

固体酸化物燃料電池燃料極劣化現象の計算化学解析

○古山通久^{1,2,3}、中尾和英³、小倉鉄平⁴、石元孝佳^{1,3}

1 九州大学稲盛フロンティア研究センター（〒819-0395 福岡市西区元岡 774）

2 九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所（〒819-0395 福岡市西区元岡 774）

3 九州大学大学院工学府水素エネルギーシステム専攻（〒819-0395 福岡市西区元岡 774）

4 九州大学水素エネルギー国際研究センター（〒819-0395 福岡市西区元岡 774）

【緒言】

固体酸化物燃料電池は、2011年秋の市販化が目前であり、現在活発な研究開発がおこなわれている。次世代機に向けた改良や根本的な課題解決に向けて、劣化現象の理解が求められる。本研究では、燃料極の劣化現象に焦点を当てて計算化学的解析を行った。

【方法】

計算には分子動力学プログラム Ryudo-GPU および密度汎関数プログラム Castep を使用した。

【結果】

Ni-YSZ (Y_2O_3 stabilized ZrO_2) 燃料極の長期シンタリング特性を解析する目的で、Ni 粒子モデルを用いて、分子動力学法を用いたシンタリング特性シミュレーションを行った。図1には、計算の初期構造およびシンタリングシミュレーション後の構造の例を示す。全て Ni 原子であるが、初期粒子の区別をするため色を変えて表示した。分子シミュレーションの特性から実時間・実空間スケールの特性を予測するため、マスターシンタリングカーブ理論を適用することとし、マスターシンタリングカーブ作成のためのシミュレーションを行った。図2には、初期の空隙率・計算の温度・時間を変えたシミュレーションを行い、最終構造における相対密度を算出した結果を示す。

マスターシンタリングカーブ理論の詳細および得られた結果からマスターシンタリングカーブを導出した結果について報告する。

【謝辞】

本研究の一部は、京セラの支援および科学研究費補助金若手研究 (A) よりの支援により行われた。こし記し謝意を表す。

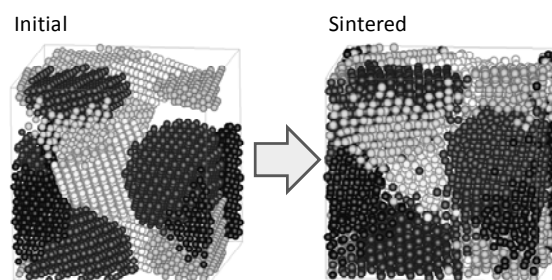


図1 多孔体モデルを用いたシンタリングシミュレーションモデル構造

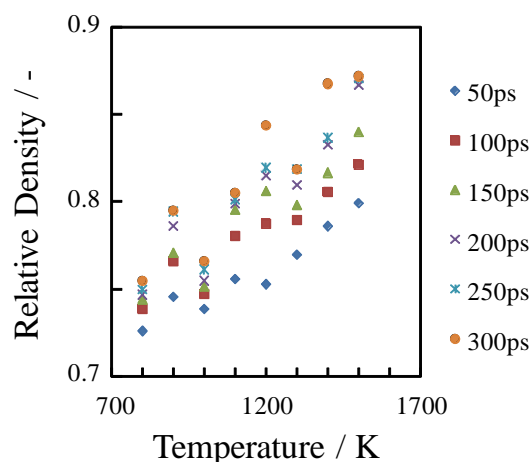


図2 シンタリングシミュレーションから得られた相対密度