

固体酸化物形燃料電池の破壊特性に関する 分子動力学シミュレーション

○坂之井 遼太、許 競翔、尾澤 伸樹、島崎 智実、久保 百司

東北大学大学院工学研究科（〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11）

1. 緒言

現在、SOFCの電解質として、中低温においても高いイオン伝導率を示すガドリニアドープセリア(GDC)が注目されている[1]。しかし、GDCはヒートサイクルによる破壊や性能劣化が問題となっているため、GDCの破壊メカニズムの解明が耐久性の向上に強く求められている。また、破壊メカニズムの解明には原子・分子レベルでの解析が必要である。そこで本研究では、GDCの機械特性・破壊特性を分子動力学シミュレーションにより評価した。

2. 方法

今回は、分子動力学プログラムNEW-RYUDOを用いて計算を行った。用いたポテンシャルは、Born-Mayer-Huggins(BMH)ポテンシャルである[2]。BMHポテンシャルの式を下記に記す(1)。

$$E = \frac{Z_i Z_j}{r} e^2 + f_0 (b_i + b_j) \exp \frac{a_i + a_j - r}{b_i + b_j} \quad (1)$$

3. 結果

GDCは不定比性化合物であるため、水素燃料などの還元雰囲気下で酸素空孔が生成する。そのため、YSZでは生じなかった問題がGDCの場合は問題となる可能性がある。また、S.Zhaらは、GDCのGd³⁺濃度が15%の時に電気伝導率が最大となることを報告している[3]。燃料電池の材料として、電気伝導率の観点からは15%の時が適しているが、材料強度の観点からも考察する必要がある。

そこで、GDCモデルの酸素濃度およびGd³⁺濃度を変えていき、これらのモデルに対してヤング率および強度を計算した。その結果を図1、2に示す。図1より、酸素濃度の減少に伴いヤング率は減少する一方、引張強度は酸素濃度の減少には依存せずほぼ一定の値を示した。図2より、

Gd³⁺濃度の増加に伴いヤング率は減少する一方、引張強度はGd³⁺濃度が増加には依存せずほぼ一定の値を示した。一般的に、材料中の酸素欠陥が増加すると材料の機械的強度は減少すると考えられるが、今回の結果より、GDCのヤング率は酸素濃度及びGd³⁺濃度に依存した値を示す一方、強度はこれらの濃度には影響を受けないことが理解された。詳細については当日発表する予定である。

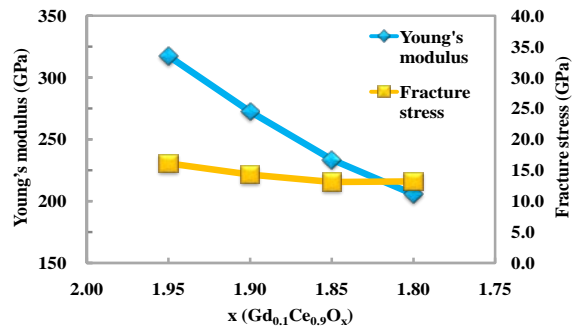


図1 GDCの酸素濃度依存性

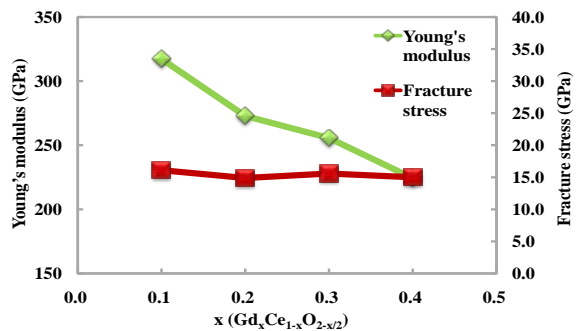


図2 GDCのGd³⁺濃度依存性

4. 参考文献

- [1] K. Sato et al., *Journal of Materials Science*, 39 (2004) 5765.
- [2] H. Hayashi et al., *Solid State Ionics*, 131 (2000) 281.
- [3] S. Zha et al., *Journal of Power Sources*, 115 (2003) 44.