

## SOFC 三相界面の実構造観察に基づく反応ダイナミクス

○石元孝佳<sup>1,2</sup>、刘世学<sup>1,2</sup>、Leton C. Saha<sup>1,2</sup>、劉淑生<sup>1,2</sup>、古山通久<sup>1,2,3</sup><sup>1</sup>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)<sup>2</sup>JST-CREST(〒102-0076 東京都千代田区五番町 7 K's 五番町)<sup>3</sup>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】

固体酸化物燃料電池(SOFC)の燃料極における電気化学反応は、電極・電解質・空孔からなる三相界面(TPB)近傍で生じている。SOFC の高効率化のためには、TPB での反応機構の理解と微細構造を制御した最適な反応場の設計が重要である。シミュレーション技術を利用した研究が盛んに進められているがそれらの多くは TPB での化学反応を模しているとは言い難い。例えば、SOFC 動作環境下を仮定した O で被覆された Ni 触媒表面での反応解析が必要となるが、多くの第一原理計算では単純な Ni 表面を想定している[1]。また、TPB 構造を頭に取り込んだモデルに対する第一原理計算も重要である。さらに、より現実的な TPB での反応や表面構造を解析するためには SOFC 動作温度での大規模な反応ダイナミクスを解析する必要がある。本研究では、SOFC の TPB 近傍での最適な反応場の設計を目指し、時間・空間スケールの異なるシミュレーション技術を連携して化学反応機構を解析した。

## 【方法】

第一原理計算には密度汎関数理論(DFT)に基づいた VASP プログラムを使用した。化学反応を考慮した分子動力学法としては Lammmps プログラムを使用した。

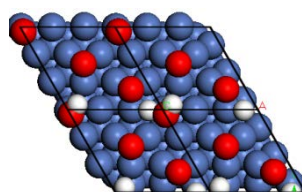
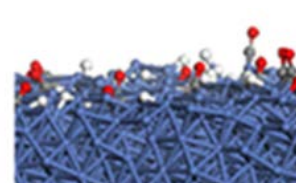
Fig.1 Transition state of H<sub>2</sub>O formation on oxygen covered Ni(111) surface.

Fig.2 Snapshot of H/C/O covered Ni surface at 973 K.

## 【結果】

SOFC 動作環境下での反応機構解明に向けて、VASP、Lammmps を用いて Ni 表面での化学反応を解析した。図 1 には、Ni 表面での水生成反応の遷移状態を示す。酸素による Ni 表面被覆を考慮した結果、遷移状態エネルギーが酸素被覆なしの場合に比べて約 0.1 eV 低下した。また、Lammmps による動作環境下の反応ダイナミクスを解析した結果、H、O などにより Ni 表面が覆われている場合は燃料であるメタンの反応性が低下することが分かった(図 2)。これらの結果に基づき、現在図 3 に示すような TPB モデルを用いた反応機構解析および電子顕微鏡による TPB の直接観察に取り組んでいる。実構造をモデリングに反映させることでより現実の系に近い TPB モデルでの解析が可能になると期待している。

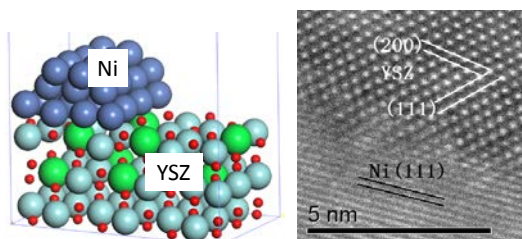


Fig.3 Modeling and observation of TPB.

## 【謝辞】

九州大学稲盛フロンティア研究センターの研究活動は京セラ(株)の支援により行われた。また電子顕微鏡観察は九州大学超高压電子顕微鏡室において実施された。関係各位に感謝する。

## 【参考文献】

- [1] E. S. Hecht, G. K. Gupta, H. Zhu, A. M. Dean, R. J. Kee, L. Maier, and O. Deutschmann, *Appl. Catal. A: General*, **295**, 40 (2005).