

## 分子動力学法を用いたニッケル多孔体シンタリング特性解析

○中尾 和英<sup>1,2</sup>、石元 孝佳<sup>2,3</sup>、古山 通久<sup>1,2,3</sup>

1 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744)

2 科学技術振興機構 CREST (〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's五番町)

3 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 744)

## 【緒言】

固体酸化物形燃料電池燃料極における性能劣化予測を行うためには、計算によるニッケルシンタリング特性の予測が重要となる。本研究では、分子動力学法を用いて純ニッケル多孔体のシンタリング特性の解析を行った。

## 【方法】

計算には分子動力学プログラムLAMMPS を使用し、Ni間相互作用はMishinらによるEAMポテンシャルを用いた。また、シンタリング特性の解析をマスターシンタリングカーブ(MSC)<sup>[1]</sup>の構築によって行った。

## 【結果】

図1には、計算に用いられたニッケル多孔体モデルの例とシンタリングの進展の様子を示す。本研究では、空隙率を変化させた多孔体モデルを複数使用し、各多孔体モデルの分子動力学シミュレーションから算出される相対密度変化を用いてMSCの構築を行った。図2には、シミュレーション結果の合成及びフィッティングによって得られたMSCを示す。図2のドットは一つのシミュレーション結果を表している。MSCの横軸である $\theta$ は次の式で表される：

$$\theta = \int \frac{1}{T} \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) dt$$

ここで、 $T$  は絶対温度、 $Q$  は活性化エネルギー、 $R$  は気体定数、 $t$  はシンタリング時間となる。この $\theta$ は投入された熱エネルギーを表している。MSCの詳細および得られたMSCの解析によって得られたニッケル多孔体のシンタリング特性について報告する。

## 【参考文献】

[1] H. Su et al., *J. Am. Ceram. Soc.*, **79**, 3211 (1996).

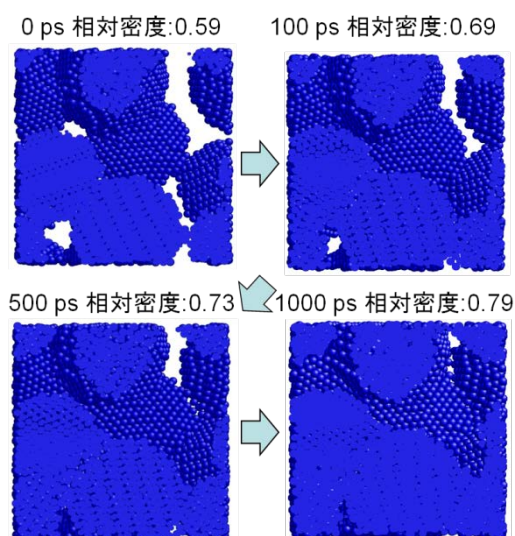


図1 用いられた多孔体モデルの例とシンタリングの進展の様子

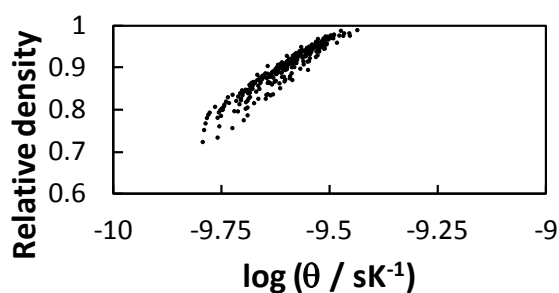


図2 シミュレーション結果から構築されたMSC