

コンピュータシミュレーションを用いた 固体酸化物形燃料電池(SOFC)における機械特性

○松山 健男、中村 美穂、島崎 智実、久保 百司

東北大学大学院工学研究科(仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-703)

固体酸化物形燃料電池(Solid Oxide Fuel Cell:SOFC)は極めて高い発電効率が実現可能であり、二酸化炭素の排出量の少なさからクリーンエネルギー変換技術として期待されている。これらの利点より、現在世界各地で SOFC の研究が進められている。しかし、SOFC の実用化には発電性能だけでなく、耐久性が重要課題となっている。

現在、SOFC の主な構成材料はセラミックスであり、機械的に脆弱であるため、機械的特性が重要になる。本研究では SOFC の代表的な構成材料であるイットリア安定化ジルコニア(Yttria Stabilized Zirconia :YSZ)の機械特性を分子シミュレーションにより評価した。今回のシミュレーションでは、分子動力学計算プログラム NEW-RYUDO を用いて計算を行った。

一般的な材料では温度が上昇するにつれヤング率が減少する。これに対し、Giraud¹⁾らが報告した YSZ のヤング率の温度特性では、温度が約 600°Cまで上昇すると、ヤング率が再び大きくなることが示されている。しかし、ヤング率が再び大きくなるメカニズムについてはまだ解明されていない。そこで、分子動力学法によってその詳細について調べた。まずは bulk モデルで計算を行い、ヤング率に影響を与える熱膨張率について考察を行った。Gibson²⁾らは熱膨張率が約 650°Cで変化し第2種相転移が起こることを報告した。しかし、bulk モデルの計算では相転移は確認出来なかった。そこで、次に YSZ のナノ粒子モデルを図 1 のように作成し、圧縮後計算を行った。熱膨張率についての結果を図 2 に示す。同図に示すようにナノ粒子モデルにおいては約 500°Cで熱膨張率が変化した。ナノ粒子モデルは、bulk モデルとは異なり相転移が起こっていることを確認した。つまり、相転移が熱膨張率の変化に影響していると考えられる。さらに、ナノ粒子モデルにおけるヤング率も検討を行った。計算の詳細とこれらの関係性は当日に議論する。

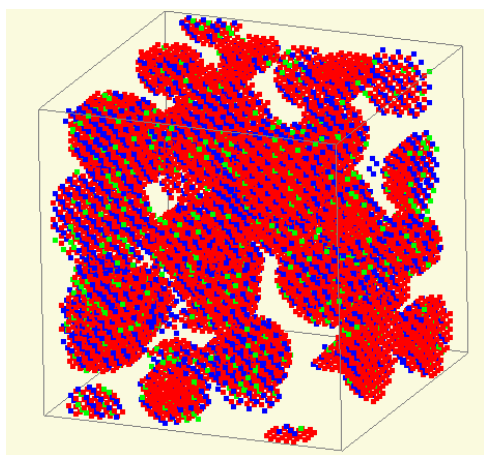


図 1 YSZ ナノ粒子モデル

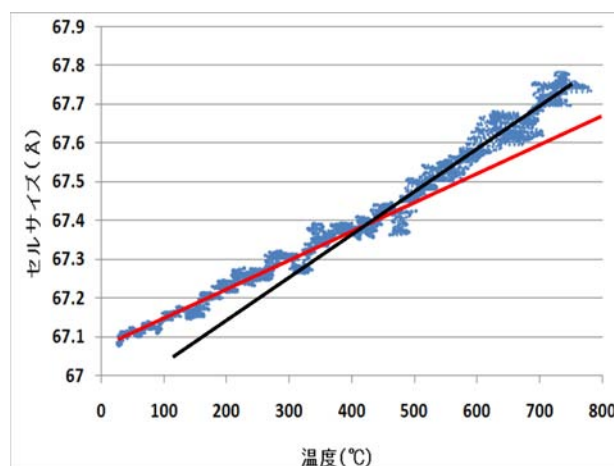


図 2 熱膨張率変化

参考文献

- 1) S. Giraud and J. Canel, *J. Eur. Ceram. Soc.*, **28**, 77-83 (2008).
- 2) Iain R. Gibson and John T. S. Irvine, *J. Mater. Chem.*, **6**, 895-898 (1996).