

固体酸化物形燃料電池燃料極の

マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション

○古山 通久^{1,2}、中尾 和英^{1,2}、劉 世学^{1,2}、小倉 鉄平^{1,2}、石元 孝佳^{1,2}、松村 晶^{1,2}、
原 祥太郎^{2,3}、多田 朋史^{2,3}、梅野 宜崇^{2,3}、鹿園 直毅^{2,3}

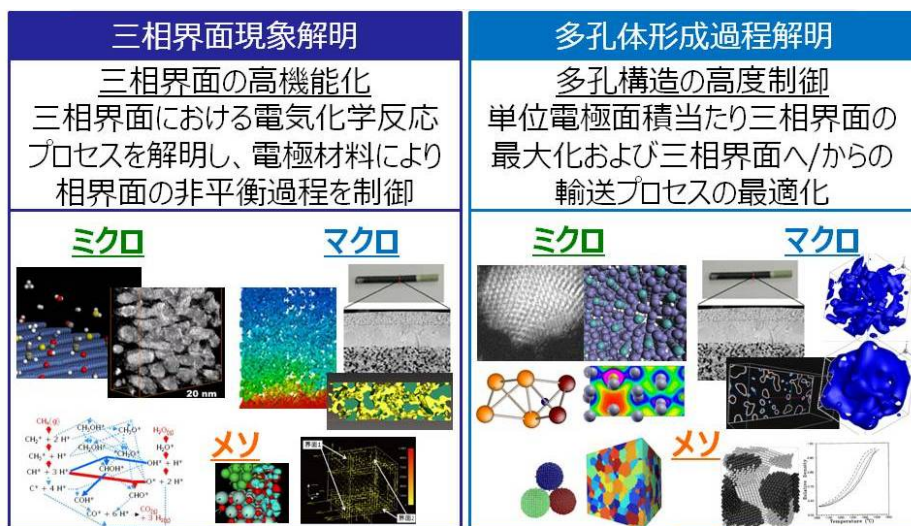
¹九州大学（〒819-0395 福岡市西区元岡 744）

²科学技術振興機構 CREST（〒102-0075 東京都千代田区五番町 7）

³東京大学（〒153-8505 目黒区駒場 4-6-1、〒113-8654 文京区本郷 7-3-1）

固体酸化物形燃料電池の高効率化のためには、電池内の反応・輸送現象に伴って生じる不可逆的な損失の低減が重要である。本研究では、時間・空間スケールの異なる複数のシミュレーション技術を連係するとともに実験計測と協働することで、電極の三相界面における現象を解明し、その微構造制御に基づく高活性化を目指す。図 1 にはその概要を示す。本研究では、実験との協働によるマルチレベルでの数値シミュレーションを連成させることで、(1) 電極界面反応の解明に基づく電極材料の高性能化、(2) 電極内輸送特性の向上による高性能化の二つの観点から電極の高活性化に取り組む。後者は、電極多孔構造形成過程の解明に基づく電極微構造の制御を目指すことで実現する。

電極反応の解明に向けては、高度な TEM 観察に基づき原子レベルでの電極三相界面構造を明らかにし、その実構造を反映させた分子モデリングを実現する。その現実的構造場における反応障壁を第一原理的に明らかにし、反応シミュレーションや動的モンテカルロシミュレーションへの入力とすることで、電流-電圧特性を導出する。電流-電圧特性は実験的観測データと対照することで開発手法の妥当性の検証を行う。三相界面現象解明に向けたアプローチおよび具体的取り組み例について報告する。



材料の最適化・構造の最適化による
電極三相界面におけるエネルギーロス（過電圧）の大幅低減

図 1 固体酸化物形燃料電池燃料極の電極材料設計・電極構造最適化のためのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションアプローチ