

不規則性多孔質電極マルチスケールシミュレーション手法の開発と応用

○古山通久¹、金寶英¹、扇谷恵¹、服部達哉¹、呂晨¹、鈴木愛²、Riadh Sahnoun¹、坪井秀行¹、畠山望¹、遠藤明¹、高羽洋充¹、Carlos Del Carpio¹、Ramesh C. Deka²、久保百司³、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)³東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター
(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-701)

【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構造モデル化には、三次元多孔質シミュレータ POCO² を用い、マイクロ特性解析には超高速化量子分子動力学プログラム New-Colors などを用いた。

【結果】

図1に、三次元多孔質シミュレータを活用した固体高分子形燃料電池 (PEFC) マルチスケールシミュレーション例を示す。PEFCの触媒層はH⁺伝導性のアイオノマー、電子伝導性のカーボン、カーボン表面に担持された白金が複雑な電気化学反応場を形成しており、その中で様々な反応や物質移動が同時並行的に進行する。著者らは、図1中央に示す触媒層構造モデルを三次元多孔質シミュレータにより構築し、構造モデルの微細構造特性、分子シミュレーションから算出されるH⁺伝導特性などの物性、温度や湿度など作動条件を入力としてPEFCの電流・電圧特性を算出可能なマルチスケールシミュレーション手法を開発した。開発手法により、微細構造や物性が実際のPEFC特性に与える影響の定量的予測が実現された。マルチスケールシミュレーション手法の詳細と具体的な応用について報告する。

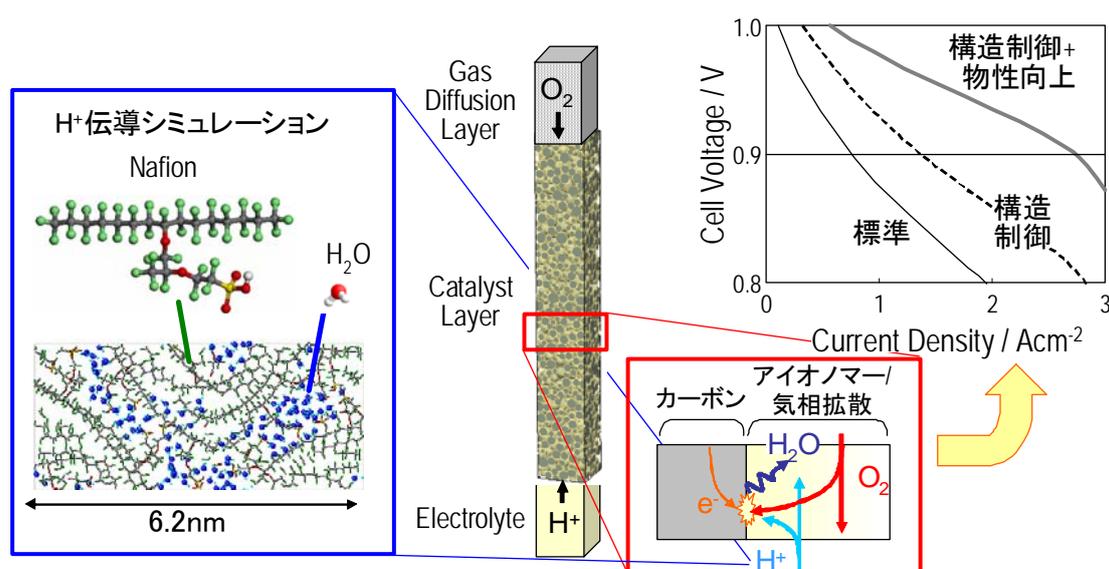


図1 三次元多孔質シミュレータに基づく固体高分子形燃料電池多孔性電極のマルチスケールシミュレーション例