

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

H26 年度 実績報告書
-----------------

古山 通久

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

### (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
  - ・セル特性計測系および計算環境の構築
  - ・燃料極電流・電圧特性の実験評価
  - ・局所三相界面活性の解明
  - ・電位の表面電気化学反応への影響解明
  - ・構造形成過程の実験的追跡
  - ・焼結機構の解明
  - ・多孔構造形成過程のマルチスケールシミュレータの開発

### (3)「多田」グループ

- ③ 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)
- ④ 研究項目
  - ・第一原理計算からの三相界面キャラクタリゼーション
  - ・第一原理計算からの高活性三相界面構造の決定
  - ・第一原理計算と動的モンテカルロ計算による交換電流密度計算

## § 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。

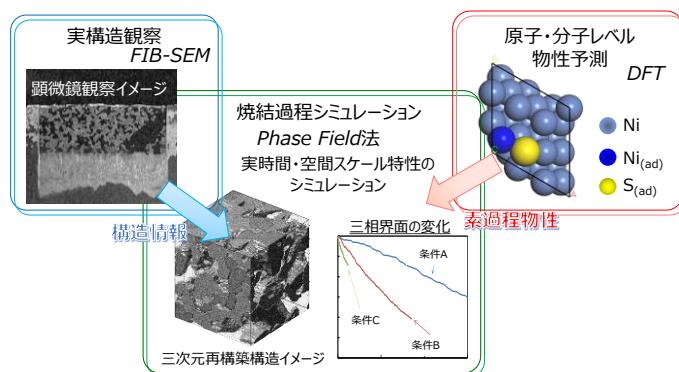
本年度は、プロジェクトの四年度目であり、これまでに取り組んできた手法開発を継続するとともに、開発手法や既存手法を活用した現象解明に取り組んだ。

手法の開発としては、本年度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、メソ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、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に特に注力した。電極作製、運用開始に係る焼成および還元プロセスに関してシミュレーション手法を開発し、実験計測を並行して行うことで、開発手法の妥当性を検証することができた。並列化動的モンテカルロ計算に関しては、種々のモデル系に関してテスト計算を繰り返すことで、電気化学場における信頼性の高いイオンダイナミクスシミュレーション手法として構築することができた。

第一原理手法に基づく燃料極三相界面における活性の解析からは、局所構造の重要性が明らかとなった。その結果に基づき、予備的な活性スクリーニングに着手し、活性向上に係る予備的指針を得た。

また、開発したフェーズフィールド法および密度汎関数法を活用し、原子レベル物性に基づくマルチスケールシミュレーションを実現

した(右図参照)。固体酸化物形燃料電池において、燃料ガス中に微量不純物として存在する硫黄が長期劣化特性に与える影響の理解は重要な課題であり、解析課題として設定した。燃料中の硫黄濃度を想定した際に、焼結によって反応活性サイトである三相界面がどのように変化するかを半定量的にシミュレーションすることに成功した。



さらに、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。空気極材料の X 線吸収スペクトルの理論解析を論文としてまとめるとともに、酸素解離能の活性起源の解析に着手し、反応素過程と電子状態に関する予備的な知見を集積することができた。

代表的原著論文

1. S.-S. Liu, Z. Jiao, N. Shikazono, S. Matsumura, and M. Koyama, Observation of the Ni/YSZ Interface in a Conventional SOFC, J. Electrochem. Soc., in press.
2. S. Hara, A. Ohi, and N. Shikazono, Sintering Analysis of Sub-Micron-Sized Nickel Powders: Kinetic Monte Carlo Simulation Verified by FIB-SEM Reconstruction, J.

Power Sources, 276, pp. 105-112 (2015).