 보고된 활성탄에 수소 물리흡착에 대한 흡착 속도식의 연구결과들에 기초하여 Pt-CNTs를 모델링하였으며 관계식은 다

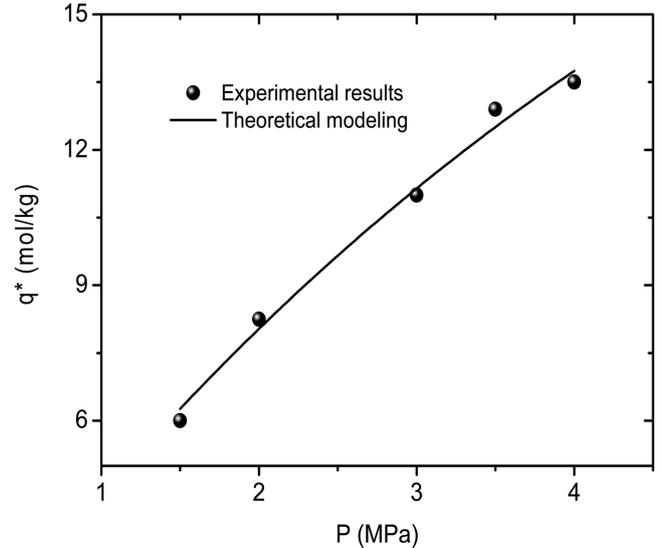


Fig. 2. Comparison of calculated and experimental hydrogen adsorption isotherm.

음과 같다[8,9].

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = k a_s [n^*(p,T) - n(x,t)] \quad (9)$$

여기서 n 은 고체에 흡착된 기체의 양, x 는 공간상의 좌표, n^* 는 평형에서 수소흡착량을 나타낸다. 또한 $k a_s$ 는 고체 표면에서 물질전달 계수와 비표면적을 의미한다. 본 연구에서 요구되는 CNT 관련 물질들에 대한 흡착등온 모델링에 관한 연구들이 보고되고 있지 않은 상황이므로 활성탄의 수소흡착 등온식에 적용되었던 다음과 같은 Radke-Prausnitz 관계식을 적용하였다.

$$n^*(P,T) = \frac{F K(T)P}{F + K(T)P^{1-n}} \quad (10)$$

여기서,

$$K(T) = K_0 \exp\left(-B \frac{\Delta H}{RT}\right)$$

상기 관계식에서 요구되는 상수값들은 Pt-CNTs를 이용한 실험결과

Table 1. Parameter values used in this work

Thickness of the hydrogen storage vessel	5.75×10^{-3} m
Porosity of the baced bed(ϵ)	0.4
Particle density	9.6×10^{-3} kg/m ³
Density of the hydrogen storage vessel	7930 kg/m ³
Density of the packed bed	4.6×10^2 kg/m ³
$k a_s$	2.98×10^{-2} s ⁻¹
Thermal conductivity of the hydrogen storage vessel	16.03 W/m·K
Specific heat capacity of Pt-CNTs	7.039×10^2 J/kg·K
Specific heat capacity of hydrogen	14.42×10^3 J/kg·K
Specific heat capacity of the hydrogen storage vessel	5.02×10^2 J/kg·K
Hydrogen adsorption heat(ΔH)	3.3×10^3 J/mol
F : Radke-Prausnitz isotherm constant	70.88
n : Radke-Prausnitz isotherm constant	-0.2
K_0 : Radke-Prausnitz isotherm constant	199.47
B : Radke-Prausnitz isotherm constant	-1.0×10^{-5}

값들을 이용하여 구하였으며 그 결과는 Fig. 2에 나타내었다[6]. CNTs인 경우 상온에서 최대 0.5 w%이었으며, Pt-CNTs인 경우 3.5 w%의 수소 저장량을 보였다. 실제 Pt-CNTs를 이용한 압력변화에 따른 수소저장량 실험결과와 Padke-Prasnitz 관계식들이 잘 일치하고 있음을 알 수 있으며, 실험결과를 이용하여 얻어진 상수값들은 Table 1에 나타내었다. 본 연구에서는 식 (11)에서 요구되는 Pt-CNTs의 흡착열은 CNTs에 대하여 일반적으로 알려진 2,700~3900 J/mol의 평균값인 3,300 J/mol값을 이용하였다.

3. 결과 및 고찰

앞서 설명한 수소저장시스템에 대한 지배방정식들의 수치해는 상용소프트웨어인 CFD-ACE+ (ESI group)를 이용하여 얻어졌고, Fig. 1에 나타낸 바와 같이 총 4,383개의 격자점들을 이용하였다 [11]. 본 연구에서는 10과 100 bar의 충전압력에서 비정상상태의 수소 저장 용기 내부의 수소기체의 유동, 압력 및 온도 변화를 예측하고자 하였다. 이를 위해 본 연구에서는 Fig. 1의 수소저장 용기 중심부의 Pt-CNT가 충전층은 다공성매체의 가정을 이용하여 수치해

를 얻고자 하였다.

수소저장시스템은 수소의 충전동안 흡착열, 고체수소저장물질의 충전층에서 발생하는 기계적인 마찰열과 공급되는 수소기체에 의한 대류열전달에 의해 용기내부의 온도 변화를 수반하고, 이에 따른 수소기체의 유동과 물질전달이 영향을 받게 된다. 이러한 시스템은 고체수소저장물질의 열적 물성에 크게 영향을 받게 되며, 본 연구진은 pt-CNTs에 대한 중요한 열적 물성 특성인 유효열전도도에 대한 연구결과들을 보고한바 있다[12]. 본 연구진에서는 20 cc의 소량 시료로 유효열전도도를 측정하기 위한 시스템을 개발하였고, 그 동안 연구가 많이 진행된 LaNi₅을 통해 유효열전도도 측정 시스템의 신뢰성을 평가하였다. 이를 바탕으로 고체수소저장물질로 주목 받고 있는 Pt-CNTs에 대한 유효열전도도를 평가하였다[12]. MWCNT에 대한 유효열전도도를 다양한 기체 및 압력에 대하여 측정하였으며, 일반적으로 단일 CNT 열전도도는 보통 1,800~6,000 W/mK으로 상당히 높은 열전도도 값들이 보고되었지만, 수소저장물질로 활용하기

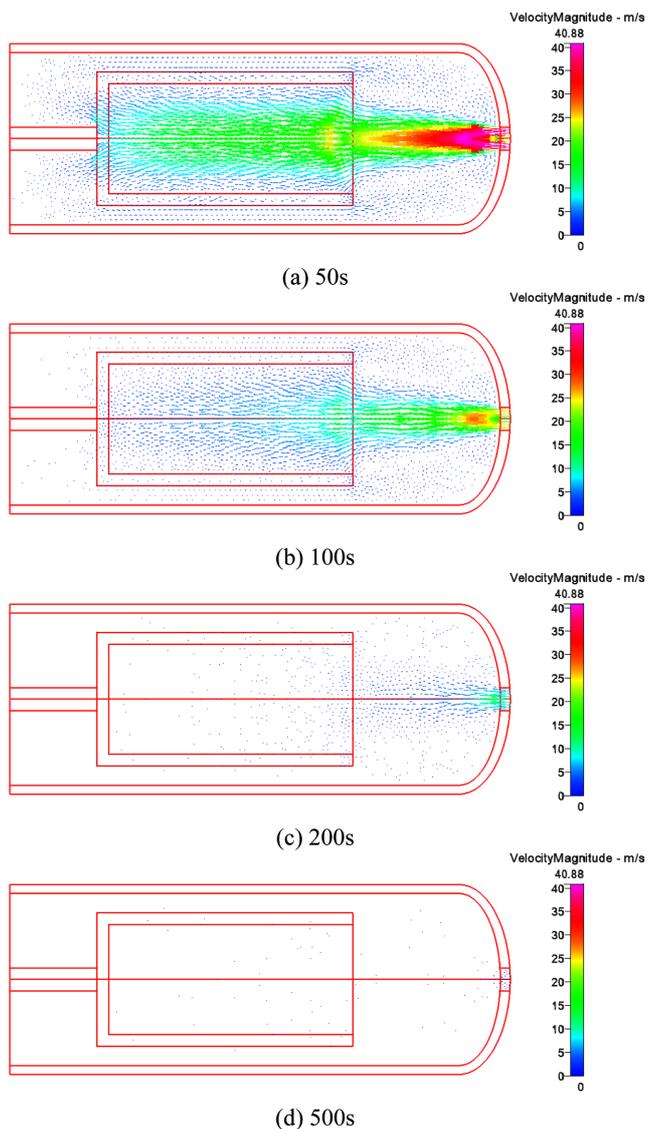


Fig. 3. Hydrogen flow field as a function of charging time at 10 bar.

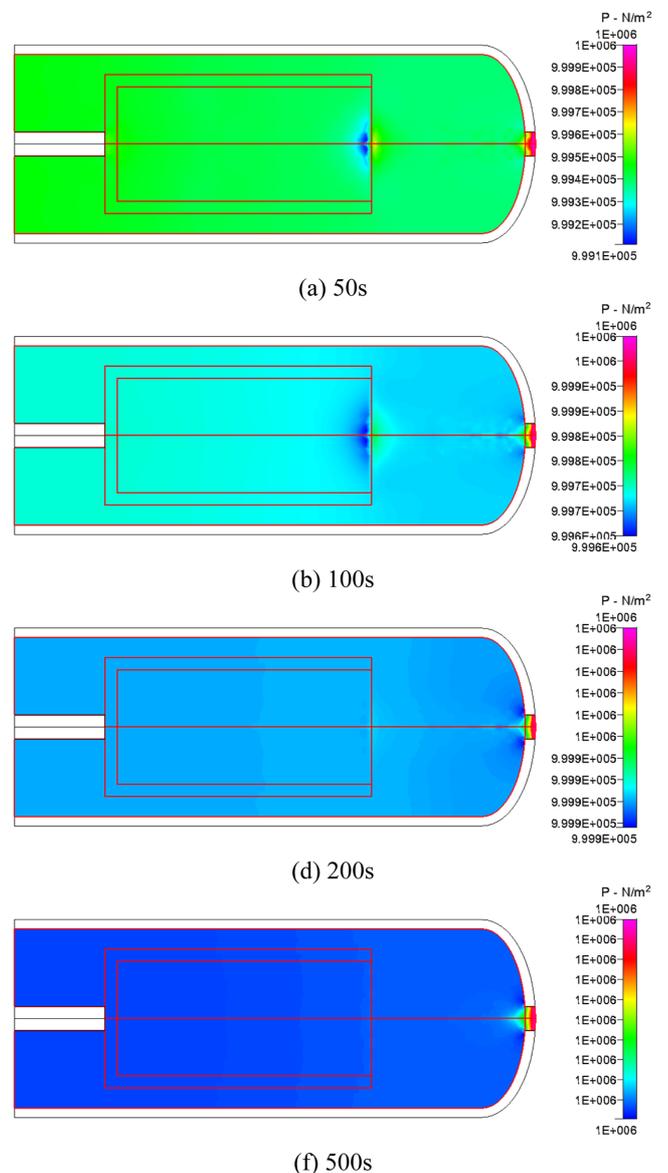


Fig. 4. Pressure distribution of hydrogen storage system as a function of charging time at 10 bar.

위해 밀집된 CNTs상태에서의 유효열전도도는 압력에 따라서 0.4~0.55 W/mK의 결과를 얻었다. 이러한 이유는 나노튜브-나노튜브간의 상호작용에 의해 축방향의 높은 열전달이 방해받기 때문이고 나아가 Pt로 도핑된 나노튜브인 경우에도 이러한 나노튜브간의 상호작용이 크게 개선되지 않고 CNTs에 대한 유효열전도도 측정값과 비슷하였다. 본 연구에서는 사전에 진행되었던 Pt-CNTs의 유효열전도도에 대한 연구결과들을 전산해석에 이용하였다.

Fig. 3은 10 bar의 충전압력에서 시간에 따른 수소 기체의 유동을 나타낸다. 50초가 지났을 때 저장용기 입구부분에서 수소기체의 유입속도는 최대 40.88 m/s로 유입되고 있음을 알 수 있다. 200초가 지난 후에는 입구 쪽의 속도가 11.85 m/s로 점차 감소하면서, 500초 이후에는 수소가 충전이 거의 완료되어 기체 이동이 거의 사라짐을 나타낸다. Fig. 4는 수소 저장 용기 내부의 압력변화를 나타내며 50 초 후에는 초기압력에서 5×10^{-3} bar 정도의 압력이 감소하며, 시간

이 지남에 따라서 점차 충전압력으로 수렴됨을 알 수 있다. Fig. 5는 수소저장 용기 내부의 온도변화를 나타내며, 100초까지는 300 K로 유입되는 수소의 대류에 의한 냉각효과가 큰 영향을 미침을 알 수 있다. 그러나 100초가 지난 후에는 공급되는 수소의 대류에 의한 냉각효과는 사라지고, 점차 수소 흡착열에 의한 충전층 내부의 온도가 서서히 증가함을 보여주고 있다. 200초 후에는 점차 수소 저장량의 감소에 따른 발열량의 감소에 따라서 서서히 충전층 내부가 냉각되고 있음을 보여주고 있다.

본 연구에서는 압력 변화에 따른 수소용기 내부의 운동량, 열 및 물질전달 현상을 비교하기 위하여 100 bar의 충전압력에 대한 전산해석을 수행하였다. Fig. 6은 충전압력 100 bar에서 시간에 따른 수소기체의 흐름을 나타내며, 50초의 충전시간 후에는 수소저장 용기 입구쪽의 최대 수소공급 유속이 197.1 m/s이었다. 수소 공급 유속의 크기 변화를 제외하고는 수소저장용기 내부의 유동은 수소 충전압력이 10 bar일 때와 거의 비슷한 거동을 보였다. 500초 후에는 거의 충전이 완료되어 수소 기체의 유동이 사라짐을 알 수 있다. Fig. 7은 수소저장 용기 내부의 압력분포를 나타내며 초기 50초의 충전

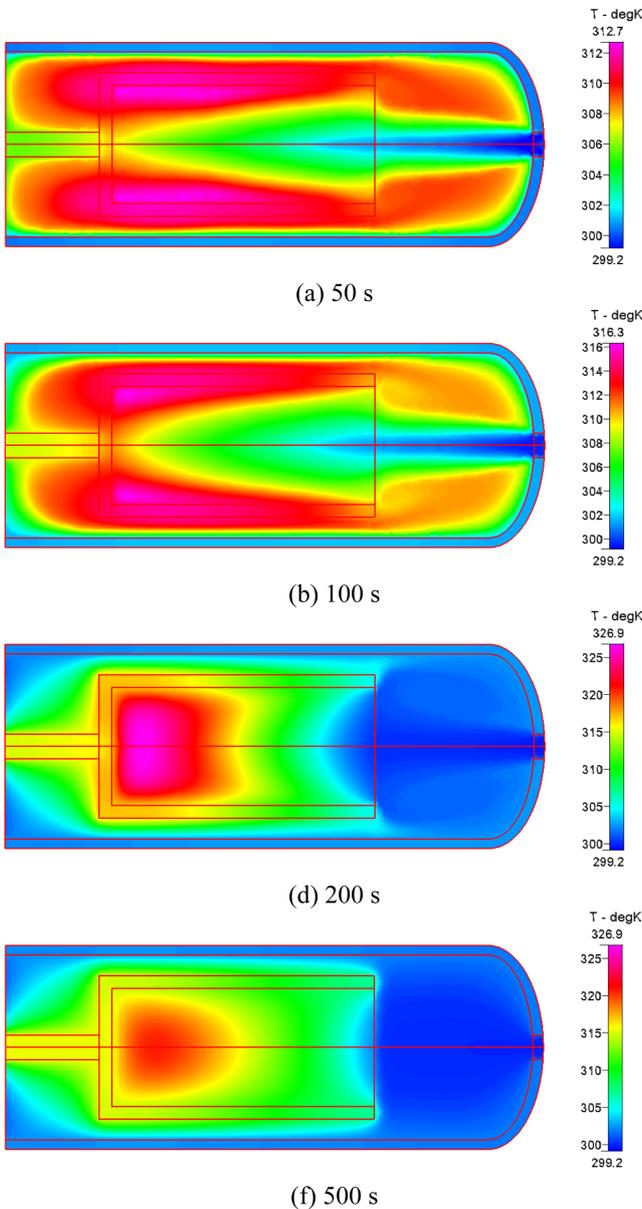


Fig. 5. Temperature distribution of hydrogen storage system as a function of charging time at 10 bar.

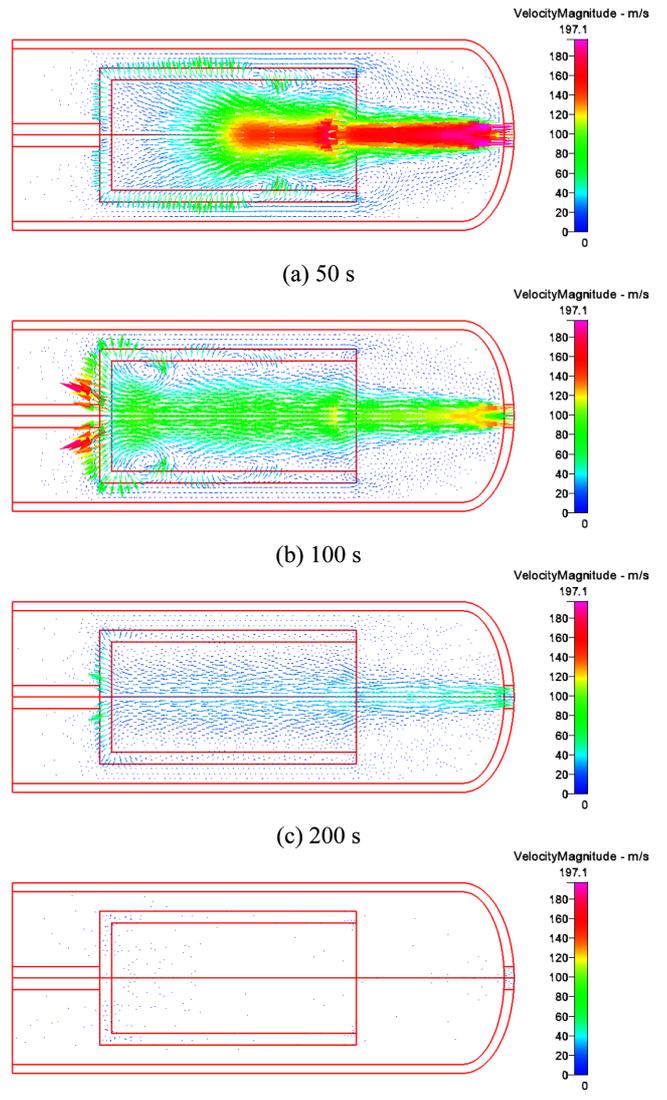


Fig. 6. Hydrogen flow field as a function of charging time at 100 bar.

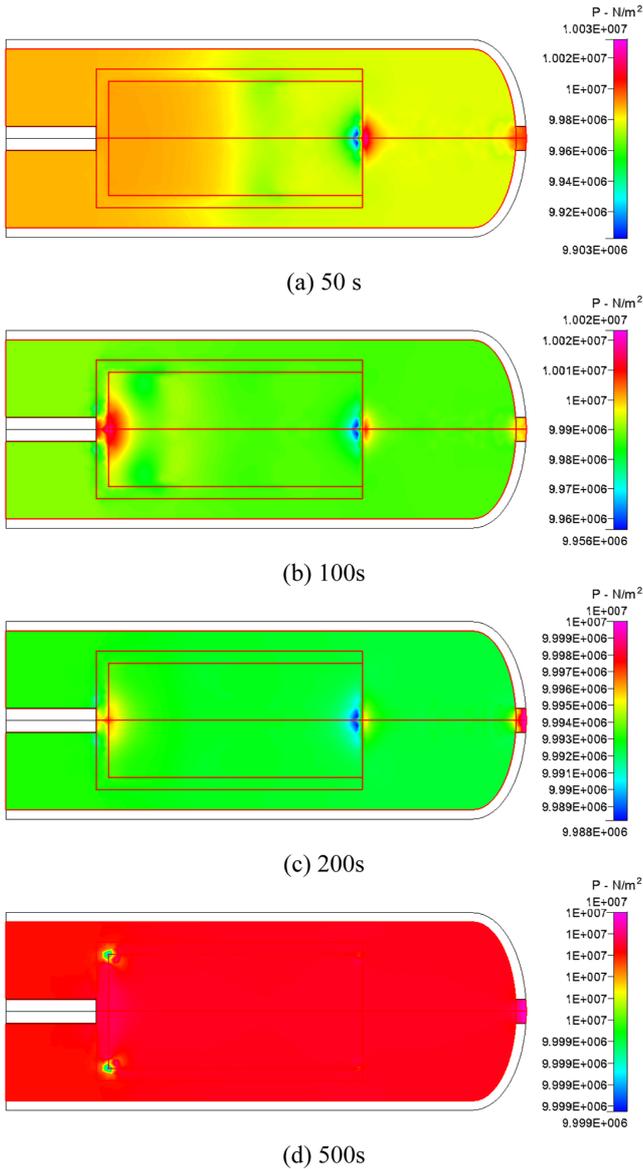


Fig. 7. Pressure distribution of hydrogen storage system as a function of charging time at 100 bar.

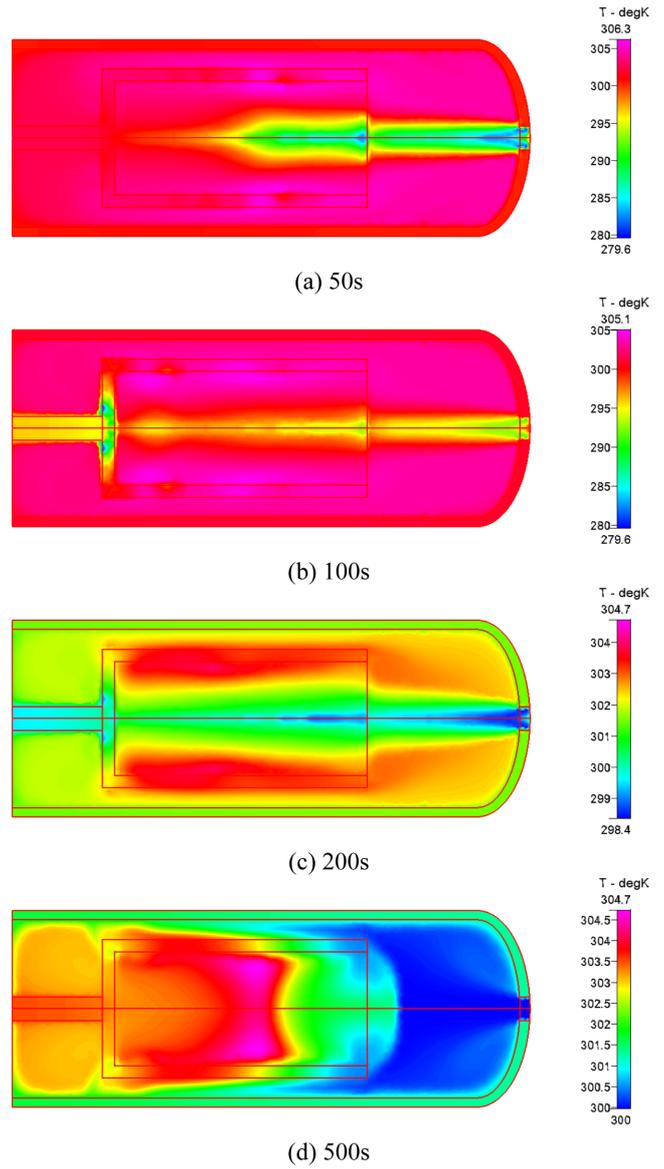


Fig. 8. Temperature distribution of hydrogen storage system as a function of charging time at 100 bar.

시간이 지난 후에는 저장 용기 내부 압력이 0.1 bar 정도의 압력 강하가 발생함을 알 수 있으며, 500초가 지난 후에 압력이 충전압력으로 수렴됨을 알 수 있다. Fig. 8은 수소저장 용기 내부의 온도분포를 나타내며, 10 bar의 충전압력에 비하여 강한 대류에 의한 냉각효과가 수소저장용기 내부에서 발생하고 있음을 알 수 있다. 이로 인하여 200초까지 충전층 내부가 흡착열에 의한 온도 증가가 10 bar 일 때와 비교하여 나타나지 않음을 알 수 있다. 200s 후에는 수소 기체의 유입속도가 현저히 감소하면서 흡착열에 의한 충전층 내부의 온도가 서서히 증가함을 알 수 있다.

Fig. 9는 충전시간에 따른 충전층 내부의 평균온도 변화를 나타내었다. 10 bar의 충전 압력에서 초기에는 충전층 내부의 유동흐름에 의한 마찰열과 흡착열로 인하여 310 K까지 온도증가가 발생하고 그 후에는 대류에 의한 냉각효과로 인하여 306 K까지 온도가 감소함을 알 수 있다. 충전시간이 1분 후에는 대류에 의한 냉각효과가 점점 사라지고 충전시간 5분까지는 흡착열에 의한 온도상승이

발생함을 알 수 있다. 수소 충전이 거의 완료된 후에는 서서히 충전층 내부가 서서히 냉각됨을 알 수 있다. 한편, 100 bar의 충전압력에서는 초기 충전시간 동안 10 bar의 경우와 비교할 때 수소저장량의 차이로 인하여 발생한 대류에 의한 냉각효과가 전반적으로 강하게 나타남을 알 수 있고, 흡착열에 의한 온도 상승도 304 K까지 발생함을 알 수 있어서 고압 충전이 전반적으로 흡착열 냉각에 유리함을 알 수 있다. Fig. 9(b)는 시간에 따른 수소 충전 퍼센트를 나타내며, 5분 정도에 압력에 크게 영향을 받지 않고 충전이 완료됨을 알 수 있다. 이러한 결과들은 본 연구에서 사용한 수소저장 시스템의 내부 구조가 대류에 의한 냉각효과를 최대화하기에 적합한 구조임을 나타낸다.

상기의 전산해석 결과들은 충전층 내부에 유입되는 수소 기체의 대류에 의한 냉각효과가 큰 영향을 미칠 수 있음을 나타낸다. 본 연구결과와 같이 수소 충전에 필요한 수소가 원활하게 공급되는 시스템에서는 충전압력이 충전시간에 큰 영향을 미치지 않음을 알 수 있

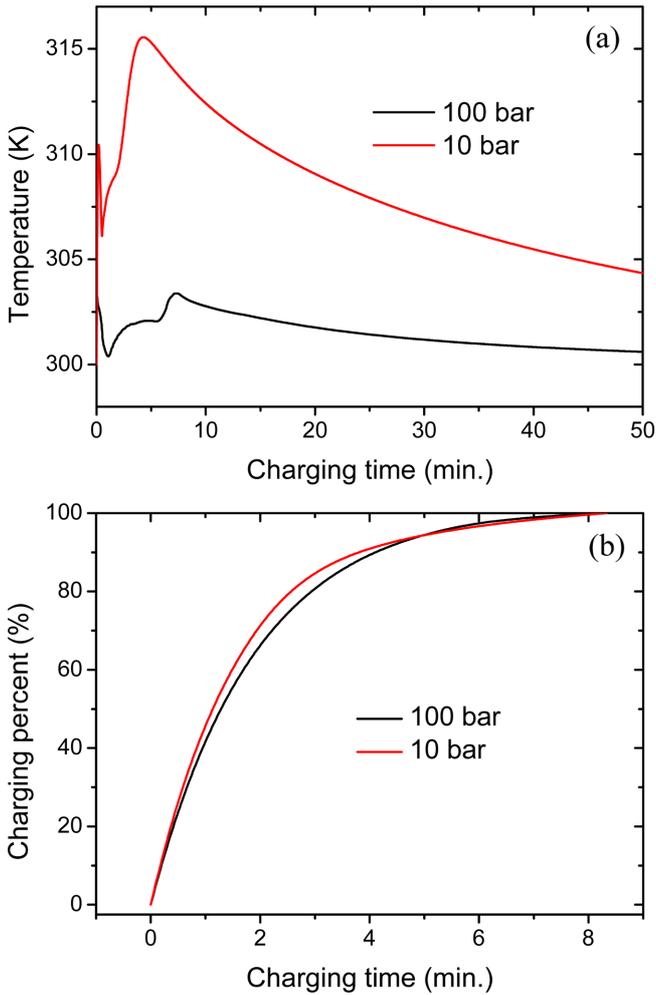


Fig. 9. Averaged temperature (a) and hydrogen charging percent (b) of packed bed as functions of normalized charging time and charging pressure.

다. 그러나, 이러한 결과들은 수소저장용기의 충전 특성들이 일반적으로 각종 밸브 제어에 의한 제어되는 수소의 공급시스템에 강한 영향을 받을 수 있음을 의미한다.

감 사

본 연구는 KIST 주요사업의 지원을 받아 수행된 연구입니다 (2V02183-11-243).

4. 결 론

본 연구에서는 Pt-CNTs를 기반으로 한 고체수소저장시스템에서 충전 동안 발생하는 운동량, 열 및 물질전달에 대한 지배방정식들에 대한 전산해석을 수행하였다. Pt-CNTs에 대한 수소 저장량에 대한 동특성 및 열적 물성들은 실험값에 근거하여 모델링되었다. 전산해석 결과들은 충전 압력 및 시간에 따른 수소저장 용기 내부의 수소기체의 유동 특성, 충전층 내부의 온도변화 및 저장특성들을 합리적으로 예측함을 알 수 있었다. 충전 압력이 증가할 경우, 수소저장 용기내부로 유입되는 수소기체의 대류에 의한 냉각효과가 강하

게 발생하며 본 연구에서 사용된 수소저장 시스템은 이러한 효과를 최대화할 수 있어 충전압력 변화에 따른 충전시간이 크게 달라지지 않음을 알 수 있었다. 향후 실질적인 수소 공급시스템에 대한 연구들을 병행할 경우 수소저장용기 내부 설계에 대한 유용한 자료들을 확보할 수 있을 것으로 기대된다.

사용기호

\vec{v}	: Velocity vector[m·s ⁻¹]
S_m	: Source term to represent hydrogen mass absorbed[kg·m ⁻³ ·s ⁻¹]
D_k	: Self-diffusivity(Self-diffusion)[m ² ·s ⁻¹]
M	: Molecular weight[kg·m ⁻³]
P	: Gas pressure[N·m ⁻²]
v_i	: Velocity components in the i(r, θ, z) direction[m·s ⁻¹]
g_i	: Gravity vector[m·s ⁻²]
F_D	: Frictional loss in the packed bed[kg·m ⁻² ·s ⁻²]
K	: Gas permeability
C_p	: Specific heat[J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹]
T	: Temperature[K]
h_{gs}	: Heat exchange coefficient between solid and gas[W·m ⁻³ ·K ⁻¹]
S_H	: Source term to represent hydrogen absorption heat[W·m ⁻³]
ΔH	: Hydrogen adsorption enthalpy[J·kg ⁻¹]
n	: Hydrogen moles absorbed[mol]
x	: Spatial coordinate
n^*	: Amount of hydrogen absorbed in the equilibrium pressure[mol]
k	: Mass transfer coefficient[m ² ·s ⁻²]
a	: Specific surface area[m ²]

그리스 문자

ϵ	: Porosity
ρ	: Density[kg·m ⁻³]
μ	: Viscosity[s·cm ⁻¹ ·s ⁻¹]
λ_{eff}	: Effective thermal conductivity[W·m ⁻¹ ·K ⁻¹]

참고문헌

- Schlapbach, L. and Zuttel, A., "A, el A, Storage Materials for Mobile Applicationsc," *Nature*, **414**, 353-8(2001).
- Satyapal, S., Petrovic, J., Read, C., Thomas, G. and Ordaz, G., "The U.S. Department of Energy's National Hydrogen Storage Project: Progress Towards Meeting Hydrogen-powered Vehicle Requirement," *Catal. Today*, **120**, 24656(2006).
- Jemni, A. and Ben Nasrallah, S., Lamoumi, J., "Heat and Mass Transfer Models in Metal-hydrogen Reactor," *Int. J. Hydrogen Energy*, **22**, 67-76(1997).
- Jemni, A. and Ben Nasrallah, S., "Study of Two-dimensional Heat and Mass Transfer During Absorption in a Metal-hydrogen Reactor," *International journal of Hydrogen Energy*, **20**, 43-52 (1995).
- Dillon, A. C., Jone, K. M. Bekkendahl, T. A., Kiang, C. H., Bethune, D. S. and Heben, M. J., "Storage of Hydrogen in Single-walledcarbon Nanotubes," *Nature*, **386**, 377-379(1997).
- Zhcharia, R., Rather, S.-U., Hwang, S. W. and Nahm, K. S., "Spill-

- over of Physisorbed Hydrogen from Sputter-deposited Arrays of Platinum Nanoparticles to Multi-walled Carbon Nanotubes;" *Chem. Phys. Lett.*, **434**, 296-291(2008).
7. Rather, S. U., Mehraj-ud-din, N., Zacharia, R., Hwang, S. W. and Nahm, K. S., "Hydrogen Storage of Nanostructured TiO₂ Impregnated Carbon Nanotubes;" *Int. J. Hydrogen Energy*, **34**, 961-966, (2009).
8. Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N., "Transport Phenomena;" 2nd ed., John Wiley & Sons, Inc.(2005).
9. Lamari, M., Aoufi, A. and Malbrunot, P., "Thermal Effects in Dynamic Storage of Hydrogen by Adsorption;" *AIChE J.* **46**, 632-646(2000).
10. Hermosilla-Lara, G., Momen, G., Marty, P. H., Neindre, B. L. and Hassouni, K., "Hydrogen Storage by Adsorption on Activated Carbon: Investigation of the Thermal Effects During the Charging Process;" *Int. J. Hydrogen Energy*, **32**, 1542-1553(2007).
11. <http://www.esi-cfd.com>. for information on the commercial software package cfd-ace+.
12. Yeo, C. H., Kim, J. T., Kim, K. W., Kim, H. S., Hwangbo, C. H., Nahm, K. S. and Im, Y. H., "Development of Measurement System of Effective Thermal Conductivity for Design of Solid-state Hydrogen Storage System;" *Proc. The Korea Society for Energy Engineering Conf.*, p.111(2009).