

## 固体酸化物形燃料電池の界面におけるカチオンの拡散経路の理論解析

○林 敬堂<sup>1,2</sup>、石元 孝佳<sup>2,3</sup>、古山通久<sup>1,2,3,4</sup>

<sup>1</sup>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)

<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>4</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】

固体酸化物形燃料電池(SOFC)は高効率でクリーンな発電システムとして注目されている。SOFCでは空気極にランタンストロンチウムコバルトフェライト(LSCF)、反応防止層にガドリニウムドープセリア(GDC)、電解質にイットリウム安定化ジルコニア(YSZ)などが用いられる。このSOFCでは空気極のSrが反応防止層を通過して電解質に拡散し、絶縁性物質が析出することにより電解質の電気伝導性が低下する[1]。このようなカチオン拡散がSOFCの劣化要因の一つとなっているためSrなどのカチオンの拡散メカニズムの解析が重要である。分子動力学(MD)法はこのような原子スケールの現象の解析に用いられるが、通常のMDシミュレーション時間ではカチオンの拡散はとらえることは困難である。そのため、付加ポテンシャルを加え反応の確率を上げるメタダイナミクス法がこのような解析には有効である[2]。SOFCの空気極から電解質までのカチオンの拡散の全体像を捕らえるためには、LSCF、GDC、YSZとそれらの界面の5つに分け、各部での拡散を解析する必要がある。本研究では、その第一歩としてバルクのYSZ内でのYとSrの拡散経路とメカニズムを解析した。

### 【方法】

本研究ではYSZおよびSrをドープしたYSZの2つのモデルを使用した。双方とも4x4x4のスーパーセルでY<sub>2</sub>O<sub>3</sub>を8mol%ドープしている。またカチオン拡散の起点のためZrが1つ取り除かれている。計算には古典分子動力学計算ソフトのLAMMPSを使用し、原子間ポテンシャルにBorn-Mayer-Huggins(BMH)ポテンシャルを使用した。

### 【結果】

まずYSZ中のYの拡散経路を解析した。図1.a)にYSZ内のYの拡散経路、また図1.b~f)に矢印の方向から見たYの拡散メカニズムの模式図を示す。初期状態はYとカチオン空孔との間には酸素と酸素空孔が1つずつあった(図1b))。Yとカチオン空孔との間に酸素空孔が2つできるとYは拡散を始めた(図1c))。Yが拡散している間、2つの酸素空孔が存在し(図1d)e))、Yがカチオン空孔に拡散してしばらくすると一方の酸素空孔に酸素が拡散した(図1f))。このようにYとカチオン空孔の間の酸素空孔が増えたことによってYの拡散が始まった考えることができる。SrをドープしたYSZ内でのYとSrの拡散経路とメカニズムについては当日報告する。

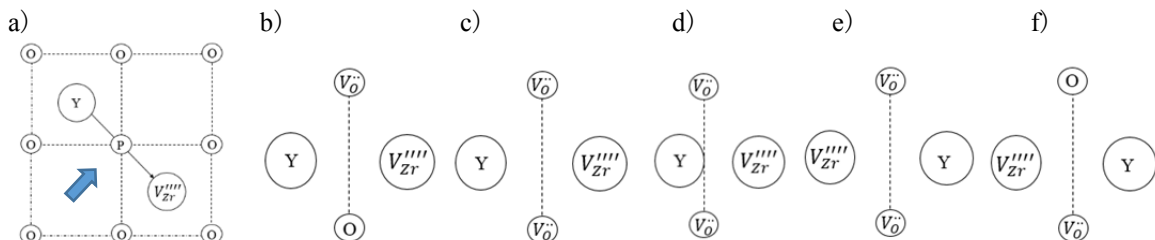


図1. a) YSZ内でのYの拡散経路の模式図、b)~f) YSZ内でのYの拡散メカニズムの模式図

### 【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。関係各位に感謝する。

### 【参考文献】

[1] M. Z. Khan, R. H. Song, S. B. Lee, J. W. Lee, T. H. Lim, and S. J. Park, *Int. J. Hydrogen Energy*, **39**, 20799 (2014).

[2] U. Aschauer, P. Bowen, and S. C. Parker, *Acta Materialia*, **57**, 4765 (2009).