

## 固体酸化物形燃料電池電極の 大規模シミュレーション



鹿園 直毅 (しかぞの なおき)

東京大学生産技術研究所  
教授

研究  
分野

熱エネルギー工学

固体酸化物形燃料電池 (SOFC) は、高温作動のため反応抵抗が小さく単体でも高効率であることに加え、排熱を利用することでシステムとして一層高い効率が得られる。また、酸化物イオン伝導体であるため多様な燃料を用いることができ、改質が容易であるという特徴もある。SOFCの電極は、サブミクロン程度の粒子を混合して焼結した多孔質構造となっており、電極反応場である三相界面 (Triple Phase Boundary) 密度、イオン・電子・ガス種の拡散パス等がその分極特性に大きな影響を与える。近年、収束イオンビーム走査型電子顕微鏡 (FIB-SEM) を用いることで、数ナノメートルから数十ナノメートルの解像度で電極3次元構造が再構築できるようになってきた。その構造内のイオン伝導、電子伝導、空隙内のガス拡散、および三相界面や表面での電気化学反応を連立させた数値シミュレーションを行うことで、実3次元構造を用いて電極の過電圧を予測する手法も提案されている。

しかしながら、電極反応が生じる数十ミクロンという反応領域を十分な分解能で解像し、数値的に精度よく予測し設計利用することは、これまでの計算機能力では十分に実現できていない。また、SOFCは高温作動であることから、長時間運転時の電極構造の経時変化が劣化の原因となっている。その構造変化を予測するためにフェーズフィールド法等の数値シミュレーション手法が提案されているが、十分な解像度と計算領域を両立するまでには至っていない。

本講演では、SOFC電極の高性能化や高信頼性に向けた設計ツールの高度化を目的に、電極内3次元過電圧予測シミュレーションおよびフェーズフィールド法による焼結シミュレーションの大規模計算について説明する。また、これらの数値シミュレーション技術の設計ツールとしての発展性や、産業界との連携についても紹介する。