

三次元多孔質シミュレータに基づく多孔性材料の マルチスケールシミュレーション

○古山通久¹、扇谷 恵¹、服部達哉¹、石本良太¹、坪井秀行¹、畠山 望¹、遠藤 明¹、高羽洋充¹、久保百司¹、Carlos Del Carpio¹、宮本 明^{1,2}

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)

【緒言】

著者らは、多孔性材料を計算機上で定量的に扱うための手法として三次元多孔質シミュレータを開発してきた。三次元多孔質シミュレータにより構築された多孔質構造に基づき複雑な多孔質微細構造を定量的に評価することが可能であり、評価された微細構造パラメータや多孔質構成材料の物性などを入力として、実特性のシミュレーションが可能である。

本研究では、同手法に基づく多孔性材料のマルチスケールシミュレーションについて報告する。

【方法】

本研究の多孔性材料のシミュレーションは、三次元多孔質シミュレータPOCO^{2 [1-3]}に基づき行った。

【結果】

図1に、色素増感型太陽電池用TiO₂電極を例とした、三次元多孔質シミュレータに基づくマルチスケールシミュレーションの概念図を示す。TiO₂のバンド構造、TiO₂のキャリアモビリティおよびTiO₂電極表面に存在する色素の光吸収特性を量子化学計算に基づき算出する。三次元多孔質シミュレータによりTiO₂電極の多孔質構造を作成し、多孔質電極の微細構造パラメータ、量子化学計算により得られた物性、入射光データを入力として、実特性の予測が可能である。三次元多孔質シミュレータに基づくマルチスケールシミュレーションの実現により、物性制御による特性向上や構造制御による特性向上に向けた研究開発とデバイス設計をシームレスにつなぐ研究基盤としての同手法の応用展開が期待される。

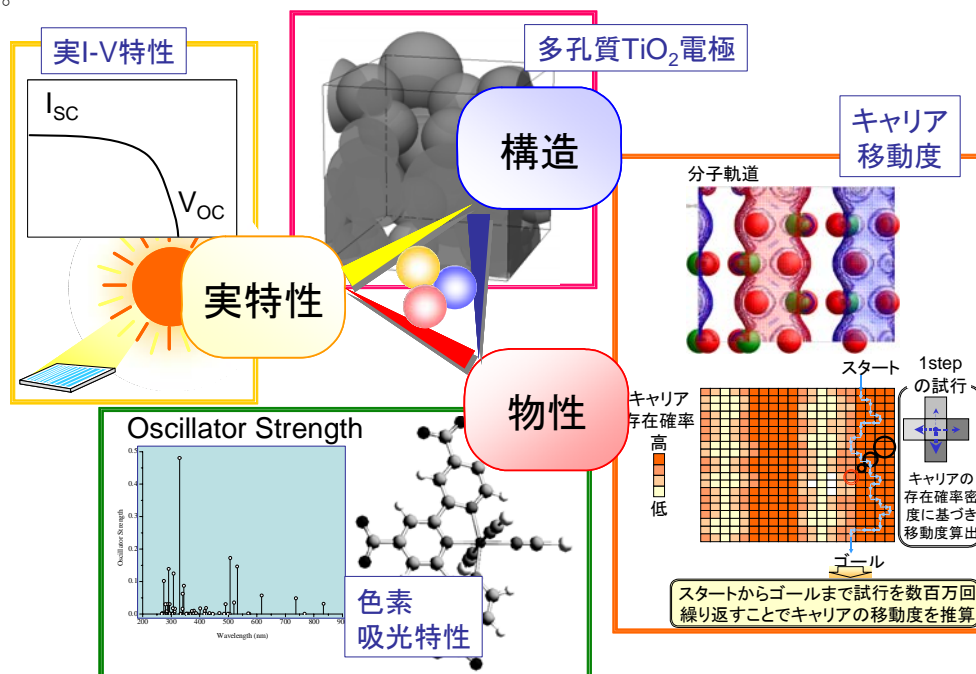


図1 三次元多孔質シミュレータに基づく色素増感型太陽電池用TiO₂多孔性電極のマルチスケールシミュレーション概念図

References

- [1] M. Koyama et al., ECS Trans., submitted.
- [2] 古山通久ほか, 燃料電池, 6, No. 2 (2006) 114.
- [3] 古山通久ほか, 新素材マニュアル, 23 (2006) 26.