

固体酸化物形燃料電池(SOFC)の研究

生産技術研究所 エネルギー工学連携研究センター 鹿園研究室

<http://www.feslab.iis.u-tokyo.ac.jp/>

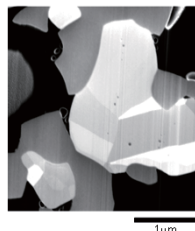
固体酸化物形燃料電池(SOFC)の電極では、電極反応の場である三相界面 (Triple Phase Boundary)や、ネットワークの屈曲度が、その過電圧特性に大きな影響を与える。本研究では、電極3次元微細構造をFIB-SEMにより再構築し、格子ボルツマン法(LBM)を用いた電荷輸送と電気化学反応を連立させた数値シミュレーションを行うことで、電極過電圧特性と微細構造の定量的な関係を明らかにする。

電極微細構造の3次元計測と分極シミュレーション

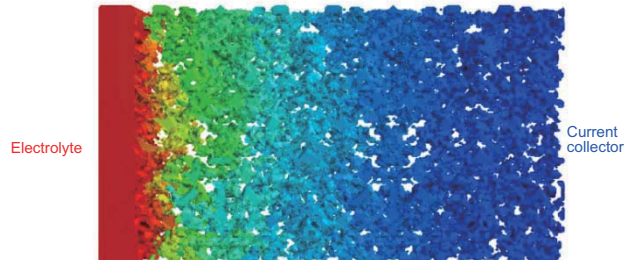
- ◆ Dual Beam FIB-SEMによる電極構造計測および格子ボルツマン法による3次元分極シミュレーション：収束イオンビーム(FIB)による試料研磨と低加速電圧SEMによる撮像をnmオーダーピッチで繰り返し、得られた数百枚の断面画像から電極3次元構造を再構築した。得られた構造を用い、局所の酸化イオン・電子・ガス種の拡散と、三相界面(TPB)での電気化学反応を連成した3次元格子ボルツマン法数値シミュレーション技術を開発した。



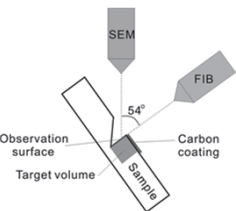
Carl Zeiss NVision40



Ni-YSZ燃料極断面画像



Ni-YSZ燃料極内酸化イオン電気化学ポテンシャル分布



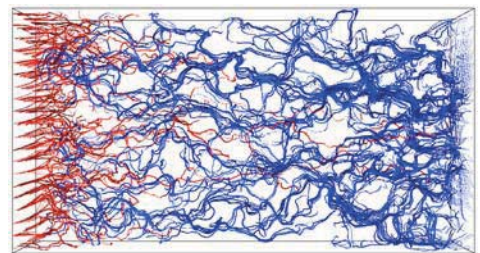
FIB-SEM測定の原理



三相界面分布



過電圧測定装置

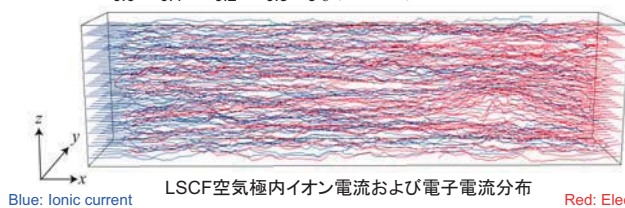


Ni-YSZ燃料極内イオン電流および電子電流分布

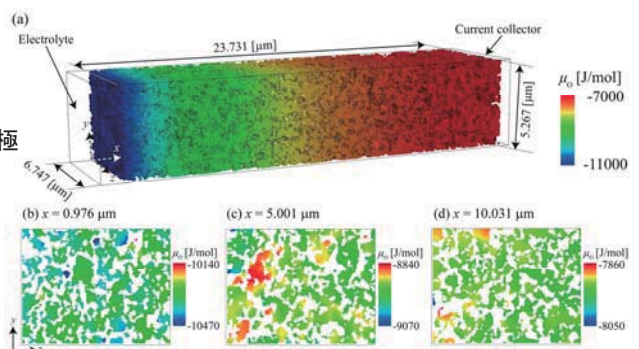
- ◆ 実電極を用いた交換電流密度の算出：過電圧実験データおよび分極シミュレーションにより、実電極の交換電流密度を算出。

	α	β	E_A [10^4 J/mol]	
Mizusaki <i>et al.</i> (1994)	-0.09 ~ 0.15	0.32 ~ 0.88	7.24	Patterned Electrode
de Boer (1998)	-0.26	0.37	15.44	Patterned Electrode
Bieberle <i>et al.</i> (2001)	0.11	0.67	8.49	Patterned Electrode
Utz <i>et al.</i> (2010)	0.07	0.68	9.75	Patterned Electrode
Present study	0.0 ~ 0.2	0.86	9.00	Real Electrode

- ◆ 混合導電性空気極の分極シミュレーション：高性能な混合導電性空気極である $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$ (LSCF)の分極シミュレーションを実施



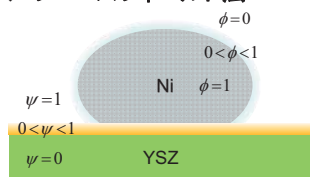
LSCF空気極内イオン電流および電子電流分布



LSCF空気極内酸素ポテンシャル分布

電極構造変化の予測

- ◆ フェーズフィールド法: Ni-YSZ燃料極中のNi焼結の数値シミュレーション



Ni and YSZ phases: Cahn-Hilliard Eq.

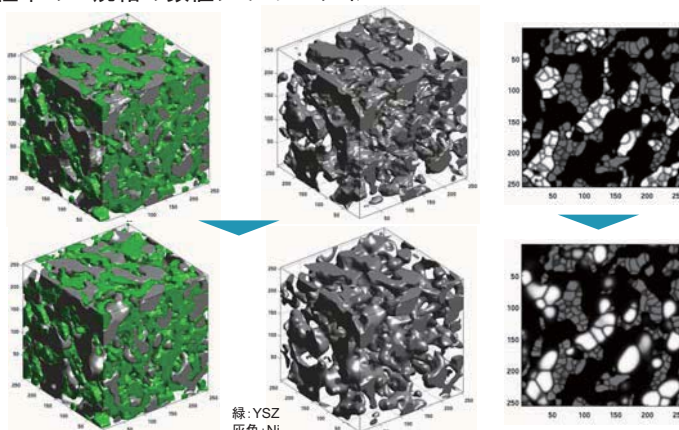
$$\frac{\partial C_{\text{Ni}}}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M_{\text{Ni}}^{\text{Ni}} \nabla \left[\frac{\partial f_{\text{Ni}}}{\partial C_{\text{Ni}}} - \kappa_{\text{Ni}}^{\text{Ni}} \nabla^2 C_{\text{Ni}} \right] \right]$$

$$\frac{\partial C_{\text{YSZ}}}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M_{\text{YSZ}}^{\text{YSZ}} \nabla \left[\frac{\partial f_{\text{YSZ}}}{\partial C_{\text{YSZ}}} - \kappa_{\text{YSZ}}^{\text{YSZ}} \nabla^2 C_{\text{YSZ}} \right] \right]$$

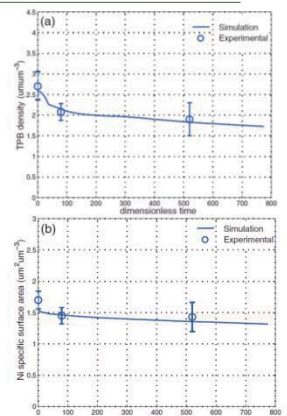
Crystal orientations in Ni and YSZ: Allen-Cahn Eq.

$$\frac{\partial \eta_i^{\text{Ni}}}{\partial t} = -L_i^{\text{Ni}} \left[\frac{\partial f_{\text{Ni}}}{\partial \eta_i^{\text{Ni}}} - \kappa_i^{\text{Ni}} \nabla^2 \eta_i^{\text{Ni}} \right]; i = 1, 2, \dots, p$$

$$\frac{\partial \eta_i^{\text{YSZ}}}{\partial t} = -L_i^{\text{YSZ}} \left[\frac{\partial f_{\text{YSZ}}}{\partial \eta_i^{\text{YSZ}}} - \kappa_i^{\text{YSZ}} \nabla^2 \eta_i^{\text{YSZ}} \right]; i = 1, 2, \dots, q$$



緑: YSZ
灰色: Ni



実験結果による検証
三相界面密度(上)と比表面積(下)