

SOFC 燃料極の Ni 上における CH_4 , C_2H_6 混合気体に関する 表面反応数値解析

○藤原徹也¹、河野晴彦^{2,3}、石元孝佳^{2,3}、古山通久^{1,2,3,4}

¹九州大学工学部機械航空工学科(〒819-0395 福岡市西区元岡 744)

²九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)

³JST-CREST(〒102-0076 東京都千代田区五番町 7 K's 五番町)

⁴九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 744)

【緒言】

固体酸化物形燃料電池(SOFC) の特徴の 1 つに CH_4 等の炭化水素を直接内部改質により使用できる点が挙げられる。この直接内部方式により装置の小型化が実現できるため、分散型電源などへの使用が期待されている。分散電源としての汎用性を向上させるために様々な燃料を使用できることが望ましいが、 C_2H_6 をはじめとする高次炭化水素を使用した場合の Ni 触媒上での反応および炭素析出機構などについては現在も不明な点が多い。また、これらは実験による観察が困難であるため数値計算による解析が行われているが、燃料電池の燃料極に特化した解析は現在ほとんど行われていない。そこで、本研究では SOFC 燃料極での高次炭化水素利用時の表面反応に関する解析手法の確立に向けて、 CH_4 改質に関する数値計算プログラム[1]を改良して新たに C_2H_6 改質プログラムを開発した。新たに開発した数値計算プログラムを用いて CH_4 , C_2H_6 混合気体に関する表面反応シミュレーションを行い、温度や S/C 比(スチーム/カーボン比)など条件の違いによる表面吸着種の変化について解析した。

【方法】

本研究では、Ni 表面について零次元の定式化を行った。支配方程式は、化学反応における正味のフラックスをソース項として有する拡散方程式で記述される。本解析における表面化学反応と拡散の時間スケールは大きく異なるため、時間に関して支配方程式を陰的に離散化した。また、各反応における活性化エネルギー等のパラメータについては参考文献[1-3]にあるものを使用した。

【結果】

図 1 は CH_4 : C_2H_6 =1:1 の割合で構成された炭化水素ガスに対して S/C を 1 から 5 まで変化させた場合の主な吸着種の被覆率を示したものである。H*や CO*は S/C の違いによる吸着種の変化はそれほど見られなかったのに対し、C*や CC*は最大で 1000 倍ほどの被覆率の変化が見られた。このことから、C*や CC*は H*や CO*と比較して S/C に対し敏感であると言える。その他の計算条件に対する結果は、当日報告する。

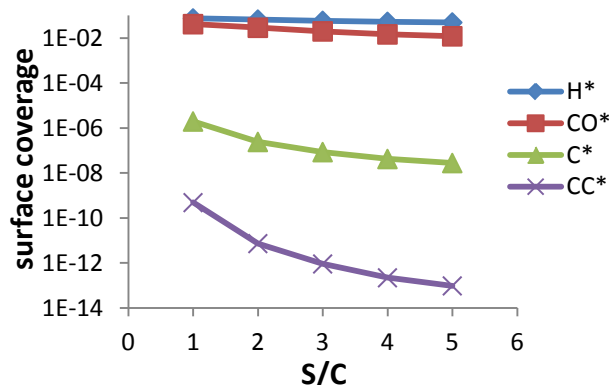


Fig.1 Surface coverage for changing S/C.

【参考文献】

- [1] D. W. Blaylock, T. Ogura, W. H. Green, and G. J. O. Beran, *J. Phys. Chem. C*, **113**, 4898 (2009).
- [2] J. E. Mueller, A. C. T. van Duin, and W. A. Goddard III, *Competing*, *J. Phys. Chem. C*, **114**, 20028 (2010).
- [3] I. V. Kuz'min and A. V. Zeigarnik, *Kinet. Catal.*, **45**, 561 (2004).