

マルチスケール計算化学のための 三次元多孔質構造シミュレータの開発と応用

○古山通久¹、川越聡¹、大串巧太郎¹、服部達哉¹、石本良太¹、佐々木賢治¹、
坪井秀行¹、遠藤 明¹、久保百司^{1,2}、Carlos A. Del Carpio¹、宮本 明^{3,1}

¹ 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

² 科学技術振興機構さきがけ (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

³ 東北大学未来科学技術共同研究センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

1. 緒言

多孔質材料は、触媒、電極、吸着剤などとして様々な分野において用いられている。しかし、例えば触媒表面におけるミクロな触媒活性や物性と多孔質触媒のマクロな実特性を定量的に結びつける手法は充分には確立されていなかった。本研究では、ミクロな特性とマクロな特性を結びつけるマルチスケール計算化学の実現のために、三次元多孔質構造シミュレータを新規に開発し、固体酸化物燃料電池(SOFC)燃料極や他の多孔質触媒への応用を行った。

2. 方法

本研究で開発した三次元多孔質構造シミュレータでは、平均粒径、粒径分布、粒子混合比、空隙率を入力としてシミュレーションセル内に任意の種類の子からなる多孔質構造を構築する。さらには、専用可視化ツール、微細構造評価ツール、触媒特性シミュレータを開発し、SOFC 燃料極や他の多孔質触媒への応用を可能とした。

3. 結果

図 1 に、開発した三次元多孔質構造シミュレータを用いて構築した様々な多孔質構造を示す。多成分の粒子からなる構造、多層構造、棒状構造、被膜多孔質構造、二次粒子構造など、様々な多孔質構造を計算機上に構築することが可能となった。

続いて、開発手法を SOFC の燃料極に応用した。開発手法により構築された Ni と YSZ (Yttria Stabilized Zirconia) からなる多孔質構造を図 2 a) に示す。図 2 a) の多孔質構造の微細構造を評価した結果を図 2 b) に示す。図は電解質界面から厚さ方向への気相、Ni、YSZ の断面積分布および、気相-Ni-YSZ からなる三相界面長の分布を示す。本研究で開発した手法により、三相界面長の定量的な評価がはじめて実現された。

さらに、定量的に評価された SOFC 燃料極の微細構造および、構成粒子の物性、活性点である三相界面における特性、ガス拡散性に基づき燃料極の過電圧特性の予測を行った。図 3 には、Ni と YSZ の混合比および平均粒径の異なる条件において計算された燃料極過電圧特性を示す。実験的な傾向^[1]を定量的に再現することに成功するとともに、微細構造の違いによる過電圧特性の違いの定量予測が可能となった。開発手法により、ミクロな特性に基づくマクロな実特性の定量予測が実現された。発表では、開発手法や結果のより詳細な内容と併せて、固体高分子形燃料電池電極触媒、担持貴金属触媒へと応用した結果についても報告する。

参考文献

[1] 古山ほか、化学工学論文集、29 (2003) 214.

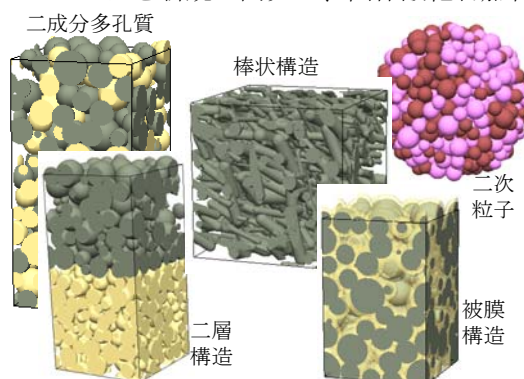


図 1 開発手法により構築された様々な多孔質構造

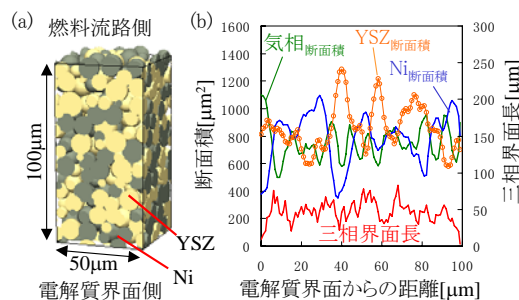


図 2 SOFC 燃料極の(a)多孔質構造、および(b)微細構造定量評価結果

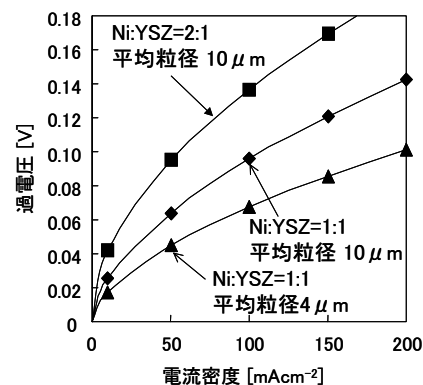


図 3 開発手法による SOFC 燃料極過電圧特性計算結果