

エネルギー高効率利用のための相界面科学
平成 23 年度採択研究代表者

H27 年度 実績報告書

古山 通久

国立大学法人 九州大学 稲盛フロンティア研究センター
教授

固体酸化物形燃料電池電極の材料・構造革新のための
マルチスケール連成解析基盤

§ 1. 研究実施体制

(1)「古山」グループ

- ① 研究代表者:古山 通久 (九州大学稲盛フロンティア研究センター、教授)
- ② 研究項目
 - ・電子顕微鏡による実電極構造の解析
 - ・分子シミュレーションによる三相界面反応の解析
 - ・反応シミュレーションを活用した三相界面局所活性の解析
 - ・分子シミュレーションに基づく焼結機構の解明
 - ・空気極材料の酸素解離活性の理論解析
 - ・燃料極における SMSI と炭素析出に関する理論解析

(2)「鹿園」グループ

- ① 主たる共同研究者:鹿園直毅 (東京大学生産技術研究所、教授)
- ② 研究項目
 - ・焼結プロセスの数値シミュレーション
 - ・局所三相界面活性の実験的および格子ボルツマン法による解明
 - ・LSCF-GDC コンポジット空気極の分極特性予測
 - ・電解質・燃料極界面近傍のシタリング素過程解析
 - ・分子動力学解析による NiO 還元反応速度の取得

(3)「多田」グループ

- ① 主たる共同研究者:多田朋史 (東京工業大学元素戦略研究センター、准教授)
- ② 研究項目
 - ・並列化キネティックモンテカルロ法による局所電流密度計算
 - ・三相界面における燃料酸化反応におけるドーパント依存性

(4)「原」グループ

- ① 主たる共同研究者:原祥太郎 (千葉工業大学工学研究科、准教授)
- ② 研究項目
 - ・電極多孔構造形成過程のモデリング

§ 2. 研究実施の概要

本プロジェクトは、固体酸化物形燃料電池の電極実構造観察に基づく電極反応および焼結プロセスのマルチスケール解析を可能とする手法を構築し、それらに基づき電極高機能化を目指して研究を推進している。

本年度は、プロジェクトの五年度目であり、これまでに取り組んできた手法開発を完了し、開発手法を実践課題に適用し、その完成度を高めるとともに、既存手法も活用することで現象解明に取り組み、高性能化の指針を獲得し、実験的な検証に向けた議論を行った。

手法の開発としては、電極作製プロセスにおける多孔構造の形態変化を予測するために、メゾスケールの動的モンテカルロ法およびフェーズフィールド法シミュレーションコードの開発の課題を継続し、それぞれの手法間の入出力の連携ツールを整備した。そのことにより、電極粉末からの焼成、焼成後多孔体の還元、還元構造に基づく長期微構造変化、の各プロセスをつないだシミュレーションが可能となった。また、三相界面反応のメソスケール解析のための並列化動的モンテカルロ法の開発を完了し、燃料極ガス雰囲気に対する局所活性を導出することができた。

開発手法および各種分子シミュレーション技術を活用した仮想実験に基づき、構造の観点および材料の観点からの高性能化に向けた指針を複数得ることができた。加えて、本領域の東北大学川田チームとの連携課題として、空気極材料の高活性化の課題に継続して取り組んだ。高温動作環境下における空気極材料の電子状態を明らかにした公表成果に基づき、酸素解離能の活性起源の第一原理解析を推進した。300万コア時間超の計算資源を投入することで、 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_{3-\delta}$ における偏析安定性および偏析表面における反応経路を明らかにすることに成功した。また、格子ボルツマン法を用い、実測される特性を説明するための反応経路に関する知見を得ることができた。

代表的な原著論文

1. Z. Jiao and N. Shikazono, Simulation of the reduction process of solid oxide fuel cell composite anode based on phase field method, *J. Power Sources*, **305**, 10-16 (2016).
2. T. Ishimoto, Y. Ito, T. Tada, R. Oike, T. Nakamura, K. Amezawa, M. Koyama, Theoretical study on temperature-effect of electronic structure and spin state in LaCoO_3 by using density functional theory, *Solid State Ionics*, **285**, 195-201 (2016).
3. Y. Sun, H. Hara, Atomistic study of segregation and diffusion of yttrium and calcium cations near electrolyte surface in solid oxide fuel cells, *J. Euro. Ceram. Soc.*, **35**, 3063-3074 (2015).